

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Кафедра химии



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

Батыгов З.О.

25 мая 2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**ХИМИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ,
КАТАЛИЗ**

Факультет: химико-биологический

Направление подготовки /специальность: 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки: «Физическая химия»

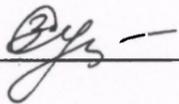
Программа подготовки: академическая магистратура

Квалификация (степень) выпускника: Магистр

Форма обучения: очная

МАГАС 20 18 г.

Составители рабочей программы

профессор, д.х.н.  / Султыгова З.Х. /

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры химии

Протокол заседания № 6 от «24» апреля 2018 г.

/ Заведующий кафедрой

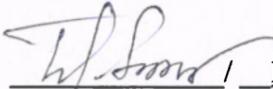
 / Султыгова З.Х. /

Рабочая программа одобрена учебно-методическим советом

химико-биологического факультета

Протокол заседания № 4 от «20» апреля 2018 г.

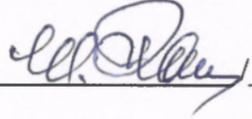
Председатель учебно-методического совета

 / Плиева А.М. /

Программа рассмотрена на заседании Учебно-методического совета университета

протокол № 5 от «23» мая 2018 г.

Председатель Учебно-методического совета университета

 / Хашагульгов Ш.Б. /

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Химическая динамика элементарных процессов, катализ» являются:

- 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 магистрантов 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.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Химическая динамика элементарных процессов, катализ» относится к вариативной части обязательных дисциплин; изучается в 3 семестре.

Дисциплина представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля – физической химии, коллоидной химии, химической технологии, физико-химических методов исследования.

Перечень дисциплин, необходимых для изучения дисциплины: неорганическая химия, квантовая химия, физика, математика.

Таблица 2.1.

Связь дисциплины «Химическая динамика элементарных процессов, катализ» с предшествующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, предшествующие дисциплине «Химическая динамика элементарных процессов, катализ»	Семестр
Б1.В.ОД.5	Статистическая термодинамика конденсированных систем	1
Б1.В.ОД.7	Термодинамика и молекулярно-кинетическая теория необратимых процессов	1
Б1.В.ОД.3	Химическая термодинамика и фазовые равновесия	2

Таблица 2.2.

Связь дисциплины «Химическая динамика элементарных процессов, катализ» с последующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Химическая динамика элементарных процессов, катализ»	Семестр
Б1.В.ОД.9	Современные методы химического анализа	4
Б1.В.ОД.10	Термодинамика растворов	4

В результате освоения дисциплины магистрант должен

Знать:

- 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.

Уметь:

- демонстрировать связь фундаментальных опытов с теориями катализа с помощью известных математических методов;
- моделировать процессы и проводить численные расчеты соответствующих величин в общепринятых системах единиц.

Владеть:

- основами дисциплины для решения практических задач;
- методикой проведения физико-химических исследований;
- современными приборами для физико-химических исследований.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

- а) **общепрофессиональных (ОПК)** - ОПК-1, ОПК-2;
- б) **профессиональных (ПК)** - ПК-1, ПК-4.

Таблица 3.1.

Матрица связи компетенций, формируемых на основе изучения дисциплины «Химическая термодинамика и фазовые равновесия», с временными этапами освоения ее содержания

Коды компетенций (ФГОС)	Компетенция	Семестр изучения
ОПК-1	Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	3
ОПК-2	Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации	3
ПК-1	Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	3
ПК-4	Способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)	3

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Вид учебной работы	Всего часов	3 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	144	144
Аудиторные занятия	64	64
Лекции	24	24
Лабораторные занятия	38	38
Контроль самостоятельной работы	2	2
Самостоятельная работа студентов	26	26
Контроль	54	54

**5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ
(РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА
АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ
ЗАНЯТИЙ**

Таблица 5.1.

Структура и содержание дисциплины

п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы (час)				Формы контроля
				Лекции	Лабораторные работы	Самостоятельные работы		
1.	Введение	3	1,2	2	-	2		
2.	Основные понятия и законы химической кинетики	3	3-5	2	6	4		Опрос
3.	Кинетический анализ простых и сложных реакций	3	6-8	4	6	4		Опрос
4.	Цепные реакции	3	9-11	4	6	4		Колоквиум
5.	Теории химической кинетики	3	12-14	4	6	4		Колоквиум
6.	Фотохимические реакции	3	15-17	4	6	4		Колоквиум
7.	Катализ	3	18-20	4	8	4		Колоквиум
	Итого:			24	38	26		

Таблица 5.2.

Конкретизация результатов освоения дисциплины

<i>ОПК-1 Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач</i>		
<p>Знать: основные этапы и закономерности развития химической науки (химии твердого тела и материаловедения), понимать объективную необходимость возникновения новых направлений, наличие представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков; химию радиоактивных элементов, химические и физические аспекты, возникающие при взаимодействии ионизирующего излучения с различными объектами, основы безопасной эксплуатации объектов, используемых в ядерной промышленности, устройство различных установок, предназначенных для получения ионизирующего излучения; процессы протекающие в веществах в электрическом и магнитном полях; химию радиоактивных элементов, физические и химические аспекты, возникающие при взаимодействии ионизирующего излучения с различными объектами, основы безопасной эксплуатации объектов, используемых в ядерной промышленности, устройство различных установок, предназначенных для получения ионизирующего излучения.</p>	<p>Уметь: использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности; использовать знания, умения и навыки для моделирования и прогноза физико-химических свойств широкого круга материалов; использовать полученные знания, умения и навыки для анализа магнитных и электрических свойств широкого круга материалов, включая объекты, полученные самостоятельно в рамках научно-исследовательской деятельности; производить целенаправленный выбор источников ионизирующего излучения, необходимых для получения желаемого эффекта при обработке различных природных и искусственных объектов, и их применять в соответствии с различными требованиями.</p>	<p>Владеть: методологией использования современных научных представлений в профессиональной деятельности; навыками регулирования химико-технологического процесса; знаниями электрических и магнитных свойств перспективных материалов, используемых в современной технике; современными технологиями получения радиоактивных элементов, физико-химическим инструментарием, необходимым для определения степени воздействия ионизирующего излучения на различные объекты окружающей среды.</p>

<i>ОПК-2 Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации</i>		
Знать: возможности использования современных информационных технологий в образовании и науке; системы сбора, обработки и хранения химической информации; виды программного обеспечения для представления результатов химических исследований, принципы создания, построения и виды компьютерных презентаций; использовать презентационную графику для визуализации результатов теоретического и экспериментального исследований.	Уметь: создавать авторские и пользоваться стандартными банками компьютерных программ и банками данных; анализировать результаты математической обработки научных данных с целью определения их достоверности и области использования; использовать презентационную графику для визуализации результатов теоретического и экспериментального исследований.	Владеть: методами обработки информации системами мультимедиа, навыками создания компьютерных презентаций, в том числе интерактивных; всеми видами научного общения.
<i>ПК-1 Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты</i>		
Знать: о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии твердого тела (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и др.); электрические и магнитные свойства перспективных материалов, используемых в современной технике; принципы обработки полученных в исследованиях результатов; возможности использования Интернет-ресурсов для ознакомления с передовыми исследованиями в сфере профессиональных результатов.	Уметь: анализировать состав и свойства полученных веществ с целью доказательства выполнения поставленной задачи; давать рекомендации на основании проведенных исследований; оценивать экологические последствия, связанные с развитием ядерной промышленности, производить целенаправленный выбор источников ионизирующего излучения, необходимых для получения желаемого эффекта при обработке различных природных и искусственных объектов, и применять их в соответствии с различными требованиями; классифицировать материалы по различным признакам.	Владеть: современными технологиями получения энергетических и наноматериалов, радиоактивных элементов, физико-химическим инструментарием, необходимым для определения степени воздействия ионизирующего излучения на различные объекты окружающей среды; навыками работы с поисковыми и информационными ресурсами на английском языке в сети Интернет.
<i>ПК-4 Способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)</i>		
Знать: особенности устной	Уметь: представлять полу-	Владеть: навыками работы

и письменной речи в сфере профессиональных коммуникаций; формы представления и особенности презентации результатов научных исследований в периодических изданиях и конференциях; нормативные документы по оформлению научно-исследовательских работ.	ченые в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати); использовать разные формы представления результатов исследований; выбирать метод расчета для конкретной химической задачи.	с научно-техническими текстами на английском языке по направлению химия; навыками представления полученных в исследованиях результатов в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)
--	--	--

Содержание дисциплины «Химическая динамика элементарных процессов, катализ»

ТЕМА 1. ВВЕДЕНИЕ

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 .

ТЕМА 2. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ЗАКОНЫ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

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.

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.

ТЕМА 3. КИНЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОСТЫХ И СЛОЖНЫХ РЕАКЦИЙ.

Необратимые реакции первого, второго и третьего порядков. Определение констант скорости из опытных данных. Методы определения порядка реакции и вида кинетического уравнения.

Сложные реакции. Принцип независимости элементарных стадий. Методы составления кинетических уравнений. Обратимые реакции первого порядка. Определение элементарных констант из опытных данных. Параллельные реакции. Последовательные реакции на примере двух необратимых реакций первого порядка. Кинетические кривые накопления отдельных продуктов.

Кинетический анализ процессов, протекающих через образование промежуточных продуктов. Принцип квазистационарности Боденштейна и область его применимости.

ТЕМА 4. ЦЕПНЫЕ РЕАКЦИИ

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 НВг.

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.

ТЕМА 5. ТЕОРИИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

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. *Поправки Хиншельвуда и Касселя. Понятие о теории РРКМ.*

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.

Теория переходного состояния (активированного комплекса). Свойства активированного комплекса. Статистический расчет константы скорости. Основные допущения теории активированного комплекса и область его применимости. Трансмиссионный коэффициент.

Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Энтропия активации. Соотношения между опытной и истинной энергией активации. Объяснение “повышенных” и “заниженных” значений предэкспоненциального множителя.

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.

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.

ТЕМА 6. ФОТОХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ

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.

ТЕМА 7. КАТАЛИЗ

Определение катализа. Общие принципы катализа. Роль катализа в химии. Основные промышленные каталитические процессы. Примеры механизмов каталитических процессов.

Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Классификация реакций кислотно-основного типа. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета и их использование для вычисления скорости реакции и кинетических постоянных.

Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда и его использование в кинетике каталитических реакций. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Уравнение Семенова в кинетике радикальных реакций. Специфический и общий основной катализ, нуклеофильный и электрофильный катализ.

Катализ комплексными соединениями переходных металлов. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы. Каталитическое окисление этилена комплексными соединениями палладия.

Ферментативный катализ. Общие сведения о кинетике и механизмах ферментативных реакций. Применение принципа стационарности для вычисления начальной скорости гомогенной каталитической реакции с участием одного реагента. Уравнение Михаэлиса — Ментэн. Определение кинетических постоянных этого уравнения из опытных данных.

Гетерогенный анализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Явление отравления катализаторов. Активность и селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Энергия активации каталитических реакций. *Неоднородность поверхности катализаторов. Нанесенные катализаторы.*

Металлы как катализаторы. Теория мультиплетов Баландина. Принцип геометрического и энергетического соответствия. Область применения теории мультиплетов. Нанесенные катализаторы. *Теория активных ансамблей Кобозева.*

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе обучения используются традиционные образовательные технологии (лекции, семинары, практические работы) и активные инновационные образовательные технологии:

1. Семинар в диалоговом режиме применяется в основном при обсуждении выступлений магистрантов с докладами (рефератами)
2. Групповой разбор результатов контрольных работ
3. Встречи с сотрудниками и руководителями профильных лабораторий и предприятий - потенциальными работодателями выпускников.

В целом при изучении курса активные и интерактивные формы проведения занятий составляют не менее 30% аудиторных занятий.

**7. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ
САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ
(МОДУЛЮ)**

7.1. Перечень-учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Эммануэль Н.Н., Кноре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа. 1974.
2. Физическая химия. Под ред. Краснова К.С. Т.2 М.: Высшая школа. 1995.
3. Лавоуиц Л., Аренс Дж. Задачи по физической химии с решениями. М.: Мир. 1972.

Лекционные занятия проводятся 1 раз в неделю в объеме 2 часов и 3 часа лабораторных занятий в 3 семестре. После окончания изучения каждой темы магистранты проходят тестирование, выполняют контрольные работы.

7.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 7.1.

Содержание самостоятельной работы обучающихся

<i>№№ п/п</i>	<i>Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение</i>	<i>Кол-во часов</i>	<i>Формы работы</i>
1.	Введение	2	собеседование
2.	Основные понятия и законы химической кинетики	4	собеседование
3.	Кинетический анализ простых и сложных реакций	4	собеседование
4.	Цепные реакции	4	собеседование
5.	Теории химической кинетики	4	собеседование
6.	Фотохимические реакции	4	собеседование
7.	Катализ	4	собеседование

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Фонды оценочных средств и критерии оценки представлены отдельно, как приложение к рабочей программе.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература:

1. Эммануэль Н.Н., Кноре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа. 1974.
2. Физическая химия. Под ред. Краснова К.С. Т.2 М.: Высшая школа. 1995.
3. Лабовиц Л., Аренс Дж. Задачи по физической химии с решениями. М.: Мир. 1972.
4. Корольков Д.В. Теоретическая химия: общие принципы и концепции. М.: Академкнига, 2007
5. Герасимов Я.И. и др. Курс физической химии: в 2т. М.: Химия, 1970, т 2.
6. Еремин Е.Н. Основы химической кинетики: Учебное пособие. М.: Высшая школа, 1976, 374с.
7. Эммануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики: М.: Высшая школа, 1984, 463с.
8. Бенсон С. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1964, 603с.
9. Боресков Г.К. Катализ: в 2 ч. Новосибирск: Наука, 1971, ч.1,2.
10. Сокольский Д.В., Друзь В.А. Теория гетерогенного катализа. Алма-Ата: Наука, 1968, 390с.
11. Панченков Г.М., Лебедев В.И. Химическая кинетика и катализ. М: МГУ, 1960.

б) дополнительная литература

1. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978г.
2. Курс физической химии. Т.1 и Т.2. Под ред. Я.И. Герасимова. М.: Химия, 1973.
3. Практикум по физической химии под редакцией Буданова В.В. и Воробьева Н.К. М.: Химия, 1986.
4. Полтораки О.М. Лекции по теории гетерогенного катализа. М.: МГУ, 1968.
5. Киперман С.Л. Введение в кинетику гетерогенных каталитических реакций. М.: Наука, 1964.
6. Байрамов В.М. Химическая кинетика и катализ: Примеры и задачи с решениями

в) электронные источники информации

1. Научная электронная база данных издательства Elsevier, <http://www.sciencedirect.com/>
2. Научная электронная база данных издательства ACS Publication, <http://pubs.acs.org/>
3. Научно-поисковая электронная база данных Reaxys. <https://www.reaxys.com/>
4. Научная электронная база данных издательства Springer, <http://www.springerlink.com/>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

- лекционные аудитории;
- аудитории для семинарских занятий;
- проекционное оборудование и компьютер;
- интерактивные доски;