

《化学动力学》课程教学大纲

一、课程基本信息

1. 上课学期：第二学期
2. 课程性质：选修
3. 学时/学分：32 /2
4. 先修课程：物理化学

二、课程教学内容和要求

序号	知识单元（章节）	知识点	推荐学时
1	统计力学简介	1. 介绍基本概念 2. 玻尔兹曼因子和配分函数 Q 3. Q 确定亥姆霍兹自由能 A 和热力学性质，熵	3
2	概率论与统计学	1. 统计学介绍，高斯和二项式分布，斯特林的逼近 2. 计数事件	3
3/4	统计力学基本原理	1. 单振子模型分析 2. 寻找最有可能分布的 Boltzmann 熵 3. 统计力学中的不同集合(常体积 常温， 常温常压， 巨正则系综) 4. Matlab 仿真：达到平衡	3
			2
5	实际分子的配分函数	1. 独立粒子和因子 $1/N!$ 2. 平动配分函数和理想气体性质 3. 谐振子振动配分函数 4. 双原子分子和核自旋统计的转动配分函数 5. 多原子分子 6. Matlab: 热力学性能计算 (rovibrational + exact) 7. 化学反应和统计力学平衡常数	2
			4
6	过渡态理论	1. 基元反应速率的过渡态模型推导 2. 动力学同位素效应 3. 热化学性质和速率常数的高斯计算	3

7	化学动力学	1. 化学反应速率和速率方程 2. 速率方程，活化能与温度关系 3. 微观动力学模型的一般性讨论 基元反应的耦合 4. 耦合化学反应的 Matlab 模拟 5. 复杂反应速率方程的近似方法 6. 链式反应 7. 酶反应和催化 8. Matlab 模拟: 酶反应并检查近似 9. 自由基聚合与爆炸	12
---	-------	--	----

八、建议教材及教学参考书

[1] Thomas Engel and Philip Reid. 热力学，统计热力学和动力学，Pearson，第三版。

[2] 课程说明已附到课程网址上。