

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«20» мая 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Кинетика сложных химических реакций

Уровень высшего образования:

Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Химическая кинетика

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция		Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-3.С. Способен использовать методы регистрации и обработки результатов экспериментов, в том числе, полученных на современном научном оборудовании	ОПК-1.С.4. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты
СПК-1.С. Способен анализировать экспериментальные кинетические данные, строить кинетические схемы и определять константы скорости и равновесия для различных реакций	СПК-1.С.1. Анализирует экспериментальные кинетические данные, строит кинетические схемы, определяет кинетические параметры химических реакций	Знать: основные подходы к описанию сложных химических процессов, в том числе с учетом диффузии реагирующих веществ и продуктов реакции Уметь: анализировать экспериментальные кинетические данные
СПК-2.С. Способен выбирать теоретические модели для описания конкретного химического процесса с использованием аппарата современных теорий	СПК-2.С.1. Теоретически описывает химические процессы с использованием аппарата современных теорий	Знать: основные модельные представления, применяемые для описания химических процессов в стационарных и нестационарных системах различной симметрии Уметь: осуществлять математическое моделирование сложных химических процессов, в том числе с учетом диффузии реагирующих веществ и продуктов реакции

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных единицы, всего 144 часа, из которых 88 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов - занятия семинарского типа 6 часов – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости, 6 часов – текущий контроль успеваемости), 56 часов составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

Знать: Общие закономерности протекания химических реакций. Иметь представление о скорости и энергетике реакций.

Уметь: Решать дифференциальные уравнения.

Владеть: Основными навыками пользования компьютерными программами.

5. 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 Кинетика обратимых, последовательных и параллельных химических реакций.	18	6	6	1			13	5		5
Тема 2 Кинетика гомогенных и гетерогенных каталитических процессов. Автокаталитические реакции.	18	6	6	1			13	5		5
Тема 3 Разветвленные и нераз-	18	6	6	1			13	5		5

ветвленные цепные процессы.										
Тема 4 Кинетика фотохимических превращений.	20	6	6	1		2	15	5		5
Тема 5 Кинетика диффузионно-контролируемых реакций	34	12	12			4	28		6	6
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>	36			2		4	6	30		30
Итого	144	36	36	6		10	88	50	6	56

6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

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

Самостоятельная работа проводится в соответствии с заданиями, получаемыми студентами во время лекций. Самостоятельная работа студентов обеспечивается доступом к сети Интернет и базам данных.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Панченков Г.М., Лебедев В.П., Химическая кинетика, Москва, Химия, 1986.
2. Семиохин И.П., Страхов Б.В., Осипов О.И., Кинетика химических реакций, Москва, Изд-во МГУ, 1995.
3. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. Изд. 4-е, Москва, Высшая школа, 1984.
4. Воробьев А.Х., Диффузионные задачи в химической кинетике, Москва, Изд-во МГУ, 2003.

Дополнительная литература

1. Франк-Каменецкий Д.А., Диффузия и теплопередача в химической кинетике, Москва, Наука, 1987.
2. А. А. Овчинников, С. Ф. Тимашев, Ф. Ф. Белый, Кинетика диффузионно-контролируемых реакций, Москва, Химия, 1986.

Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости): Для решения задач, связанных с анализом экспериментальных кинетических данных используется программа SciDavis. Для аналитического и численного решения дифференциальных уравнений используется программа wxMaxima.

- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: Чумакова Наталья Анатольевна, к.х.н.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Контрольная работа 1 включает задачи на определение порядков и констант скоростей сложных химических реакций в отсутствие диффузии реагентов и продуктов.

Пример.

1. При изучении термического распада н-бромистого пропила была получена следующая зависимость константы скорости от температуры

T(°C)	300	320	340	360	380
$k \cdot 10^3 (\text{моль}^{-1/2} \text{см}^3/2\text{с}^{-1})$	9,54	32,70	61,40	147,0	346,0

Определите длину цепи при температуре 350°C и давлении бромистого пропила $5,33 \cdot 10^4$ Па.

Инициирование протекает по реакции $C_3H_7Br \rightarrow C_3H_7 + Br$

Энергия разрыва связи C-Br составляет 284,2 кДж/моль.

2. Рассчитать квантовый выход фотохимической окислительно-восстановительной реакции, протекающей между молекулами донора в триплетном состоянии и невозбужденными молекулами акцептора в присутствии тушителя, используя следующие данные. Квантовый выход интеркомбинационной конверсии в триплетное состояние составляет 0.75. Константа скорости тушения триплетного состояния - $2 \cdot 10^8$ л/(моль·с). Время жизни триплетного состояния - $1 \cdot 10^{-3}$ с. Концентрация тушителя - $1 \cdot 10^{-3}$ моль/л. Вероятность рекомбинации образующихся в ходе реакции ион-радикальных пар – 40%.

3. Реакцию хлорирования толуола проводили в закрытом реакторе при 20°C в присутствии катализатора SnCl₄. Начальное давление хлора всегда составляло 100 мм рт ст. В реактор объёмом 50 см³ помещали 30 мл толуола. При разных навесках катализатора были получены следующие данные по изменению давления хлора во время опыта:

[SnCl ₄]·10 ³ моль/л	0,36	0,50	1,65	2,20
t, мин	давление Cl ₂ , мм рт ст			
0	100	100	100	100
10	76,3	69,1	28,9	18,4
12	72,2	64,1	22,6	13,2
15	66,6	57,4	15,6	7,9
20	58,2	47,7	8,4	3,4
25	50,8	39,6	4,5	1,4
30	44,3	33,0	2,4	0,6
40	33,8	22,8	0,7	0,1
50	25,8	15,7	0,2	0,02
60	19,7	10,9	0,06	0,004
70	15,0	7,5	0,017	0,001
80	11,4	5,2	0,005	0
90	8,7	3,6	0,001	0
100	6,6	2,5	0	0

Считая, что порядок реакции по толуолу равен 1, определить порядки по хлору и катализатору и рассчитать константу скорости.

Плотность толуола при 20°C равна 0,866 г/см³

Контрольная работа 2 включает задачи на определение скорости диффузионного процесса.

Пример.

1. Плёнка органического материала, характеризующегося коэффициентом температуропроводности α , толщиной l получается напылением этого материала на металлическую поверхность, охлаждённую до T_1 . Температура испарения материала T_2 , скорость напыления U мм/час. В предположении, что скорость установления профиля температуры много больше скорости роста плёнки, определите, насколько отличается температура поверхности плёнки от температуры подложки.
2. В некоторой точке среды, характеризующейся плотностью ρ , теплоемкостью c и коэффициентом температуропроводности α , произошло поглощение фотона. Вызванные поглощением фотона процессы приводят к выделению энергии фотона в виде теплоты Q Дж в точке поглощения. До какой температуры и на какое время разогреются области образца, прилегающие к точке поглощения фотона?

Вопросы к экзамену.

1. Формальное кинетическое рассмотрение сложных химических реакций. Расчет кинетической кривой для реагента, продукта и промежуточного вещества. Метод квазиравновесия и метод квазистационарных концентраций.
2. Анализ экспериментальных кинетических данных. Методы и подходы к решению обратной кинетической задачи. Возможные источники ошибок.
3. Цепные химические реакции. Критические явления. Метод полустационарных концентраций.
4. Кинетика фотохимических процессов. Электронно-возбужденное состояние молекулы. Квантовый выход флуоресценции, уравнение Штерна-Фольмера. Определение квантового выхода фотохимической реакции из данных спектрофотометрии. Кинетика фотохимического процесса в образце с высокой оптической плотностью.
5. Механизмы трансляционной и вращательной диффузии в газах, жидкостях и твёрдых матрицах. Законы Фика. Уравнения Стокса-Энштейна и Дебая-Стокса-Энштейна. Гидродинамический радиус молекулы.
6. Стационарный режим химического процесса в присутствии диффузии. Виды граничных условий. Точечные и распределённые источники и стоки вещества.
7. Нестационарный режим химического процесса в присутствии диффузии. Начальное и граничные условия. Согласование начальных и граничных условий. Подходы к решению систем дифференциальных уравнений, включающих производные функций по времени и координате.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: основные подходы к описанию сложных химических процессов, в том числе с учетом диффузии реагирующих веществ и продуктов реакции Знать: основные модельные представления, применяемые для описания химических процессов в стационарных и нестационарных системах различной симметрии	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты Уметь: анализировать экспериментальные кинетические данные Уметь: осуществлять математическое моделирование сложных химических процессов, в том числе с учетом диффузии реагирующих веществ и продуктов реакции	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене