

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

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,  
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**  
**Теория элементарного акта реакций в конденсированной фазе**

**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 №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

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 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Теория элементарного акта реакций в конденсированной фазе**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<b>ОПК-1.С.</b> Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	<b>Уметь</b> анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, <b>Уметь:</b> самостоятельно составлять план исследования <b>Владеть</b> навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
<b>СПК-2.С.</b> Способность выбирать теоретические модели для описания конкретного химического процесса с использованием аппарата современных теорий	<b>Знать:</b> теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ <b>Уметь:</b> выбирать направление экспериментального физико-химического исследования, адекватное поставленной задаче

6. 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, 2 часа – групповые консультации, часов – индивидуальные консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 56 часов составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

**Знать:** общую физику, математический анализ, теорию вероятностей, элементы строения вещества, химическую термодинамику и кинетику.

**Уметь:** использовать эти знания.

**Владеть:** базовыми компьютерными программами.

8. 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, вит.п..	Всего
Тема 1 Элементарный акт химической реакции в газе. Поверхность потенциальной энергии.	22	8	8		2		18	4		4
Тема 2 Модель диффузионного прохождения энергетического барьера реакции	18	6	6		2		14	4		4
Тема 3 Теория переноса электрона.	20	6	6		2		14	6		6
Тема 4 Туннельные эффекты в химии.	24	8	8		2		18	6		6
Тема 5 Спиновые и магнитные эффекты в химии.	24	8	8		2		18	6		6
Промежуточная аттестация <i>экзамен</i>	36			2		4	6	30		30

<b>Итого</b>	<b>144</b>	<b>36</b>	<b>36</b>	<b>2</b>	<b>10</b>	<b>4</b>	<b>88</b>	<b>56</b>		<b>56</b>
--------------	------------	-----------	-----------	----------	-----------	----------	-----------	-----------	--	-----------

### 9. Образовательные технологии:

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

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

Воробьев А.Х. "Лекции по теории элементарного акта химических реакций в конденсированной фазе", учебное пособие Химфак.МГУ, 2000, 111с.

### 11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

#### Основная литература

1. Г.Эйринг, С.Г.Лин, С.М.Лин, "Основы химической кинетики", М.:Мир, 1983, 528 с.
2. Р.Драго "Физические методы в химии", т.1, М.:Мир, 1981, 422 с.
3. Л.Д.Ландау, К.Лившиц, "Квантовая механика" М. 1974..
4. Р. Вудворд, Р.Хоффман, "Сохранение орбитальной симметрии", М.: Мир, 1971, 207 с.
5. Дж.Бартлоп, Дж.Койл, "Возбужденные состояния в органической химии", М.: Мир, 1978, 446 с..
6. В.Н.Кондратьев, Е.Е.Никитин, А.И.Резников, С.Я.Уманский, "Термические бимолекулярные реакции в газах", М.: Наука, 1976, 192с..
7. Р.Пирсон "Правила симметрии в химических реакциях", М, Мир, 1979, 592с.
8. С.Я.Уманский " Теория элементарного акта химических превращений в газовой фазе"М, МГУ, 2000, 286с.
9. М.В.Базилевский, В.И.Фаустов "Современные теории химических реакций в конденсированной фазе". Успехи химии. 1992, т.61, N. 7, с.1185-1223.
10. А.Л.Бучаченко "Магнитные эффекты в химических реакциях" Успехи химии, 1976,т.45, 761-793.
11. А.Л.Бучаченко "Второе поколение магнитных эффектов в химических реакциях" Успехи химии,1993, т.62(12), с. 1139-1149.

#### Дополнительная литература

1. С.Глестон, К. Лейдер, Г.Эйринг, "Теория абсолютных скоростей реакций" М.: Изд. Ин.Лит., 1948, 583 с.
2. Л.С.Поллак, М.Я.Гольденберг, А.А.Левицкий, "Вычислительные методы в химической кинетике", М.:Наука, 1984, 280 с.

3. А.Л.Бучаченко "Химическая поляризация электронов и ядер", М., Наука, 1974, 245 с.  
 4. А.Л.Бучаченко, Р.З.Сагдеев, К.М.Салихов "Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях" Новосибирск, Наука, 1978.

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели: Воробьев Андрей Харлампьевич, д.х.н., профессор, [a.kh.vorobiev@gmail.com](mailto:a.kh.vorobiev@gmail.com)

### 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.5.

**Контрольная работа** включает задачи, направленные на выбор теоретических моделей применимых к конкретной химической реакции, а также задачи, требующие количественной оценки кинетических характеристик химических процессов.

#### Пример.

1. Экспериментальное изучение реакции показало неожиданно маленькую константу скорости. Какие из перечисленных теоретических моделей могут быть использованы для объяснения результата эксперимента?

Реакция	Модель
1. Реакция диссоциации в газовой фазе.	ТПС, Принцип орбитальной симметрии, Схема Линдемана, РРKM,
2. Реакция присоединения двух органических молекул.	Теория Маркуса, Модель Крамерса, Спиновые эффекты,
3. Реакция изомеризации в жидкой фазе.	Неадиабатический путь реакции, Туннельный эффект.

2. Предложите координаты, нарисуйте качественный вид ППЭ для процесса  

$$\text{N}_2\text{O}_4 \rightarrow 2 \text{NO}_2 \rightarrow \text{O}_2\text{N-ONO}$$

3. Объясните с точки зрения теории элементарного акта, почему в жидких растворах не протекает цепной реакции окисления водорода кислородом.

4. Оцените, при какой температуре вероятностью адиабатического прохождения точки квазипересечения с расщеплением 20 кДж/моль можно пренебречь ( $<10^{-6}$ ); приведенная масса 20 а. е.

5. Предскажите изотопный состав продуктов фотохимического распада перекиси водорода в жидком растворе.  $D(s=1)$ ,  $O17(s=5/2)$ ,  $O18(s=0)$ .  $A_{ST\sigma} H=23$  G,  $A_{ST\sigma} D=3.5$  G,  $A_{ST\sigma} O17 \sim 1$  G.

### Вопросы к экзамену.

1. Химическая реакция, как движение по поверхности потенциальной энергии. Адиабатические и неадиабатические реакции (примеры). Координаты для построения поверхности потенциальной энергии химической реакции (примеры).

2. Адиабатическое приближение. Адиабатические и неадиабатические реакции (примеры). Формула Ландау-Зинера. Правило орбитальной симметрии. Корреляционные диаграммы.

3. Элементарный акт химического превращения в конденсированной фазе. Влияние среды. Модель Крамерса. Уравнение Ланжевена. Трение и случайная сила. Понятие о флуктуационно-диссипативной теореме. Константа скорости реакции в модели Крамерса. Области нормального сильного и слабого трения. Связь с теорией переходного состояния и теорией мономолекулярных реакций. Многомерная модель Крамерса. Распределение молекул по скорости реакции. Полихронная кинетика. Ступенчатая кинетика низкотемпературных реакций.

4. Теория переноса электрона. Внешнесферный и внутрисферный перенос электрона (примеры). Роль среды. Теория Маркуса. Динамическая поляризация среды. Зависимость константы скорости от энергии Гиббса переноса электрона. Обратная область Маркуса. Оценка энергии реорганизации среды. Задача Борна.

5. Туннельные эффекты в химии. Экспериментальное наблюдение туннельных эффектов. Константа скорости туннельной реакции. Формула Гамова. Расстояние туннелирования. Низкотемпературный предел константы скорости реакции. Туннелирование в многомерной ППЭ. Классический и туннельный изотопные эффекты.

6. Спиновые и магнитные эффекты в химии. Время спиновой релаксации. Спиновые запреты при рекомбинации радикалов (примеры). Спиновая динамика радикальных пар. Роль среды. Влияние магнитного поля на химическую реакцию. Магнитный изотопный эффект. ХПЯ. Спиновое эхо.

### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

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

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
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

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Уметь: выбирать направление экспериментального физико-химического исследования, адекватное поставленной задаче	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене