

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)**  
Теория элементарных химических реакций  
**по дисциплине:** Прикладные математика и физика (магистратура)  
**по направлению:** Химическая физика  
**профиль подготовки:** Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра химической физики  
**курс:** 1  
**квалификация:** магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2(Весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 45 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

практические и семинарские занятия: 45 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

**Программу составил:** С.Я. Уманский, д-р физ.-мат. наук, профессор

**Программа обсуждена на заседании кафедры**

16 февраля 2016 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 изучение основных физических представлений о механизмах элементарных химических реакций.

### Задачи дисциплины

- освоение студентами базовых знаний в области теории элементарных химических реакций;
- 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 «Теория элементарных химических реакций» базируется на дисциплинах:

Общая и неорганическая химия;  
Физические методы исследований;  
Физические методы исследований: лабораторный практикум;  
Вычислительная математика;  
Дифференциальные уравнения;  
Линейная алгебра;  
Математический анализ;  
Основы химической физики;  
Теория вероятностей;  
Теория функций комплексного переменного;  
Уравнения математической физики;  
Общая физика: лабораторный практикум;  
Общая физика: термодинамика и молекулярная физика;  
Общая физика: оптика;  
Аналитическая геометрия;  
Основы химической физики: лабораторный практикум;  
Кратные интегралы и теория поля;  
Общая физика: механика;  
Общая физика: электричество и магнетизм;  
Многомерный анализ, интегралы и ряды;  
Гармонический анализ;  
Общая физика: квантовая физика.

Дисциплина «Теория элементарных химических реакций» 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:

способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);

способность выбирать цели своей деятельности и пути их достижения, прогнозировать последствия научной, производственной и социальной деятельности (ОПК-4);

способность самостоятельно и (или) в составе исследовательской группы разрабатывать, исследовать и применять математические модели для качественного и количественного описания явлений и процессов и (или) разработки новых технических средств (ПК-1);

способность ставить, формализовать и решать задачи, уметь системно анализировать научные проблемы, генерировать новые идеи и создавать новое знание (ПК-2).

## В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

### знать:

- основные представления теории элементарных химических реакций;
- порядки численных величин, характерные для элементарных химических реакций.

### уметь:

- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных химических процессов;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

### владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных с элементарными химическими превращениями.

## 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	Важнейшие характеристики поверхностей потенциальной энергии		6			4
2	Метод переходного состояния для расчета констант скорости прямых термических би-молекулярных реакций.		8			4
3	Проблема происхождения потенциального барьера в химических реакциях.		7			4
4	Статистическая теория бимолекулярных реакций, идущих через долгоживущий промежуточный комплекс.		6			4

5	Уравнение Шредингера для системы электронов и ядер - теоретическая основа для описания химической реакции.		4			4
6	Характеристики элементарных бимолекулярных реакций: сечения и константы скорости. Экспериментальные данные о термических химических реакциях.		8			36
7	Химическая реакция в газе - проявление элементарного акта химического превращения в наиболее чистом виде. Классификация газофазных реакций.		6			4
Итого часов			45			60
Подготовка к экзамену		30 час.				
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.				

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

Семестр: 2 (Весенний)

##### 1. Важнейшие характеристики поверхностей потенциальной энергии

Характеристики поверхностей потенциальной энергии - путь реакции, профиль пути реакции. Характерные профили пути реакции для реакций различных типов. Прямые реакции и реакции через долгоживущий промежуточный комплекс.

##### 2. Метод переходного состояния для расчета констант скорости прямых термических бимолекулярных реакций.

Формулировка метода переходного состояния в рамках классической механики. Вариационный метод переходного состояния. Квантовые эффекты в методе переходного состояния.

##### 3. Проблема происхождения потенциального барьера в химических реакциях.

Приближение Гайтлера-Лондона для расчета взаимодействия атомов и молекул. Обменное взаимодействие и принцип Паули. Электронные потенциальные кривые  $H_2$  в приближении Гайтлера-Лондона. Формула Лондона для системы трех атомов водорода. Полуэмпирическая формула Лондона-Эйринга-Поляни-Сато.

##### 4. Статистическая теория бимолекулярных реакций, идущих через долгоживущий промежуточный комплекс.

Сечения бимолекулярных реакций, идущих через долгоживущий промежуточный комплекс в рамках статистической теории.

Термические константы скорости бимолекулярных реакций, идущих через промежуточный комплекс. Химическая активация.

5. Уравнение Шредингера для системы электронов и ядер - теоретическая основа для описания химической реакции.

Уравнение Шредингера для системы электронов и ядер. Кулоновский и релятивистский вклады. Исключение электронных степеней свободы в адиабатическом приближении Борна-Оппенгеймера и сведение задачи о движении электронов и ядер к задаче о движении в потенциальном поле.

6. Характеристики элементарных бимолекулярных реакций: сечения и константы скорости. Экспериментальные данные о термических химических реакциях.

Характеристики элементарных бимолекулярных реакций: сечения и константы скорости. Модель поглощающей сферы и экспериментальные данные о термических химических реакциях - необходимость корректного описания анизотропии межмолекулярного взаимодействия.

7. Химическая реакция в газе - проявление элементарного акта химического превращения в наиболее чистом виде. Классификация газофазных реакций.

Реакции в конденсированной фазе и газе. Моно-, би- и тримолекулярные реакции. Сведение динамики всех типов реакций в газе к динамике бимолекулярных реакций.

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

Учебная аудитория, мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

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

### Основная литература

1. С.Я.Уманский Теория элементарных химических реакций. Долгопрудный, Интеллект, 2009.
2. Е.Е.Никитин Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах. М., Химия, 1970.
3. В.Н.Кондратьев, Е.Е.Никитин Химические процессы в газах. М., Наука, 1981.
4. В.Н.Кондратьев, Е.Е.Никитин, А.И.Резников, С.Я.Уманский Термические бимолекулярные процессы в газах. М., Наука, 1976.
5. Г.Эйринг, С.Г.Лин, С.М.Лин Основы химической кинетики. М., Мир, 1983.
6. С. Глесстон, К.Лейдлер, Г.Эйринг Теория абсолютных скоростей реакций. М., ИЛ, 1948.
7. И.А.Семиохин, В.В.Страхов, А.И.Осипов Кинетика химических реакций. М. Изд-во МГУ, 1995.
8. Э.А.Мелвин-Хьюз Физическая химия, т. I, II. М., ИЛ, 1962.
9. П.Робинсон, К.Холбрук Мономолекулярные реакции. М., Мир, 1975.
10. Н.М.Кузнецов Кинетика мономолекулярных реакций. М., Наука, 1982.

### Дополнительная литература

1. Э.А.Мелвин-Хьюз Физическая химия, т. I, II. М., ИЛ, 1962.
2. П.Робинсон, К.Холбрук Мономолекулярные реакции. М., Мир, 1975.
3. Н.М.Кузнецов Кинетика мономолекулярных реакций. М., Наука, 1982.

## **7. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

Не предусмотрены

## **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**

Приложение

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

**по направлению:** Прикладные математика и физика (магистратура)  
**профиль подготовки:** Химическая физика  
Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра химической физики  
**курс:** 1  
**квалификация:** магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2(Весенний) - Экзамен

**Разработчик:** С.Я. Уманский, 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:

способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);

способность выбирать цели своей деятельности и пути их достижения, прогнозировать последствия научной, производственной и социальной деятельности (ОПК-4);

способность самостоятельно и (или) в составе исследовательской группы разрабатывать, исследовать и применять математические модели для качественного и количественного описания явлений и процессов и (или) разработки новых технических средств (ПК-1);

способность ставить, формализовать и решать задачи, уметь системно анализировать научные проблемы, генерировать новые идеи и создавать новое знание (ПК-2).

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Теория элементарных химических реакций» обучающийся должен:

### знать:

- основные представления теории элементарных химических реакций;
- порядки численных величин, характерные для элементарных химических реакций.

### уметь:

- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных химических процессов;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

### владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных с элементарными химическими превращениями.

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

Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена:

- 1) Уравнение Шредингера для молекулы. Нерелятивистский и релятивистский вклады. Приближение Борна-Оппенгеймера для молекулы. Адиабатические электронные потенциальные поверхности и неадиабатическая связь.
- 2) Качественный вид потенциальных кривых двухатомных молекул. Модель двух квантовых состояний и эффект квазипересечения уровней энергии в случае зависимости гамильтониана модели от параметра.
- 3) Дифференциальные, интегральные сечения реакции, микроскопическая и термическая константы скорости, принцип детального равновесия на примере реакции атома с двухатомной молекулой.



- 4) Модель захвата в центральном поле  $U(R)$  для реакции молекулы с замкнутой электронной оболочкой с атомом. Выражение для константы скорости. Зачем нужен стерический фактор?
- 5) Потенциальная поверхность системы трех атомов с валентными  $s$ -электронами. Модель Лондона и физическая причина возникновения потенциального барьера.
- 6) Полуэмпирическая поверхность потенциальной энергии ЛЭПС. Качественный вид поверхности потенциальной энергии для прямой реакции в системе трех атомов, путь и профиль пути реакции.
- 7) Правила определения качественного вида профилей пути реакций. Нарисовать качественный вид профилей пути для следующих реакций:  $R_1+R_2R_3 \rightarrow R_1R_2+R_3$ ,  $R_1+R_2 \rightarrow R_3+R_4$ ,  $R_1+R_2 \rightarrow C+D$ , где  $R_1, R_2, R_3, R_4$  - радикалы,  $C$  и  $D$  - валентно-насыщенные молекулы.
- 8) Метод переходного состояния для расчета термических констант скорости прямых бимолекулярных реакций. Допущения, лежащие в его основе.
- 9) Термодинамическая формулировка метода переходного состояния, аррениусовская энергия активации и предэкспонент. Вариационный метод переходного состояния.
- 10) Реакции, идущие через промежуточный комплекс - профили пути таких реакций, конкуренция распада комплекса на реагенты, продукты и его стабилизации столкновениями. Выражение термической константы скорости реакции через микростатические константы скорости распада промежуточного комплекса.
- 11) Рекомбинация радикалов. Зависимость константы скорости от давления в рамках механизма сильных столкновений. Зависимость константы скорости рекомбинации третьего порядка от числа степеней свободы образующейся молекулы.
- 12) Химическая активация. Функция распределения химически активированных молекул по энергиям. Отношение скорости реакции к скорости стабилизации при высоких и низких давлениях.
- 13) Применение метода переходного состояния к расчету стерического множителя бимолекулярной реакции на примере реакции  $A+BC \rightarrow AB+C$  ( $A, B, C$  - атомы), идущей через ли-нейный переходный комплекс.
- 14) Квантовые эффекты в методе переходного состояния: туннелирование и надбарьерное отражение, энергия нулевых колебаний переходного комплекса. Порядок величины стерического множителя и его корреляция со сложностью реагирующих молекул.

#### 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. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.