

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(государственный университет)»



«УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе
и экономическому развитию

Д.А. Зубцов

Рабочая программа дисциплины (модуля)

по дисциплине: Кинетика реакций в газовой фазе
по направлению: Прикладные математика и физика (бакалавриат)
профиль подготовки: Химическая физика и свойства наноструктур
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра химической физики
курс: 4
квалификация: бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7(Осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

практические и семинарские занятия: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 12 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 72, всего зач. ед.: 2

Программу составил: О.М. Саркисов, д-р физ.-мат. наук, профессор

Программа обсуждена на заседании кафедры

10 июля 2015 г.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой

А.А. Берлин

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

Декан факультета

В.М. Некипелов

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Целью курса является ознакомление с современными представлениями о закономерностях протекания химических реакций при термических и оптических методах активации молекул и методах изучения этих закономерностей.

Задачи дисциплины

- освоение студентами базовых и новых знаний по химической кинетике и динамике, а также теоретическим и экспериментальным методам изучения механизмов химических реакций;
- приобретение знаний о когерентной фемтохимии - новой области знаний в фотохимии;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических и экспериментальных исследований в области химической кинетики и фемтохимии.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Данная дисциплина относится к вариативной части образовательной программы.

Дисциплина «Кинетика реакций в газовой фазе» базируется на дисциплинах:

- Общая и неорганическая химия;
- Дифференциальные уравнения;
- Общая физика: лабораторный практикум;
- Общая физика: термодинамика и молекулярная физика;
- Общая физика: оптика;
- Кратные интегралы и теория поля;
- Общая физика: механика;
- Общая физика: электричество и магнетизм;
- Общая физика: квантовая физика.

Дисциплина «Кинетика реакций в газовой фазе» предшествует изучению дисциплин:

Научно-исследовательская работа.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные представления о кинетике и динамике химических превращений, о механизмах реакций, о связи между строением химического соединения и его реакционной способностью;
- основные представления о фотохимии, включая когерентную фемтохимию;
- современные представления о современных экспериментальных методах изучения реакций;
- порядки численных величин, наиболее часто употребляемых в химической кинетике;

уметь:

- самостоятельно поставить задачу по изучению динамики реакций и выбрать оптимальный метод исследования;
- математически моделировать реальные физико-химические процессы;
- делать анализ и выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки нужных величин;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику.

владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы на экспериментальных установках и компьютерах;
- навыками постановки задач и анализа полученных результатов применительно к изучению временной эволюции и выяснению механизмов физико-химических процессов.
- навыками постановки задач и анализа полученных результатов применительно к фотохимии, включая взаимодействие лазерного излучения с молекулами.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу				
		Лекции	Практические и семинарские занятия	Лаборат. работы	Задания, курсовые работы	Самост. работа
1	Мономолекулярные и бимолекулярные реакции. Общие понятия и определения.	3				
2	Классификация реакций	3				1
3	Микроскопические реакции	2				1
4	Фотохимические процессы и реакции	2				4
5	Методы получения и регистрации активных частиц.	1				
6	Нелинейные методы оптической спектроскопии.	2				1
7	Особенности сверхбыстрой фемтосекундной спектроскопии	1				
8	Методы расчета поверхности потенциальной энергии.	2				
9	Динамический и статистические подходы для расчета констант скорости элементарных реакций	2				1
10	Механизмы сложных реакций.	2				1
11	Критические явления.	2				1
12	Новые направления исследований в химической кинетике.	8				2
Итого часов		30				12
Подготовка к экзамену		30 час.				

Общая трудоёмкость	72 час., 2 зач.ед.
--------------------	--------------------

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 7 (Осенний)

1. Мономолекуляр-ные и бимолекулярные реакции. Общие понятия и определения.

Сечения и константы скорости химических реакций.

Поверхность потенциальной энергии. Координата реакции. Профили путей реакции

Принцип микроскопической обратимости и константы равновесия. Примеры использования этого принципа для определения констант скорости обратных реакций.

2. Классификация реакций

Электронно-адиабатические и неадиабатические реакции. Экзоэргические и эндоэргические реакции.

Прямые реакции. Реакции, протекающие через образование долгоживущего промежуточного комплекса.

3. Микроскопические реакции

Энергетически неравновесные реакции.

Распределение энергии в продуктах реакции.

Эффективность колебательной энергии в преодолении потенциального барьера в бимолекулярных реакциях.

4. Фотохимические процессы и реакции

Элементарные процессы взаимодействия фотонов с молекулами.. Сечения, коэффициенты поглощения, правила отбора при различных взаимодействиях.

5. Методы получения и регистрации активных частиц.

Спектрофотометрические методы. Многомодовая и одномодовая лазерная внутрирезонаторная спектроскопия. Лазерный магнитный резонанс. Спектроскопия лазерно-индуцированной флуоресценции. Лазерная спектроскопия комбинационного рассеяния света. Метод кинетической масс-спектрометрии.

6. Нелинейные методы оптической спектроскопии.

Многофотонное поглощение, гиперкомбинационноерассеяниесвета, когерентная антистоксовая рамановская спектроскопия.

7. Особенности сверхбыстрой фемтосекундной спектроскопии

Метод возбуждение – зондирование. Образование динамических возбужденных состояний молекул – когерентных волновых пакетов.

8. Методы расчета поверхности потенциальной энергии.

Неэмпирические, полуэмпирические и эмпирические методы расчета поверхности потенциальной энергии.

9. Динамический и статистические подходы для расчета констант скорости элементарных реакций

Метод классических траекторий Методы полуклассического приближения. Метод активированного комплекса Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Статистическая теория бимолекулярных реакций. Статистические теории мономолекулярных реакций.

10. Механизмы сложных реакций.

Принцип независимости элементарных реакций. Метод квазистационарных концентраций. Цепные неразветвленные реакции. Цепные разветвленные реакции. Реакции с вырожденным и энергетическим разветвлением.

11. Критические явления.

Критические явления и их классификация: тепловое самовоспламенение, цепное самовоспламенение, цепочно-тепловое самовоспламенение, самовоспламенение за счет энергетического разветвления.

12. Новые направления исследований в химической кинетике.

В фемтохимии развиваются три новых направления.

1. Динамика и механизмы внутримолекулярных процессов и реакций протекающих на фемто-субпикосекундной временной шкале
2. Когерентная фотохимия на фемто-субпикосекундной временной шкале. В рамках этого направления в реакциях участвуют динамические возбужденные состояния - когерентные волновые пакеты. Принципиальной новой возможностью является возможность осуществления когерентного управления динамикой и выходом продуктов в реакциях.
3. Реакции электронно -высоко возбужденных молекул, образованных многофотонным поглощением фемтосекундного излучения. Эти процессы нашли практическое применения для многофотонной полимеризации и наноструктурирования полимеров, в микрохирургии и т. д.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Необходимое оборудование для лекций: компьютер и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система)

6. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная литература

1. Е.Т. Денисов, О.М. Саркисов, Г.И. Лихтенштейн. Химическая кинетика. М., Химия, 2000г, стр.15-176.
2. С.Я. Уманский. Теория элементарных химических реакций. Долгопрудный, издательский дом «интеллект».2009г
3. Практическая химическая кинетика. Под общей редакцией М.Я. Мельникова. 2006г, Изд-во МГУ, С.-Петербургский университет, стр. 9-184. 449-512
4. Л.В. Левшин, А.М. Салецкий. Оптические методы исследования молекулярных систем. М. Изд-во МГУ, 1994.
5. О.М. Саркисов. Обзор «Направления исследований в химии с использованием фемтосекундных технологий»// Изв. Академии наук, сер. химическая, 2008, №4, 722-739
6. П.Г. Крюков. Лазеры ультракоротких импульсов и их применения. Долгопрудный. Издательский дом «интеллект».2012.
7. Экспериментальные методы химии высоких энергий. Под редакцией М.Я. Мельникова. М. Изд-во МГУ, 2009
8. И.А. Семиохин, Б.В. Страхов, Ф.И. Осипов. Кинетика химических реакций. М., МГУ, 1995г., стр. 4-174.

Дополнительная литература

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. <http://scitation.aip.org/> American Institute of Physics Частично доступны полнотекстовые статьи со всех компьютеров, подключенных к сети института
2. <http://elibrary.ru/> Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU Доступ к полнотекстовым статьям со всех компьютеров, подключенных к сети института

8. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

9. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

по направлению: Прикладные математика и физика (бакалавриат)
профиль подготовки: Химическая физика и свойства наноструктур
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра химической физики
курс: 4
квалификация: бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7(Осенний) - Экзамен

Разработчик: О.М. Саркисов, д-р физ.-мат. наук, профессор

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Кинетика реакций в газовой фазе» обучающийся должен:

знать:

- основные представления о кинетике и динамике химических превращений, о механизмах реакций, о связи между строением химического соединения и его реакционной способностью;
- основные представления о фотохимии, включая когерентную фемтохимию;
- современные представления о современных экспериментальных методах изучения реакций;
- порядки численных величин, наиболее часто употребляемых в химической кинетике;

уметь:

- самостоятельно поставить задачу по изучению динамики реакций и выбрать оптимальный метод исследования;
- математически моделировать реальные физико-химические процессы;
- делать анализ и выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки нужных величин;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику.

владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы на экспериментальных установках и компьютерах;
- навыками постановки задач и анализа полученных результатов применительно к изучению временной эволюции и выяснению механизмов физико-химических процессов.
- навыками постановки задач и анализа полученных результатов применительно к фотохимии, включая взаимодействие лазерного излучения с молекулами.

3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

1. Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена в 7-ом семестре.

1. Основные понятия и определения.

Химическая кинетика и ее задачи. Специфика реакций в газовой фазе. Динамика и кинетика реакций. Элементарные и сложные реакции. Реакционноспособные промежуточные частицы (атомы, радикалы, возбужденные частицы).

2. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ)

Адиабатическое приближение. Профили путей реакции. Координата реакции. Зависимость потенциальной энергии от координаты реакции.

3. Бимолекулярные элементарные реакции

Типы парных столкновений (упругие, неупругие и химические столкновения). Сечения столкновений. Константы скорости бимолекулярных реакций.

4. Классификация бимолекулярных элементарных реакций. Электронно-адиабатические и неадиабатические реакции. Профили путей реакции. Экзоэргические и эндоэргические реакции. Прямые реакции. Реакции, протекающие через образование долгоживущего промежуточного

5. Бимолекулярные фотореакции. Микроскопические реакции. Функции распределения энергии в продуктах реакции. Эффективность колебательной энергии в преодолении потенциального барьера.

6. Принцип микроскопической обратимости и константы равновесия. Примеры использования этого принципа для определения констант скорости обратных реакций.

7. Мономолекулярные элементарные реакции

Активация молекул Константы скорости при термической активации и их зависимость от давления газа. Функции распределения активных молекул от энергии возбуждения при термической и химической активации.

8. Мономолекулярные фотореакции. Типы фотодиссоциации (прямая диссоциация, электронная преддиссоциация, колебательная преддиссоциация). Константы скорости в микроканоническом представлении. Мономолекулярные реакции электронно-возбужденных молекул. Фотодиссоциация колебательно-возбужденных молекул в основном электронном состоянии. Геометрические и скалярные свойства элементарной реакции. Распределение энергии по колебательным, вращательным и поступательным степеням свободы.

9. Фемтохимия. Стохастический и когерентный режимы реакций. Когерентный колебательный волновой пакет. Механизмы сверхбыстрых химических реакций. Изучение динамики фотореакций на фемто - субпикосекундной временной шкале. Когерентные мономолекулярные реакции. Когерентное управление динамикой и выходом продуктов. Экспериментальные примеры когерентного управления выходом продуктов. Реакции высоко электронно-возбужденных молекул, инициируемые многофотонным поглощением. Бимолекулярные реакции в ван-дер-ваальсовых комплексах. Реакции фотоассоциации.

9. Экспериментальная техника

Методы исследования. Скрещенные молекулярные пучки. Сверхзвуковая струя и молекулярный пучок. Сверхзвуковая струя и молекулярный пучок. Метод ударных труб. Метод лазерно-индуцированного нагрева газовой смеси. Методы получения активных частиц.

Методы регистрации активных частиц. Спектрофотометрические методы. Спектрофотометрические методы. Многомодовая и одномодовая лазерная внутрирезонаторная спектроскопия. Лазерный магнитный резонанс. Спектроскопия лазерно-индуцированной флуоресценции. Лазерная спектроскопия комбинационного рассеяния света. Метод кинетической масс-спектрометрии. Методы фемтосекундной спектроскопии.

10. Методы расчета констант скорости элементарных реакций

Методы расчета поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Неэмпирические, полуэмпирические и эмпирические методы расчета ППЭ. Метод классических траекторий Методы полуклассического приближения. Метод активированного комплекса Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Статистическая теория бимолекулярных реакций. Статистические теории мономолекулярных реакций.

11. Механизмы сложных реакций.

Принцип независимости элементарных реакций. Кинетика сложных реакций. Метод квазистационарных концентраций. Цепные неразветвленные реакции. Цепные разветвленные реакции. Реакции с вырожденным и энергетическим разветвлением. Критические явления и их классификация: тепловое самовоспламенение, цепное самовоспламенение, цепочно-тепловое самовоспламенение, самовоспламенение за счет энергетического разветвления.

4. Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Вопрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.