

Аннотация

рабочей программы учебной дисциплины «Химическая динамика элементарных процессов»

Направление подготовки: 04.04.01. «Химия» (уровень магистратуры)
профиль «Физическая химия»

Составитель аннотации к.т.н., профессор Арчакова Р.Д.

Кафедра химии

Цель изучения дисциплины	Целями изучения дисциплины «Химическая динамика элементарных процессов, катализ» являются: <ul style="list-style-type: none">- изучение фундаментальных знаний химической кинетики как науки о скоростях и механизмах химических реакций, основных экспериментальных закономерностях, лежащих в основе теории химической кинетики, общих законах химической кинетики, связи теории химической кинетики с современными технологиями, применяемыми в химической, нефтехимической, газовой промышленности;- формирование у студентов знаний и умений в решении практических вопросов в области химической кинетики, умение использовать теоретические подходы при разработке новых технологий, а также самостоятельно ставить эксперимент по изучению кинетических характеристик различных систем и уметь проводить численные расчеты кинетических параметров;- углубленное изучение физико-химической сущности катализа химических реакций, особенностей гомогенного и гетерогенного катализа.
Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры	<p>Дисциплина «Химическая динамика элементарных процессов, катализ» относится к обязательным дисциплинам блока 1; изучается в 3-ем семестре.</p> <p>Дисциплина «Химическая динамика элементарных процессов, катализ» представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля – физической химии, коллоидной химии, химической технологии, физико-химических методов исследования.</p> <p>Перечень дисциплин, необходимых для изучения дисциплины: неорганическая химия, квантовая химия, физика, математика.</p>
Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины	<p>В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:</p> <ul style="list-style-type: none">- способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели

	<p>(УК-3);</p> <ul style="list-style-type: none"> - способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки и образования в течение всей жизни (УК-6); - способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1); - способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3); - способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работы выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук (ПК-3).
Содержание дисциплины	<p>Раздел 1. Введение.</p> <p>Химическая кинетика - наука о скоростях и механизмах химических реакций. Несоответствие механизмов реакций и их стехиометрических уравнений. Механизм разложения N_2O, N_2O_5, синтеза HBr и HI.</p> <p>Раздел 2. Основные понятия и законы химической кинетики</p> <p>Тема 1. Основные понятия и законы химической кинетики. Определение скорости химической реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Определение константы скорости и порядка реакции. Реакции переменного порядка и изменение порядка в ходе реакции на примере реакции образования HBr. Молекулярность элементарных реакций.</p> <p>Тема 2. Кинетический закон действия масс и область его применимости. Составление кинетических уравнений для известного механизма реакции. Прямая и обратная задачи химической кинетики. Зависимость константы скорости от температуры. Уравнение Аррениуса. “Эффективная” и “истинная” энергии активации.</p> <p>Раздел 3. Кинетический анализ простых и сложных реакций</p> <p>Тема 1. Необратимые реакции первого, второго и третьего порядков. Определение констант скорости из опытных данных. Методы определения порядка реакции и вида кинетического уравнения.</p> <p>Тема 2. Сложные реакции. Принцип независимости элементарных стадий. Методы составления кинетических уравнений. Обратимые реакции первого порядка.</p>

	<p>Определение элементарных констант из опытных данных. Параллельные реакции. Последовательные реакции на примере двух необратимых реакций первого порядка. Кинетические кривые накопления отдельных продуктов.</p> <p>Тема 3. Кинетический анализ процессов, протекающих через образование промежуточных продуктов. Принцип квазистационарности Боденштейна и область его применимости.</p> <p>Раздел 4. Цепные реакции</p> <p>Тема 1. Элементарные процессы возникновения, продолжения, разветвления и обрыва цепей. Длина цепи. Различные методы расчета скорости неразветвленных цепных реакций. Применение метода стационарности для составления кинетических уравнений неразветвленных цепных реакций на примере образования HBr.</p> <p>Тема 2 Разветвленные цепные реакции. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях на примере реакции окисления водорода. Полуостров воспламенения. Период индукции. Зависимость скорости реакции на нижнем пределе воспламенения от диаметра сосуда и природы его поверхности. Применение метода квазистационарных концентраций для описания предельных явлений в окрестностях первого и второго пределов воспламенения. Тепловой взрыв и условия воспламенения на третьем пределе.</p> <p>Раздел 5. Теории химической кинетики</p> <p>Тема 1. Теория соударений. Упругие, неупругие, химические соударения. Общее число столкновений. Множитель Больцмана. Число активных столкновений. Стерический фактор. Теоретический расчет константы скорости бимолекулярной реакции. Применение теории соударений к бимолекулярным реакциям. Теория соударений в применении к мономолекулярным реакциям. Схема Линдемана и ее сопоставление с опытными данными. Причины неточности схемы Линдемана. <i>Поправки Хиншельвуда и Касселя. Понятие о теории PPKM.</i></p> <p>Тема 2 Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Поверхность потенциальной энергии для взаимодействия трех атомов водорода. Сопоставление результатов приближенных и точных расчетов поверхности потенциальной энергии для этой системы.</p> <p>Тема 3 Теория переходного состояния (активированного комплекса). Свойства активированного комплекса. Статистический расчет константы скорости. Основные допущения теории активированного комплекса и область его</p>
--	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

	<p>применимости. Трансмиссионный коэффициент.</p> <p>Тема 4 Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Энтропия активации. Соотношения между опытной и истинной энергией активации. Объяснение “повышенных” и “заниженных” значений предэкспоненциального множителя.</p> <p>Тема 5 Бимолекулярные реакции. Теория активированного комплекса в применении к бимолекулярным реакциям различного типа. Теория соударений в применении к бимолекулярным реакциям. Сопоставление результатов теории соударений и теории активированного комплекса.</p> <p>Тема 6. Тримолекулярные реакции. Применение теории активированного комплекса для описания тримолекулярных реакций с участием оксида азота. Теория соударений в применении к тримолекулярным реакциям. Сопоставление результатов обеих теорий.</p> <p>Раздел 6. Фотохимические реакции</p> <p>Тема 1. Элементарные фотохимические процессы. Фотохимические активные частицы. Эксимеры, эксиплексы и их свойства. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон фотохимической эквивалентности Эйнштейна. Определение кинетических постоянных фотохимических реакций методом стационарных концентраций.</p>
Знания, умения и навыки, получаемые в процессе изучения дисциплины	<p>В результате изучения дисциплины магистрант должен</p> <p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - базовую терминологию, относящуюся к катализу, основные понятия катализа и их математическое выражение; - основные теории катализа; - методы исследования свойств промышленных катализаторов; - физико-химические основы технологий каталитической переработки сырья для нужд региона. <p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - демонстрировать связь фундаментальных опытов с теориями катализа с помощью известных математических методов; - моделировать процессы и проводить численные расчеты соответствующих величин в общепринятых системах единиц. <p>владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основами дисциплины для решения практических задач; - методикой проведения физико-химических исследований; - современными приборами для физико-химических исследований.

Объем дисциплины и виды учебной работы	Вид учебной работы	Всего часов	3 семестр
	Общая трудоемкость дисциплины	144	144
	Аудиторные занятия	64	64
	Лекции	32	32
	Лабораторные занятия	32	32
	Самостоятельная работа	53	53
	Контроль	27	27
Используемые ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Internet», информационные технологии, программные средства и информационно-справочные системы	Интернет-ресурсы http://fizrast.ru/sitemap.html http://www.don-agro.ru http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/ http://www.agroxxi.ru/ (РГБ) http://elibrary.rsl.ru Научная электронная библиотека http://elibrary.ru/default.asp Российская национальная библиотека http://primo.nl.ru http://nbmgu.ru Электронная библиотека Российской государственной библиотеки		
	Материально-техническое обеспечение дисциплины - лекционные аудитории; - аудитории для семинарских занятий; - проекционное оборудование и компьютер; - интерактивная доска.		
Формы текущего и рубежного контроля	Тестовые задания, контрольные работы, реферат.		
Формы промежуточного контроля	экзамен		