

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики
А.С. Батурин**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Физические основы кинетики сложных химических реакций
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
курс:	1
квалификация:	магистр

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

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 75 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: Н.А. Чумакова, д-р хим. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры химической физики 26.12.2024

Аннотация

Курс «Физические основы кинетики сложных химических реакций» направлен на ознакомление слушателей с механизмами и математическим моделированием кинетики сложных химических реакций, в том числе, с учетом влияния среды.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- знакомство с основными физическими представлениями о механизмах сложных химических превращений и способах математического моделирования кинетики этих процессов, имеющих предсказательную силу.

Задачи дисциплины

- освоение студентами основ теории химических превращений, в том числе, включающих взаимодействие реагирующих веществ и продуктов реакции с молекулами среды, электромагнитным излучением и магнитным полем;
- знакомство с математическим аппаратом для моделирования кинетики таких процессов;
- приобретение базовых навыков в области анализа нетривиальных кинетических закономерностей.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- принцип независимого протекания химических реакций;
- основные методы анализа кинетических данных;
- теоретические представления о причинах температурной зависимости константы скорости реакции;
- особенности протекания реакций в конденсированной фазе;
- критические явления в химии;
- основные характеристики каталитических процессов;
- кинетические закономерности фотохимических превращений, в том числе, в оптически-плотных средах;
- влияние магнитных полей на химические реакции;
- основные кинетические отличия надбарьерных (активационных) и подбарьерных (туннельных) процессов.

уметь:

- сформулировать математическую модель (составить систему дифференциальных уравнений) описывающую кинетику сложного химического процесса с учетом диффузии и фотохимических стадий превращения;
- распознавать процессы, протекающие в кинетическом и диффузионном режимах;
- анализировать кинетические данные, представленные в литературе;
- производить численные оценки скорости реакции и диффузионной динамики вещества в среде по порядку величины.

владеть:

- навыками анализа кинетических закономерностей химических реакций;
- культурой моделирования сложных химических процессов, включающих гомогенные, гетерогенные и диффузионные стадии;
- навыками поиска в литературе (в системе Интернет) необходимых физических и химических данных и констант.

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	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Прямая и обратная задачи в химической кинетике	2			5
2	Моделирование кинетических закономерностей сложного химического процесса	2			5
3	Химическая реакция в газе - проявление элементарного акта химического превращения в наиболее чистом виде	2			5
4	Движение системы по поверхности потенциальной энергии (ППЭ)	2			5
5	Особенности протекания химических реакций в конденсированной фазе	2			5
6	Кинетические закономерности фотохимических процессов	2			5
7	Критические явления в химии	2			5

8	Кинетические закономерности каталитических реакций	2			5
9	Кинетика и механизм ферментативных реакций	2			5
10	Диффузионно-контролируемые химические процессы	2			5
11	Моделирование нестационарного диффузионного процесса	2			5
12	Сферически-симметричные диффузионные задачи	2			5
13	Распространение тепла из точечного источника в непрерывной среде	2			5
14	Вращательная диффузия молекул и ее влияние на кинетику химического превращения	2			5
15	Влияние магнитных полей на химические реакции	2			5
Итого часов		30			75
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. Прямая и обратная задачи в химической кинетике

Химическая кинетика – ключ к пониманию механизма превращения. Элементарные и сложные химические реакции. Анализ кинетических данных; метод градиентного спуска. Высокореакционные интермедиаты химических процессов; современные экспериментальные методы химической кинетики

2. Моделирование кинетических закономерностей сложного химического процесса

Принцип независимого протекания химических реакций. Метод квазистационарных концентраций. Конкуренция нескольких моно- и бимолекулярных реакций. Метод исключения времени. Численное решение системы дифференциальных уравнений

3. Химическая реакция в газе - проявление элементарного акта химического превращения в наиболее чистом виде

Активация и дезактивация молекул. Схема Линдемана. Температурная зависимость константы скорости. Теория активных столкновений (ТАС). Теория активированного комплекса (ТАК).

4. Движение системы по поверхности потенциальной энергии (ППЭ)

Приближение Борна-Опенгеймера. Поверхность потенциальной энергии. Координата и энергетический профиль реакции. Адиабатическое расщепление. Квазипересечение термов, правила запрета. Статистическое описание скорости химической реакции. Процессы релаксации. Туннельные (подбарьерные) химические превращения. Кинетический изотопный эффект.

5. Особенности протекания химических реакций в конденсированной фазе

Описание реакции в конденсированной фазе на основании теории активированного комплекса. Модель Крамерса. Теория Маркуса. Механизмы трансляционной и вращательной диффузии молекул в среде. Кинетический и диффузионный режимы химической реакции. Ступенчатые кинетические кривые в твердых матрицах

6. Кинетические закономерности фотохимических процессов

Закон квантовой эквивалентности Эйнштейна, квантовый выход. Излучательные и безызлучательные переходы. Тушение флуоресценции, уравнение Штерна-Фольмера. Явления фотоселекции и фотоориентации. Кинетика фотохимического превращения в оптически-плотной среде

7. Критические явления в химии

Химическое и энергетическое разветвление химических реакций. Метод полустационарных концентраций (Н.Н. Семенов). Полуостров воспламенения.

8. Кинетические закономерности каталитических реакций

Механизм и кинетика каталитических и автокаталитических реакций. Энергетический профиль каталитической реакции. Гомогенный и гетерогенный катализ. Кислотный (основной) катализ. За нижней границей шкалы рН, функция Гаммета.

9. Кинетика и механизм ферментативных реакций

Ферменты и субстраты. Уравнение Михаэлиса – Ментен и методы его линеаризации. Механизмы ингибирования ферментативных реакций.

10. Диффузионно-контролируемые химические процессы

Законы Фика. Уравнения Стокса-Эйнштейна и Дебая-Стокса-Эйнштейна; гидродинамический радиус молекулы. Температурная зависимость вязкости. Стационарный режим в диффузионной кинетике. Краевые условия Дирихле и Неймана.

11. Моделирование нестационарного диффузионного процесса

Задача об окислении вещества в полимерной пленке; распределенный сток. Задача о полярографической регистрации продукта фотохимической реакции; диффузионная кинетика в оптически – плотной среде.

12. Сферически-симметричные диффузионные задачи

Задача о росте коллоидной частицы; диффузия в сферических координатах. Задача о клеточном эффекте; сшивка решений

13. Распространение тепла из точечного источника в непрерывной среде

Задача о тепловой волне диссипации. Преобразование Лапласа.
Задача в цилиндрических координатах. Функции Бесселя

14. Вращательная диффузия молекул и ее влияние на кинетику химического превращения

Коэффициент вращательной диффузии, время вращательной корреляции. Оператор Лапласа в сферических координатах. Ориентационная функция распределения молекул. Функции Лежандра и сферические гармоники.

15. Влияние магнитных полей на химические реакции

Магнитный изотопный эффект. Спиновый катализ. Основы спиновой химии.

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

Учебная аудитория, снабженная доской, экраном, проектором.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Г.Эйринг, С.Г.Лин, С.М.Лин Основы химической кинетики. М., Мир, 1983;
2. И.А.Семюхин, В.В.Страхов, А.И.Осипов Кинетика химических реакций. М. Изд-во МГУ, 1995;
3. Экспериментальные методы химии высоких энергий п/ред. М.Я. Мельникова, М. Изд-во МГУ, 2009.

Дополнительная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. К.М. Салихов 10 лекций по спиновой химии, Казань, Унипресс, 2000;
2. А.В. Воробьев, Лекции по теории элементарного акта химических реакций в конденсированной фазе, М. Изд-во МГУ, 2000;
3. А.В. Воробьев, Диффузионные задачи в химической кинетике, М. Изд-во МГУ, 2003

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

Не используются

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

Не предусмотрены.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

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

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.

Успешная сдача экзамена подразумевает, что студент:

- ориентируется в литературе по предмету и в состоянии быстро найти необходимые формулы и справочные материалы;
- способен решить типовые задачи и найти кратчайший путь к решению, что особенно ценно;
- способен довести решение до численного значения;
- понимает ограничения и допустимые пределы использования тех или иных приближений.

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 к преподавателю.

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

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен	
Разработчик:	Н.А. Чумакова, д-р хим. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Физические основы кинетики сложных химических реакций» обучающийся должен:

знать:

- принцип независимого протекания химических реакций;
- основные методы анализа кинетических данных;
- теоретические представления о причинах температурной зависимости константы скорости реакции;
- особенности протекания реакций в конденсированной фазе;
- критические явления в химии;
- основные характеристики каталитических процессов;
- кинетические закономерности фотохимических превращений, в том числе, в оптически-плотных средах;
- влияние магнитных полей на химические реакции;
- основные кинетические отличия надбарьерных (активационных) и подбарьерных (туннельных) процессов.

уметь:

- сформулировать математическую модель (составить систему дифференциальных уравнений) описывающую кинетику сложного химического процесса с учетом диффузии и фотохимических стадий превращения;
- распознавать процессы, протекающие в кинетическом и диффузионном режимах;
- анализировать кинетические данные, представленные в литературе;
- производить численные оценки скорости реакции и диффузионной динамики вещества в среде по порядку величины.

владеть:

- навыками анализа кинетических закономерностей химических реакций;
- культурой моделирования сложных химических процессов, включающих гомогенные, гетерогенные и диффузионные стадии;
- навыками поиска в литературе (в системе Интернет) необходимых физических и химических данных и констант.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

В целях текущего контроля успеваемости на занятии может проводиться краткий опрос по темам предыдущего занятия.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы для проведения экзамена:

- 1) Составление и основные методы решения систем дифференциальных кинетических уравнений для сложных химических реакций. Привести пример кинетической схемы и соответствующих этой схеме дифференциальных уравнений.
- 2) Качественный и количественный анализ экспериментальных кинетических данных. Привести несколько примеров кинетических кривых для различных кинетических схем.
- 3) Методы изучения высокореакционных интермедиатов химических процессов. Привести примеры.
- 4) Принцип независимого протекания химических реакций. Конкурирующие моно- и бимолекулярные реакции. Привести примеры.
- 5) Равновесное распределение молекул по энергии. Активация и дезактивация молекул. Схема Линдемана. Зависимость порядка реакции от давления инертного газа-носителя.
- 6) Температурная зависимость константы скорости. Теория активных столкновений (ТАС), теория активированного комплекса (ТАК).
- 7) Приближение Борна-Опенгеймера. Прямоугольная и косоугольная поверхность потенциальной энергии. Выбор координаты реакции (привести пример). Адиабатическое расщепление термов.
- 8) Туннельные (подбарьерные) химические реакции. Кинетический изотопный эффект для активационных и туннельных реакций.
- 9) Особенности протекания мономолекулярных и бимолекулярных реакций в конденсированной фазе. Кинетика переноса электрона (модель Маркуса).
- 10) Химическое и энергетическое разветвление химических реакций. Пределы воспламенения, их зависимость от объема и формы реакционного сосуда.
- 11) Диффузионный и кинетический режимы химической реакции. Стационарный режим диффузионно-контролируемой реакции.
- 12) Диффузия в сплошной среде. Законы Фика. Уравнения Стокса-Эйнштейна и Дебая-Стокса-Эйнштейна; гидродинамический радиус молекулы.
- 13) Стационарный и нестационарный режимы диффузионно-контролируемой реакции. Точечные и распределенные источники и стоки вещества. Учет граничных и начальных условий.
- 14) Механизмы вращательной диффузии молекул в среде. Время вращательной корреляции. Ориентационная функция распределения. Влияние вращательной диффузии на скорость химической реакции.
- 15) Кинетические особенности фотохимических реакций в оптически-плотных средах. Явления фотоселекции и фотоориентации.
- 16) Механизм гетерогенной каталитической реакции. Зависимость скорости процесса от концентрации продукта реакции.
- 17) Влияние магнитных полей на химические реакции. Привести примеры.

Примеры экзаменационных билетов:

Пример 1:

1. Туннельные (подбарьерные) химические реакции. Кинетический изотопный эффект для активационных и туннельных реакций.
2. Диффузионный и кинетический режимы химической реакции. Стационарный режим диффузионно-контролируемой реакции.

Пример 2:

1. Химическое и энергетическое разветвление химических реакций. Пределы воспламенения, их зависимость от объема и формы реакционного сосуда.
2. Кинетические особенности фотохимических реакций в оптически-плотных средах. Явления фотоселекции и фотоориентации.

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 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 систематизированные знания учебной программы дисциплины и умение 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 балла - 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 балла - 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 балла - 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 балл - 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

Экзамен проводится в устном формате по билетам. В билете два теоретических вопроса. На подготовку к ответу предоставляется 40 минут. Опрос студента на экзамене не должен превышать 1 часа.