

Universitatea "Al. I. Cuza" Iași
Facultatea de Chimie
Colectivul de Chimie Fizică și Teoretică

PROGRAMA ANALITICĂ A CURSULUI

"Cinetică chimică"

Cod

anul al II - lea de studii, semestrul 2

2,5 ore de curs, o oră de laborator și o oră de seminar pe săptămână

Anul universitar 2008-2009

1. Obiectivele cursului:

Prezentarea elementelor fundamentale ale cineticii chimice - cinetica formală (deducerea ecuațiilor cinetice în cazul reacțiilor simple sau complexe), teoriile cineticii chimice și studiul sistemelor reactante complexe (particularități ale reacțiilor în soluție și a reacțiilor catalitice).

Lucrările practice și seminariile familiarizează studenții cu principalele metode utilizate în studiul cinetic al sistemelor chimice.

2. Conținutul de bază:

1. Noțiuni fundamentale ale cineticii chimice: sisteme închise sau deschise, reacții omogene și eterogene, reacții homofazice și heterofazice, sisteme uniforme și neuniforme spațial; reacții elementare și reacții complexe.
2. Viteza de reacție.
 - 2.1. Viteza de reacție în sisteme închise.
 - 2.2. Viteza de reacție în sisteme deschise.
 - 2.3. Influența concentrației asupra vitezei de reacție.
 - 2.4. Influența temperaturii asupra vitezei de reacție.
3. Cinetica transformărilor chimice simple.
 - 3.1. Reacții de ordinul zero, unu, doi sau trei.
 - 3.2. Sisteme chimice în care se desfășoară simultan mai multe reacții chimice.
4. Metode de evaluare a parametrilor cinetici fundamentali.
 - 4.1. Evaluarea ordinului de reacție și a constantei de viteză.
 - 4.2. Evaluarea factorului preexponențial și a energiei de activare.

5. Metode experimentale în cinetica chimică.
 - 5.1. Fotoliză cu puls laser. Spectroscopie de absorbție laser.
 - 5.2. Fotoliză laser și chemiluminiscență.
 - 5.3. Fluorescență indusă laser.
 - 5.4. Metoda modulării moleculare.
 - 5.5. Prelucrarea datelor cinetice și calculul erorilor.
 - 5.6. Analiză de sensibilitate.
6. Teorii ale vitezelor de reacție.
 - 6.1. Distribuția Maxwelliană a vitezelor moleculare. Distribuția Boltzmann. Funcții de partiție.
 - 6.2. Teoria activării prin ciocniri.
 - 6.3. Teoria stării de tranziție.
7. Reacții complexe.
 - 7.1. Reacții opuse.
 - 7.2. Reacții consecutive.
 - 7.3. Reacții paralele.
 - 7.4. Metode aproximative utilizate în cinetica chimică.
 - 7.5. Metoda matriceală de rezolvare a ecuațiilor cinetice.
8. Cinetica reacțiilor catalitice.
 - 8.1. Cataliză enzimatică.
 - 8.2. Cataliză eterogenă.
9. Reacții în soluție

3. Sistemul de evaluare a studentului: evaluare pe parcurs și examen final, scris.

4. Discipline care trebuie parcurse în prealabil: "Matematică"

5. Bibliografie curs:

1. A. Bîrzu, M. Dumitraș, *Cinetică chimică. Aspecte fundamentale*, MatrixROM, București, 2008.
2. R. I. Masel, *Chemical Kinetics and Catalysis*, Wiley, 2001.
3. J. Steinfeld, J. Francisco, W. Hase, *Chemical Kinetics and Dynamics*, Prentice Hall, 1989.
4. K. A. Connors, *Chemical Kinetics*, VCH, 1990.
5. K. J. Laidler, *Chemical Kinetics*, Harper&Row, 1987.

6. M. R. Wright, *An introduction to chemical kinetics*, Wiley, 2004.
7. D. V. Roberts, *Enzyme kinetics*, Cambridge University Press 1977.
8. R. Copeland, *Enzymes*, Wiley, 2000.

6. Tematica lucrărilor de laborator și a seminarilor:

- L1. Descompunerea catalitică a apei oxigenate în prezența FeCl_3/HCl . Determinarea ordinului de reacție.
- L2. Studiul cinetic al unei reacții de ordin zero. Coroziunea metalelor.
- L3. Studiul cinetic al unei reacții de ordin doi. Saponificarea acetatului de etil în mediu bazic.
- L4. Cataliza omogenă. Studiul cinetic al inversiei zaharozei.
- L5. Cataliza eterogenă. Descompunerea apei oxigenate în prezența dioxidului de mangan.
- S1. Noțiuni fundamentale ale cineticii chimice. Metode de determinare a parametrilor cinetici fundamentali. Cinetica formală a reacțiilor simple în sistem închis și deschis.
- S2. Influența temperaturii asupra vitezei de reacție. Ecuația lui Arrhenius.
- S3. Teorii în cinetica chimică.
- S4. Cinetica reacțiilor complexe.

7. Bibliografie laborator și seminar

1. V. Isac, N. Hurduc, „*Chimie fizică. CINETICĂ CHIMICĂ ȘI CATALIZĂ*”, Ed. Știința, Chișinău
2. N. Hurduc, L. Odochian și colab, „*Metode experimentale în cinetica chimică cu prelucrarea datelor pe calculator*”, Editura I.P.I., 1979
3. V. Isac, A. Onu, C. Tudoreanu, Gh. Nemțoi, „*Chimie fizică. Lucrări practice*”, Editura Știința, Chișinău, 1995
4. J.C. Dechaux, L. Delfosse, A. Perche, J.P. Sawerysyn, „*Problèmes de cinétique chimique avec solutions détaillées et rappels de cours*”, Masson, Paris, 1980
5. Niac Gavril, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, „*Formule, tabele, probleme de chimie fizică*”, Editura Dacia, Cluj-Napoca, 1984

25.09.2008

Titular de curs

Asistent

Conf.dr. Adrian Bîrzu

Asist. drd. Mihai Dumitraș