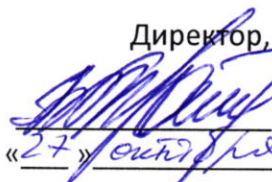


Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
«Федеральный исследовательский центр  
«Институт катализа им. Г.К. Борескова  
Сибирского отделения Российской академии наук»  
(ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН)

УТВЕРЖДАЮ  
Директор, академик РАН  
  
В.И. Бухтияров  
«27» октября 2023 г.

Билеты к вступительному испытанию по научной специальности

1.4.14 «Кинетика и катализ»

Билет 1

1. Химический потенциал электролита в растворе: активности электролитов, среднеионные величины и стандартные значения. Зависимость коэффициента активности от ионной силы по теории Дебая – Хюккеля.
2. Разветвленные цепные реакции. Нижний и верхний пределы самовоспламенения.
3. Гомогенный катализ. Катализ кислотами и основаниями. Правило Бренстеда. Общий и специфический кислотно-основной катализ. Катализ кислотами Льюиса.

Билет 2

1. Химические переменные и число независимых реакций. Парциальные молярные величины компонентов. Химические потенциалы. Уравнения Гиббса-Дюгема.
2. Кинетическое описание реакций в открытых системах. Реакторы идеального вытеснения.
3. Каталитические процессы в природе. Катализ в современной промышленности — химической, нефтехимической, нефтеперерабатывающей и пищевой.

Билет 3

1. Расчет термодинамических свойств идеальных газов из молекулярных констант. Статсумма смеси идеальных газов и статистический расчет констант равновесия химических реакций.
2. Теория активированного комплекса. Поверхность потенциальной энергии, координата реакции и переходное состояние. Условия применимости теории активированного комплекса.
3. Нанесенные катализаторы и способы их получения. Мембранные катализаторы.

Билет 4

1. Реакции с участием конденсированных несмешанных фаз и идеальных газов. Учет неидеальности газовой фазы. Расчет констант равновесия. Расчет равновесного состава.
2. Неразветвленные цепные реакции. Выражение для средней длины цепи.
3. Роль адсорбции в гетерогенном катализе. Физическая адсорбция и хемосорбция. Неоднородность поверхности катализаторов. Зависимость теплоты адсорбции от заполнения поверхности.

### Билет 5

1. Молекулярная статсумма для идеального газа. Поступательные, вращательные и колебательные степени свободы: энергетические спектры, статвеса уровней и статсуммы. Электронные состояния: учет статсуммы основного состояния и возбуждения.
2. Основные стадии цепных реакций. Диффузионный и кинетический контроль реакций линейного обрыва на стенках.
3. Структура и текстура твердых катализаторов. Современные методы исследования состава и структуры поверхностного слоя. Измерение величины поверхности и пористости.

### Билет 6

1. Изотерма химической реакции. Константа равновесия. Температурная зависимость константы равновесия — изобара Вант Гоффа. Смещение равновесия и принцип Ле Шателье – Брауна.
2. Кинетическое описание реакций в открытых системах. Реакторы полного перемешивания.
3. Области протекания гетерогенно-каталитических реакций: внешнедиффузионная, внутридиффузионная и кинетическая.

### Билет 7

1. Идеальные растворы: совершенные и предельно разбавленные. Химические потенциалы компонентов идеальных растворов. Равновесие жидкость — пар: законы Рауля и Генри. Неидеальный раствор, активность. Химическое равновесие в растворах.
2. Кинетические уравнения и кинетические кривые для реакций 1-го, 2-го и 3-го порядков.
3. Особенности катализа на металлах. Синтез Фишера - Тропша

### Билет 8

1. Тепловые эффекты реакций. Энтальпии образования химических соединений. Стандартные состояния. Закон Гесса. Определение теплоты реакции из теплот сгорания. Расчет энтальпии реакций из термодинамических свойств веществ. Закон Кирхгофа.
2. Кинетика реакций в жидкости. Диффузионно контролируемые реакции. Клеточный эффект. Учет влияния среды.
3. Стадии гетерогенно-каталитических реакций. Кинетика реакций в условиях адсорбционного равновесия. Модели Или–Ридила и Лэнгмюра–Хиншельвуда.

### Билет 9

1. Фундаментальные уравнения Гиббса. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Энтальпия, энергия Гельмгольца и энергия Гиббса. Направление самопроизвольного процесса и условия равновесия.
2. Автокаталитические реакции. Автоколебательные реакции. Схема Вольтера–Лотке.
3. Катализ оксидами. Окислительный аммонолиз пропилена.

### Билет 10

1. Термодинамические параметры. Теплота и работа. Внутренняя энергия и первое начало термодинамики. Уравнения состояния. Системы: открытые, закрытые и изолированные. Обратимые и необратимые процессы. Энтропия и второе начало термодинамики.
2. Основные стадии цепных реакций. Диффузионный и кинетический контроль реакций линейного обрыва на стенках.
3. Формы промежуточного химического взаимодействия при катализе. Активация реагентов при взаимодействии с активным центром, сближение реагентов при взаимодействии с активным центром, снятие запрета по симметрии. Энергетический и структурный факторы при взаимодействии реагирующих веществ с катализатором.

### Билет 11

1. Равновесия между двумя двухкомпонентными фазами. Фазовые диаграммы плавкости бинарных систем. Эвтектика.
2. Теория Линдемана.
3. Определение катализа и катализатора. Катализ и химическое равновесие. Классификация каталитических процессов. Промоторы и каталитические яды. Каталитическая активность и избирательность. Методы измерения.

### Билет 12

1. Гальванические элементы. ЭДС и потенциалы электродов. Окислительно-восстановительное равновесие. Уравнение Нернста. Типы электродов. Водородный электрод. Стандартные электродные потенциалы и условные термодинамические функции ионов.
2. Механизм химической реакции. Скорость химической реакции. Простые реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Константа скорости химической реакции. Уравнение Аррениуса. Предэкспоненциальный множитель и энергия активации.
3. Основные этапы развития представлений о катализе. Физические и химические теории катализа.

### Билет 13

1. Изохорная и изобарная теплоемкости. Температурная зависимость термодинамических свойств вещества. Третье начало термодинамики и абсолютные значения энтропии веществ. Уравнения Гиббса–Гельмгольца.
2. Фотохимические реакции. Основной фотохимический закон. Закон Бугера-Ламберта-Бэра. Квантовый выход.
3. Исследование кинетики гетерогенно-каталитических реакций в статических, проточных и проточно-циркуляционных (безградиентных) реакторах. Обработка экспериментальных данных, получение кинетических уравнений и их связь с механизмом реакций.

### Билет 14

1. Равновесия между двумя двухкомпонентными фазами. Зависимость равновесных давлений от состава. Азеотропия. Фазовые диаграммы кипения бинарных систем.
2. Методы определения порядка реакции и кинетических констант из экспериментальных данных.
3. Особенности катализа на металлах. Основные факторы, определяющие активность металлов.

### Билет 15

1. Статистическое обоснование термодинамики. Микросостояния макроскопических систем. Каноническое и микроканоническое распределение Гиббса. Статсумма и статвес. Связь между статсуммой и термодинамическими величинами.
2. Метод стационарных концентраций и квазиравновесное приближение. Лимитирующая стадия.
3. Катализ оксидами. Схема Захтлера-Де-Бура.

### Билет 16

1. Поверхностное натяжение. Изотерма адсорбции Гиббса. Теплота и энтропия адсорбции. Изотерма Лэнгмюра. Полимолекулярная адсорбция паров — изотерма БЭТ.
2. Нетермическое инициирование химических реакций. Сопряженные реакции и химическая индукция.
3. Природа действия катализаторов. Факторы, определяющие скорость химического превращения. Степень компенсации энергии разрывающихся и образующихся связей как мера оптимальности пути протекания реакции. Новые реакционные пути, открываемые катализатором. Понятие о каталитическом цикле.

### Билет 17

1. Правило фаз Гиббса. Фазовое равновесие в однокомпонентной системе, уравнение Клаузиуса–Клапейрона.
2. Методы расчета константы скорости реакций. Теория столкновений. Фактор двойных столкновений и стерический фактор.
3. Особенности катализа на металлах. Каталитический риформинг.

### Билет 18

1. Фазовые равновесия раствора с чистым компонентом. Мембранное равновесие и осмотическое давление.
2. Сложные реакции: обратимые, параллельные и последовательные.
3. Катализ оксидами. Катализаторы полного окисления. Связь каталитической активности с энергией связи кислорода в оксидах. Каталитическое сжигание топлива.

### Билет 19

1. Уравнения состояния и термодинамический потенциал идеального газа. Стандартный термодинамический потенциал реального газа и летучесть.
2. Автокаталитические реакции. Автоколебательные реакции. Схема Вольтера–Лотке.
3. Взаимодействие катализатора и реакционной среды. Дезактивация катализаторов. Нестационарный катализ.

### Билет 20

1. Фундаментальные уравнения Гиббса. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Энтальпия, энергия Гельмгольца и энергия Гиббса. Направление самопроизвольного процесса и условия равновесия.
2. Кинетика реакций в жидкости. Диффузионно контролируемые реакции. Клеточный эффект. Учет влияния среды.
3. Катализ комплексными соединениями металлов. Понятие о координационной активации молекул.

### Список литературы для подготовки вопросов из раздела «Катализ»:

1. Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного катализа. М.: Мир, 1983.
2. Мастерс К. Гомогенный катализ переходными металлами. М.: Мир, 1983.
3. Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Координация и катализ. М.: Мир, 1980.
4. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986.
5. Крылов О.В. Гетерогенный катализ, чч. I – IV, Новосибирск: НГУ, 2002.
6. Ридил Э. Развитие представлений в области катализа. М.: Мир, 1971.
7. Томас Дж., Томас У. Гетерогенный катализ. М.: Мир, 1969.
8. Полторак О.М. Лекции по теории гетерогенного катализа. М.: Изд-во МГУ, 1968.
9. Полторак О.М., Чухрай Е.С. Физико-химические основы ферментативного катализа. М.: Высш. шк., 1971.
10. Березин И.В., Мартинек К. Основы физической химии ферментативного катализа. М.: Высш. шк., 1977.
11. Трепнел Б. Хемосорбция. М.: ИЛ, 1958.
12. Киперман С.Л. Основы химической кинетики в гетерогенном катализе. М.: Химия, 1979.
13. Яблонский Г.С., Быков В.И., Горбань А.Н. Кинетические модели каталитических реакций. Новосибирск: Наука, 1983.
14. Розовский А.Я. Катализатор и реакционная среда. М.: Наука, 1988.
15. Сеттерфилд Ч. Практический курс гетерогенного катализа. М.: Мир, 1984.
16. Фенелонов В.Б. Введение в физическую химию формирования супрамолекулярной структуры адсорбентов и катализаторов. Новосибирск: Изд. СО РАН, 2004.

**Список литературы для подготовки вопросов из раздела «Химическая термодинамика»:**

1. Бажин Н.Б., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. М.: Химия, 2000; Изд-е 2-е, М.: Колосс, 2004. :
2. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991. :
3. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975. :
4. Еремин Е.Н. Основы химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1978. :
5. Мюнстер Ф. Химическая термодинамика. М.: Мир, 1971. :
6. Хачкурузов Г.А. Основы общей и химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1979. :
7. Смирнова Н.А. Методы статической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982. :
8. Смирнова Н.А. Молекулярные растворы. Л.: Химия, 1987.
9. Музыкантов В.С., Бажин Н.М., Пармон В.Н., Булгаков Н.Н., Иванченко В.А. Задачи по химической термодинамике. М.: Химия, 2001.

**Список литературы для подготовки вопросов из раздела «Химическая кинетика»:**

1. Замараев К.И. Курс химической кинетики. В 3-х частях. Новосибирск: НГУ, 2004.
2. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984.
3. Денисов Е. Т. Кинетика гомогенных химических реакций. М.: Высш. шк., 1988.
4. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.
5. Пурмаль А.П., А, Б, В ... химической кинетики. М.: ИКЦ "Академкнига", 2004.
6. Панченков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1974.
7. Лайдлер К. Кинетика органических реакций. М.: Мир, 1966.
8. Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. М.: "Мир", 1983
9. Бенсон С. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1964.
10. Бенсон С. Термохимическая кинетика. М.: Мир, 1971.
11. Хоффман Р.В. Механизмы химических реакций. М.: Мир, 1979.
12. Сборник задач по химической кинетике и катализу. Под. ред. Савинова Е.Н., Пармона В.Н., Новосибирск: НГУ, 1997.