**سینتیک شیمیایی پیشرفته**

ترم اول – 99-1398 مقطع: کارشناسی ارشد

استاد درس: علی اکبر میرزائی

mirzaei@hamoon.usb.ac.ir

زمان درس:

امتحان میان ترم: 40%

امتحان پایان ترم: 60%

منابع مورد استفاده:

1. Fundamentals of chemical kinetic, publisher: Prentice all, S.R. Logan
2. Chemical kinetic, Imprint: ELSEVIER, Evgeny Denisov, Oleg Sarkisov, G. Likhtenshtien
3. Chemical kinetic and reaction mechanisms, Publisher: McGraw- Hill, Science/ Engineering/ Math, James H. Espenson
4. سینتیک شیمیایی پیشرفته ( جلد اول و دوم) انتشارات دانشگاه سیستان و بلوچستان ، مولفین: علی اکبر میرزایی – ابراهیم ملاشاهی – اکبر زارع- سمانه وحید

فهرست مطالب تدریسی:

 **الف) مقدمه ایی بر سینتیک شیمیایی**

1. سرعت واکنش
2. ارتباط بین سرعت واکنش و زمان
3. سینتیک ماکروسکوپی و میکروسکوپی
4. واکنش کند و سریع
5. بیان سرعت واکنش
6. تعیین سرعت واکنش
7. عوامل موثر در سرعت واکنش
8. ثابت سرعت
9. مولکولاریته واکنش
10. مرتبه واکنش
11. ثابت های سرعت و واحدهای آن
12. مرتبه و مولاریته واکنش ساده
13. مرتبه و مولاریته واکنش پیچیده
14. سینتیک واکنش های مرتبه صفر
15. سینتیک واکنش های مرتبه اول
16. ویژگی های واکنش های مرتبه اول
17. واحد های ثابت سرعت مرتبه اول
18. مثال هایی از واکنش مرتبه اول
19. واکنش های شبه تک مولکولی
20. واپاشی رادیواکتیو
21. قدرت نسبی اسیدها
22. سینتیک واکنش های مرتبه دوم
23. ویژگی های واکنش های مرتبه دوم
24. مثال هایی از واکنش های مرتبه دوم
25. مثال هایی از واکنش های مرتبه دوم
26. سینتیک واکنش های مرتبه سوم
27. ویژگی های واکنش های مرتبه سوم
28. مثال هایی از واکنش های مرتبه سوم
29. سینتیک واکنش مرتبه n ام

**ب) تعیین مرتبه واکنش**

1. روش های تعیین مرتبه
2. روش جداسازی
3. روش دیفرانسیلی وانتهوف
4. روش انتگرال گیری یا روش آزمون و خطا
5. روش تغییر جزیی
6. روش تغییر نسبت ها
7. روش نموداری
8. روش سرعت اولیه
9. روش نمودار پاول
10. روش آنالیز Guggenheim
11. روش مقایسه سرعت ها
12. مقایسه روش ها
13. سینتیک واکنش پیچیده
14. واکنش های رقابتی یا موازی
15. واکنش ها متقابل (برگشت پذیر)
16. واکنش های متوالی
17. واکنش های برگشت پذیر مرتبه اول با دو مرحله متوالی
18. واکنش متوالی با یک مرحله برگشت پذیر
19. اصل موازنه تفصیلی و اصل رگشت پذیری میکروسکوپی
20. واکنش های زنجیری و پلیمری شدن رادیکال های آزاد
21. واکنش های زنجیری
22. ویژگی های متمایز کننده واکنش های زنجیری
23. مکانیسم واکنش های زنجیری
24. آشکار سازی و ارزیابی اتم ها و رادیکال ها در واکنش زنجیری
25. سینتیک واکنش های زنجیری
26. واکنش خود اکسایشی
27. واکنش پلیمری شدن برخورد مولکولی و سرعت واکنش ها
28. اثر دما بر سرعت واکنش
29. معادله آرنیوس
30. بدست آوردن معادله آرنیوس
31. انرژی اکتیواسیون واکنش های شیمیایی

**ج) انرژی اکتیواسیون واکنش های شیمیایی**

1. کمپلکس های فعال
2. ویژگی های کمپلکس های فعال
3. نظریه برخورد سرعت واکنش
4. نظریه برخورد کلاسیک شیمیایی
5. رفتار ریاضی نظریه برخورد کلاسیک
6. نظریه تجربی برخورد ساده
7. نظریه برخورد اصلاح شده
8. نواقص نظریه اصلاح ساده
9. سرعت مطلق واکنش، نظریه حالت گذار
10. استنتاج مکانیک آماری معادله سرعت
11. فرمول بندی ترمودینامیک سرعت های واکنش
12. فرمول بندی ترمودینامیک سرعت های واکنش تک مولکولی
13. فرمول بندی ترمودینامیک سرعت های واکنش در محلول
14. فرمول بندی ترمودینامیک سرعت های واکنش در فاز گازی
15. مقایسه نظریه برخورد و نظریه سرعت مطلق واکنش
16. امتیازات فرمول بندی ترمودینامیکی به نظریه سرعت مطلق واکنش
17. واکنش های تک مولکولی
18. واکنش های تک مولکولی بنیادی
19. واکنش های تک مولکولی با مکانیسم های رادیکال های آزاد
20. نظریه های واکنش های تک مولکولی
21. نظریه Perrin
22. نظریه لیندمن
23. فرمول بندی ریاضی نظریه لیندمن
24. نقد نظریه لیندمن
25. انرژی اکتیواسیون یک واکنش پیچیده
26. نظریه هینشل وود
27. محدودیت های نظریه هینشل وود
28. نظریه Rise, Kassel و Ramsperger
29. نظریه PRKM
30. نظریه Slater
31. واکنش های سه مولکولی
32. مطالعه واکنش های سه مولکول بر طبق نظریه برخورد ساده
33. مطالعه واکنش های سه مولکول بر طبق نظریه برخورد Trautz
34. مطالعه واکنش های سه مولکول بر طبق نظریه برخورد Bodenstein
35. مطالعه واکنش های سه مولکول بر طبق نظریه برخورد مطلق
36. سینتیک واکنش سریع

**ه) سینتیک در محلول های مایع**

1. مقایسه بین واکنش های در فاز گازی و فاز محلول
2. نظریه سرعت مطلق واکنش مربوط به واکنش در محلول های ایده آل
3. نظریه سرعت مطلق قابل استفاده برای واکنش بین یون ها در محلول
4. اثرات حلال روی ثابت های سرعت
5. پیوندهای یون- یون
6. پیوندهای دو قطبی – دو قطبی
7. نیروهای واندروالس
8. پیوندهای یون- دو قطبی
9. سینتیک جانشینی هسته دوستی آلیفاتیک واکنش های مرتبه دو و مرتبه یک
10. جانشینی هسنه دویتی آلیفاتیکی ، دوگانگی مکانیسم
11. واکنش SN2 : مکانیسم و سینتیک مرحله تعیین کننده سرعت
12. جانشینی هسته دوست دومولکولی
13. واکنش SN1 : مکانیسم و سینتیک مرحله تعیین کننده سرعت
14. مقایسه ی SN2 و SN1
15. سینتیک هیدروهالوژن زدایی: دو گانگی مکانیسم
16. مکانیسم E2
17. جهت گیری و واکنش پذیری در واکنش E2
18. مکانیسم E1
19. جهت گیری و واکنش پذیری در واکنش E1
20. اثر سینتیکی ایزوتوپ
21. اثر ایزوتوپی بعنوان شاهدی برای مکانیسم E2
22. کاربرد نظریه مطلق در واکنش بین یون ها(اثر حلال)
23. ضرایب فرکانس
24. روابط خطی انرژی آزاد
25. معادله ی هامت
26. مفاهیم ترمودینامیکی روابط خطی انرژی آزاد
27. استنتاج معادله هامت
28. اثر حلال بر مقادیر ρ
29. اثر حلال بر مقادیر σ
30. معادله Taft
31. اثرات حلال بر سرعت
32. اثر نمک
33. اثر اولیه نمک
34. اثر ثانویه نمک
35. واکنش های کنترل نفوذی
36. طبقه بندی واکنش ها
37. نفوذ واکنش

**و) سینتیک واکنش های سریع**

1. روش های تجربی اندازه گیری سرعت واکنش ها
2. روش های فیزیکی
3. رزونانس مغناطیس هسته
4. دینامیک NMR (D NMR)
5. پدیده هم آمیزی
6. روش رزونانس پارا مغناطیسی الکترون
7. مقایسه روش NMR و ESR
8. کروماتوگرافی گاز مایع
9. مطالعه سینتیک واکنش سریع به روش کروماتوگرافی گازی
10. طیف سنجی جرمی
11. روش اندازه گیری هدایت الکتریکی
12. روش اندازه گیره چرخش مور
13. روش اندازه گیری سرعت در واکنش های حاوی گاز
14. فشار، فشار جزئی و دانسیته ی سیستم های گازی
15. روش چگالی یا روش انبساط سنج
16. رنگ سنجی
17. روش اندازه گیری جذب نوری (طیف سنجی جذبی)
18. روش های الکتروشیمیایی
19. سل های گالوانی
20. روش های اختلال بزرگ
21. روش های فوتولیز جرقه ایی
22. رادیولیزپالسی
23. لوله های شوک
24. سیستم سینتیکی مرسوم
25. روش جریان سریع
26. روش آسایش
27. اختلال کوچک
28. تکنیک آسایش و سیستم پیچیده تر
29. تعیین زمان آسایش
30. دینامیک واکنش های مولکولی در روش پرتوی مولکولی
31. کاربرد تئوری سرعت مطلق در واکنش های سریع