

Программа утверждена на заседании
Ученого совета Факультета наук о материалах
МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол №173 от 25 сентября 2014 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): Феноменология и теории химической кинетики.
2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки.
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)». Дисциплина по выбору аспиранта во втором или четвертом семестре.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	31 (УК-2) Знать методологию научно-исследовательской деятельности
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы определения критических размеров для проявления эффекта
ПК-1 Способность к самостоятельному	32 (ПК-1) Знать современные теории химической кинетики и катализа

проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.01 Неорганическая химия	У2 (ПК-1) Уметь использовать современные методы экспериментального и теоретического исследования кинетики химических реакции
ПК-4 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	32 (ПК-4) Знать современные теории химической кинетики и катализа У2 (ПК-4) Уметь использовать современные методы экспериментального и теоретического исследования кинетики химических реакции

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 52 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (48 часов занятия лекционного типа, 4 часа мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 56 часов составляет самостоятельная работа учащегося

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся должен

знать: основы математического анализа, теории вероятности, квантовой химии и статистической термодинамики в объеме соответствующих курсов Химического факультета МГУ и факультета наук о материалах МГУ;

уметь: формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, усвоенных в различных курсах; проводить математическую обработку экспериментальных данных, обобщать полученные результаты;

владеть: расчетными методами решения химических задач.

8. Формат обучения.

очная форма обучения, лекционные занятия.

9. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Феноменологическая кинетика химических реакций. <u>Основные понятия формальной кинетики:</u> скорость химической реакции, константа скорости, молекулярность и порядок реакции; элементарные и сложные, последовательные и параллельные реакции; прямая и обратная кинетические задачи. <u>Постулаты формальной кинетики:</u> кинетический закон действующих масс, принцип независимости протекания реакций, принцип детального равновесия.	33	16				1	17	16		16

<u>Методы формальной кинетики:</u> квазистационарность, квазиравновесие, лимитирующие стадии. Зависимость константы скорости химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса, Энергия активации. Реакции нулевого, первого, второго и третьего порядка. Цепные реакции и реакции в потоке.									
Тема 2. Теории химической кинетики. Теория активных соударений (ТАС) для бимолекулярных реакций. Уравнение Траутца-Льюиса. Фактор соударений. Стерический множитель. Сечение соударения. Энергия активации. Достоинства и недостатки теории активных соударений. Теория активированного комплекса (переходного состояния) – ТАК. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) и путь реакции на ППЭ. Активированный комплекс, энергия активации ТАК. Статистический вывод основного уравнения ТАК. Интерпретация стерического множителя ТАС. Связь аррениусовской энергии	37	20			1	1	21	16	16

активации и энергий активации ТАС и ТАК. Термодинамический аспект ТАК.. Энергия Гиббса, энтальпия и энтропия активации. Реакции в растворах. Формула Смолуховского. Применение теории активированного комплекса и формула Бренстеда-Бьеррума. Мономолекулярные реакции. Схема Линдемана и поправка Хиншельвуда. Применение ТАК для мономолекулярных реакций. Тримолекулярные реакции. Отрицательный температурный коэффициент и его объяснения в ТАС и ТАК.										
Тема 3. Фотохимия. Принцип Франка-Кондона. Диаграмма Яблонского. Схема Штерна-Фольмера. Первичный и вторичный квантовые выходы химических реакций. Клеточный эффект. Эксимеры и эксиплексы.	11	2				1	3	8		8
Тема 4. Катализ: формальная кинетика и теории. Классификация каталитических процессов. Гомогенный, гетерогенный и нанокатализ. Катализ с точки зрения ТАК. Ферментативный катализ. Уравнение Михаэлиса – Ментен. Константа	27	10				1	11	16		16

Михаэлиса. Параметры ТОФ и ТОН. Конкурентным ингибированием. Кисотно-основной катализ. Классификация реакций кислотно-основного катализа. Специфический и общий кислотный катализ. Функция кислотности Гамета. Твердые суперкислоты как катализаторы. Кинетика реакций общего кислотного и общего основного катализа. Механизмы реакций и лимитирующие стадии. Корреляционное соотношение Бренстеда. Гетерогенный катализ. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций с диффузионными ограничениями. Различные макрокинетические режимы реакции. Внешняя диффузия. Кинетика Лэнгмюра -Хиншельвуда для реакции на однородной поверхности катализатора. Внутренняя диффузия и диффузионное торможение. Задача Зельдовича – Тиле. Модуль Тиле. Теория катализа Баландина. Принцип геометрического соответствия. Нанесенные катализаторы. Теория активных ансамблей Кобозева и нанокатализ.										
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	4					4	4			

Итого	108	48				4	52	56		56
--------------	-----	----	--	--	--	---	----	----	--	----

10. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы аспирантов по дисциплине (модулю):

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

- Н.Е. Кузьменко, С.Б. Осин, Д.А. Пичугина, О.Н. Рыжова. Тестовые задания по физической химии. Москва, 2017. 111 С.
- Е. М. Кузнецова, В. М. Байрамов, Н.В. Федорович, В.Ф. Шевельков. Физическая химия в вопросах и ответах. Изда- тельство МГУ. 1981 г. 264 стр.

11. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю).

- Перечень компетенций: *УК-2, ОПК-1, ПК-1*.
- Описание шкал оценивания: *зачет*
- Вопросы к зачету:

I. Формальная кинетика. Закон действия масс.

Запишите выражение для скорости химической реакции в газовой фазе и растворе.

Почему порядок химической реакции может не совпадать с молекулярностью и меняться с изменением концентрации реагентов?

Как записать закон действия масс для твердофазной реакции ?

Как решить обратную кинетическую задачу ?

Как решить прямую кинетическую задачу ?

Как определить порядок реакции по компоненту?

Что такое константа скорости? Какова ее размерность?

II. Формальная кинетика. Реакции нулевого, первого и второго порядков.

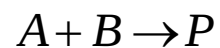
Как определить константу скорости реакции первого порядка?

Чему равно среднее время жизни для реакций первого порядка?

Приведите пример реакции нулевого порядка.

Как выглядит кинетическая кривая для автокаталитической реакции второго порядка?

Как решить прямую кинетическую задачу для необратимой реакции второго порядка?

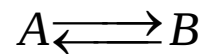


III. Сложные реакции.

Что такое «принцип независимости протекания» химических реакций?

Чем метод Боденштейна отличается от метода «квазиравновесных концентраций»?

Для реакции



выведите уравнение, связывающее сродство и наблюдаемую скорость химической реакции.

Что такое лимитирующая стадия реакции? Приведите пример.

Как определить константу Михаэлиса-Ментен из экспериментальных данных ?

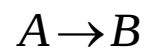
Сравните схему Михаэлиса-Ментен со схемами Ленгмюра-Хиншельвуда и реакции специфического кислотного катализа.

IV. Цепные и колебательные реакции, реакторы идеального смешения и вытеснения.

Чем разветвленная цепная реакция отличается от неразветвленной?

Что такое верхний и нижний пределы воспламенения для системы $H_2 + O_2$?

Выведите уравнения, определяющие стационарные концентрации вещества А в реакторах идеального смешения и вытеснения. В реакторах происходит необратимая реакция первого порядка



Что такое «устойчивое и неустойчивое стационарные состояния» для химической реакции? Что такое точка бифуркации?

Какие концентрации испытывают периодические колебания при колебательной химической реакции?

V. Зависимость константы скорости от температуры.

Как зависит от температуры константа скорости химической реакции в газовой, жидкой и твердой фазах ?

Как определить опытную энергию активации химической реакции?

Чем уравнение

$$\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E_A}{RT}$$

отличается от уравнения

$$\left(\frac{\partial \ln K}{\partial T} \right)_p = \frac{\Delta H^0}{RT} \quad ?$$

VI. Теории химической кинетики. ТАС.

Нарисуйте график функции распределения молекул по модулю скорости в идеальном газе

Чему равно сечение реакции в ТАС?

Как определить энергию активации ТАС?

Каков физический смысл предэкспоненциального множителя в ТАС?

Почему ТАС обычно дает завышенную величину константы скорости бимолекулярной реакции?

Как схема Линдемана объясняет изменение порядка при мономолекулярной реакции?

VII. Теории химической кинетики. ТАК.

Что такое путь реакции в ТАК ?

Что такое «активированный комплекс»?

Какие данные необходимы для расчета константы скорости химической реакции методом ТАК ?

Как определить энергию активации ТАК?

Чем энтальпия реакции отличается от энергии активации реакции ?

Как определить предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса из ТАК?

Как рассчитать стерический множитель ТАС с помощью ТАК?

VIII. Реакции в растворах

Выведите уравнение Смолуховского.

Можно ли применять основное уравнение ТАК для реакций в жидком идеальном растворе ? в жидком неидеальном растворе ?

IX. Фотохимические реакции.

Почему «поток поглощенного света» может не зависеть от концентрации поглощающих молекул?

Почему некоторые молекулы, поглотив квант света, диссоциируют, а другие – нет?

Как определяется первичный квантовый выход?

Что такое схема Штерна-Фолмера?

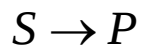
X. Катализ

Что такое катализ с точки зрения ТАК ?

Что такое гомогенный и гетерогенный катализ? Сравните их эффективность.

Как зависит эффективная константа скорости специфического кислотного катализа от pH среды ?

Реакция



катализируется рядом кислот по механизму общего катализа. Измерены эффективные константы скорости для нескольких кислот. Для кислоты **НА** измерения не проводились. Как предсказать величину эффективной константы для **НА**?

Как определить лимитирующую стадию гетерогенной каталитической реакции?

Сравните функцию **pH** и функцию кислотности по Гаммету. Чему равна кислотность по Гаммету для суперкислот?

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам, каждый из которых включает теоретические вопросы и практические задания. Уровень знаний аспиранта оценивается на «зачтено», «незачтено». Оценка «зачтено» выставляется, если по шкале оценивания учащийся демонстрирует знания и умения, соответствующие категориям 3, 4 и 5.

- Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю), характеризующих этапы формирования компетенций.

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
31 (УК-2)	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания методологии научно-исследовательской деятельности	Неполные знания методологии научно-исследовательской деятельности	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания методологии научно-исследовательской деятельности	Сформированные систематические знания методологии научно-исследовательской деятельности	Зачет в форме индивидуального собеседования
У1 (ОПК-1)	Отсутствие умений	Частично освоенное умение выбирать и применять в профессиональной	В целом успешное, но не систематическое умение выбирать и применять в	В целом успешное, но содержащие отдельные пробелы умение выбирать и применять в	Сформированное умение выбирать и применять в профессиональной	письменное решение задач

		деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы определения критических размеров для проявления эффекта	профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы определения критических размеров для проявления эффекта	профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы определения критических размеров для проявления эффекта	деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы определения критических размеров для проявления эффекта	
32 (ПК-1)	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания современных методов исследования наноструктур	Неполные знания современных методов исследования наноструктур	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания современных методов исследования наноструктур	Сформированные систематические знания современных методов исследования наноструктур	Зачет в форме индивидуального собеседования
У2 (ПК-1)	Отсутствие умений	Частично освоенное умение использовать современные методы исследования размерной зависимости свойств неорганических материалов	В целом успешное, но не систематическое умение использовать современные методы исследования размерной зависимости свойств неорганических материалов	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать современные методы исследования размерной зависимости свойств неорганических материалов	Успешное и систематическое умение использовать современные методы исследования размерной зависимости свойств неорганических материалов	письменное решение задач
32 (ПК-16)	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания природы размерного эффекта структуры и свойств неорганических материалов	Неполные знания природы размерного эффекта структуры и свойств неорганических материалов	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания природы размерного эффекта структуры и свойств неорганических материалов	Сформированные систематические знания природы размерного эффекта структуры и свойств неорганических материалов	Зачет в форме индивидуального собеседования

12. Ресурсное обеспечение:

- Основной материал курса (конспекты лекций, презентации, методические материалы, вопросы для подготовки к зачету) расположен на сайте «Курс физической химии». Адрес сайта: <http://korobov.chem.msu.ru> Видеозаписи лекций находятся по адресу: <https://www.youtube.com/playlist?list=PLcsjsqLLSfNA0iJV24tmsHO0ew-SUuy3j> (8 семестр).

Основная и вспомогательная учебная литература ко всему курсу.

Основная литература

№	Автор	Название книги	Редактор	Место издания	Издательство	Год издания
1	Романовский Б.В.	Основы химической кинетики		Москва	Экзамен	2006
2	Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г.	Курс химической кинетики.		Москва	«Высшая школа»	1984
3	Романовский Б.В.	Основы катализа		Москва	Бином	2015
4	Эткинс П.	Физическая химия, том 2		Москва	Мир	1980

Дополнительная литература

№	Автор	Название книги	Редактор	Место издания	Издательство	Год издания
1	Глесстон С., Лейдлер К., Эйринг Г.	Теория абсолютных скоростей реакций		Москва	Из-во Иностранной литературы	1948
2	Новаковская Ю.В.	Теория скорости химического превращения. Части I,II.		Москва	Химфак, МГУ	2003
3	Смирнова Н.А.	Методы статистической термодинамики в физической химии		Москва	Мир	1982
4	Пригожин И., Кондепуди Д.	Современная термодинамика		Москва	Мир	2002

13. Язык преподавания: русский.

14. Преподаватель: Коробов Михаил Валерьевич, доктор химических наук, профессор, mkorobov49@gmail.com, 8-495-650-04-68