

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики**

В.В. Иванов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Теория элементарных 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: 45 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 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 химической физики 29.05.2020

Аннотация

Курс "Теория элементарных химических реакций" предназначен для изучения студентами основных физических представлений о механизмах элементарных химических реакций.

Задачами дисциплины являются:

- 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.

Основное содержание дисциплины изложено в следующих разделах:

1. Важнейшие характеристики поверхностей потенциальной энергии
2. Метод переходного состояния для расчета констант скорости прямых термических бимолекулярных реакций.
3. Проблема происхождения потенциального барьера в химических реакциях.
4. Статистическая теория бимолекулярных реакций, идущих через долгоживущий промежуточный комплекс.
5. Уравнение Шредингера для системы электронов и ядер - теоретическая основа для описания химической реакции.
6. Характеристики элементарных бимолекулярных реакций: сечения и константы скорости. Экспериментальные данные о термических химических реакциях.
7. Химическая реакция в газе - проявление элементарного акта химического превращения в наиболее чистом виде. Классификация газофазных реакций.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- 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. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
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:

- ☐ 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	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Важнейшие характеристики поверхностей потенциальной энергии		6		4
2	Метод переходного состояния для расчета констант скорости прямых термических бимолекулярных 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, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Теоретическая физика [Текст] : в 10 т. Т. 10 : Физическая кинетика : учеб. пособие для вузов / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского .— 2-е изд., испр. — М. : Физматлит, 2001, 2002, 2007 .— 536 с.
2. Химическая физика твердого тела [Текст] : учебник для вузов по направлению "Химия, физика и механика материалов" / П. Ю. Бутягин .— М. : Изд-во МГУ, 2006 .— 272 с.
3. Химическая кинетика [Текст] / В. В. Буданов, Т. Н. Ломова, В. В. Рыбкин - СПб.Лань,2014
4. Химическая кинетика: задачи, примеры, задания[Текст] : учеб. пособие для вузов / А. П. Пурмаль, В. Н. Простов, Ю. Н. Козлов ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т .— 2-е изд., испр. и доп. — М. : МФТИ, 2009 .— 195 с.

Дополнительная литература

1. Физическая кинетика [Текст] : учеб. пособие для вузов / И. В. Колоколов, Е. Г. Образовский, Е. В. Подивилов ; М-во образования и науки РФ, Моск. физ.-техн. ин-т, Новосиб. гос. ун-т (гос. ун-т) .— 2-е изд., перераб. и доп. — М. : МФТИ, 2010 .— 224 с.
2. Физическая химия [Текст] : учебник для вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко ; под ред. А. Г. Стромберга .— 5-е изд., испр. — М. : Высшая школа, 2003 .— 527 с.

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 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 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:	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

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
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 «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 (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия.

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

Вопросы к экзамену:

- 1) Уравнение Шредингера для молекулы. Нерелятивистский и релятивистский вклады. Приближение Борна-Оппенгеймера для молекулы. Адиабатические электронные потенциальный 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 микроканонические 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 линейный 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.

Примеры билетов.

Пример 1.

1. 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.
2. Применение метода переходного состояния к расчету стерического множителя бимолекулярной реакции на примере реакции $A+BC \rightarrow AB+C$ (A, B, C - атомы), идущей через линейный переходный комплекс.

Пример 2.

1. Потенциальная поверхность системы трех атомов с валентными s-электронами. Модель Лондона и физическая причина возникновения потенциального барьера.
2. Рекомбинация радикалов. Зависимость константы скорости от давления в рамках механизма сильных столкновений. Зависимость константы скорости рекомбинации третьего порядка от числа степеней свободы образующейся молекулы.

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.