

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
Протокол № 4 от 29 мая 2014 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): Элементарный акт и кинетика реакций в конденсированной фазе.
Курс направлен на приобретение слушателями современных знаний в области теоретического описания и предсказания скоростей химических реакций в жидкой и твердой фазе (для аспирантов).
2. Уровень высшего образования аспирантура.
3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки, направленность (профиль) 02.00.04 Физическая химия.
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок «Дисциплины (модули)»
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-1 способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	31 (УК-1) ЗНАТЬ: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях. В2 (УК-1) ВЛАДЕТЬ: навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.
УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на осно-	31(УК-2) ЗНАТЬ: методы научно-исследовательской деятельности.

ве целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) УМЕТЬ: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно- теоретические методы исследования.
ПК-4 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	У1 (ПК-4) УМЕТЬ: выбирать теоретические модели для описания конкретного химического процесса с использованием аппарата современных теорий.

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:
Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 60 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов занятия семинарского типа, 24 часа групповых и индивидуальных консультаций, мероприятий текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 48 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

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

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся должен

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

Уметь: использовать эти знания.

Владеть: навыками использования основных представлений о строении вещества, химической термодинамике и кинетике.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам* (Перечень тем см. Приложения).

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. П.	Всего
Тема 1 Адиабатические и неадиабатические химические процессы Их кинетические характеристики	20	4	4	2	2		12	8		8
Тема 2 Теоретические модели переноса легких частиц в жидкой и твердой фазе	20	4	4	2	2		12	8		8
Тема 3 Функции распределения по скорости химической реакции.	20	4	4	2	2		12	8		8
Тема 4 Спиновая химия.	30	6	6	2	2	4	20	10		10

Промежуточная аттестация, зачет	18			2	2		4	14		14
Итого	108	18	18	10	10	4	60	48		48

8. Образовательные технологии.

Занятия проводятся как с помощью традиционных образовательных технологий, так и с применением современных компьютерных программ.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю): презентации к лекционным занятиям.

10. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Ландау Л.Д., Лившиц К., Квантовая механика, М. 1974.
2. Вудворд Р., Хоффман Р., Сохранение орбитальной симметрии, М., Мир, 1971, 207 с.
3. Бартлоп Дж., Койл Дж., Возбужденные состояния в органической химии, М., Мир, 1978, 446 с.
4. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е., Резников А.И, Уманский С.Я., Термические бимолекулярные реакции в газах, М., Наука, 1976, 192с.
5. Пирсон Р., Правила симметрии в химических реакциях, М, Мир, 1979, 592с.
6. Уманский С.Я., Теория элементарных химических реакций. Долгопрудный: издательский Дом «Интеллект» 2009.408с.
9. Базилевский М.В., Фаустов В.И., Современные теории химических реакций в конденсированной фазе, Успехи химии, 1992, т.61, N. 7, с.1185-1223.
10. Бучаченко А.Л., Магнитные эффекты в химических реакциях, Успехи химии, 1976, т.45, 761-793.
11. Бучаченко А.Л., Второе поколение магнитных эффектов в химических реакциях, Успехи химии, 1993, т.62(12), с. 1139-1149.

Дополнительная литература

12. Бучаченко А.Л., Химическая поляризация электронов и ядер, М., Наука, 1974, 245 с.
13. Бучаченко А.Л., Сагдеев Р.З, Салихов К.М., Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях, Новосибирск, Наука, 1978.
 - Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
 - Описание материально-технической базы.

Занятия проводятся в учебной аудитории, оборудованной доской, компьютером, проектором. Домашние задания выполняются с использованием персональных компьютеров студентов.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

Воробьев Андрей Харлампьевич, д.х.н., профессор, a.kh.vorobiev@gmail.com

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

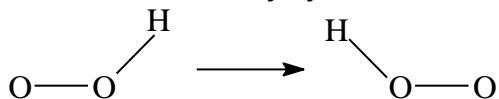
1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
2. Материалы к текущей (контрольные работы, вопросы к коллоквиумам и пр.), промежуточной аттестации (вопросы к экзамену или зачету)

Контрольная работа включает задачи, требующие количественной оценки кинетических характеристик химических процессов.

Пример.

1. Существуют ли реакции, для описания которых имеет смысл использовать модель Маркуса, теорию Крамерса и спиновую динамику одновременно? Приведите объяснения с примерами.
2. Предложите координаты, нарисуйте качественный вид ППЭ для процесса
$$\text{HO}\cdot + \cdot\text{H} \leftarrow \text{HO}\text{H} \rightarrow \text{HO}\cdot + \cdot\text{OH}$$
3. Оцените адиабатическое расщепление, если известно, что процесс протекает при комнатной температуре при адиабатическом прохождении приведенной массы 50 а.е. точки квазипересечения с энергией активации 30 кдж/моль с константой скорости 10^6с^{-1} .
4. Оцените разрешенность по спину реакции $2\text{CH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4$. Укажите условия благоприятные и неблагоприятные для протекания реакции.

5. Оцените частоту туннельного протекания перехода:



Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам. В ходе сдачи зачета проверяется, в первую очередь, формирование «знаниевой» компоненты компетенций, перечисленных в п.5, а также сформированность перечисленных в п.5 умений. Уровень знаний аспиранта по каждому вопросу оценивается на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае, если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено». Ведомость приема зачета подписывается членами комиссии.

**Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине Элементарный акт
на основе карт компетенций выпускников**

РЕЗУЛЬТАТ ОБУ- ЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВА- НИЯ*
	1	2	3	4	5	
31 (УК-1) ЗНАТЬ: методы критическо- го анализа и оценки современных науч- ных достижений, а также методы гене- рирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в меж- дисциплинарных областях	Отсутствие зна- ний в области теоретического описания и предсказания скоростей хими- ческих реакций в жидкой и твер- дой фазе.	Фрагментар- ные знания в области теоре- тического опи- сания и пред- сказания ско- ростей химиче- ских реакций в жидкой и твер- дой фазе.	Неполные знания в области теоре- тического описа- ния и предска- зания скоростей хи- мических реакций в жидкой и твер- дой фазе.	Сформированные, но содержащие отдельные пробле- мы знания в обла- сти теоретическо- го описания и предсказания скоростей хими- ческих реакций в жидкой и твердой фазе.	Сформирован- ные системати- ческие знания в области теоре- тического опи- сания и предска- зания скоростей химических ре- акций в жидкой и твердой фазе.	Зачет в форме индивиду- ального собе- седования
В2 (УК-1) ВЛАДЕТЬ: навыками	Отсутствие навыков	Фрагментар- ные навыки критического анализа и оценки совре- менных науч- ных достиже- ний и резуль- татов деятель- ности по реше-	Неполные навыки критического анализа и оценки современных научных дости- жений и резуль- татов деятельно- сти по решению исследователь- ских и практиче-	Сформированные, но содержащие Сформированные отдельные пробле- мы навыки	Сформирован- ные устойчивые навыки критиче- ского анализа и оценки совре- менных научных достижений и результатов дея- тельности по решению иссле-	Зачет в форме индивиду- ального собе- седования

		нию исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.	ских задач, в том числе в междисциплинарных областях.		довательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.	
31(УК-2) ЗНАТЬ: методы научно-исследовательской деятельности.	Отсутствие знаний о методах научно-исследовательской деятельности.	Фрагментарные знания о методах научно-исследовательской деятельности.	Неполные знания о методах научно-исследовательской деятельности.	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о методах научно-исследовательской деятельности.	Сформированные систематические знания о методах научно-исследовательской деятельности.	Зачет в форме индивидуального собеседования
У1 (ОПК-1) УМЕТЬ: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования.	Отсутствие умений	Частично освоенное умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов исследования	В целом успешное, но не систематическое умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов исследования	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов исследования	Успешное и систематическое умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов исследования	Письменное решение задач
У3 (ПК-4) УМЕТЬ: выбирать теоретические модели для описания конкретного химического процесса с использованием аппарата современных	Отсутствие умения	Частичное умение выбирать теоретические модели для описания конкретного химического процесса с использо-	В целом успешное, но не систематическое умение выбирать теоретические модели для описания конкретного химического про-	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы, умение выбирать теоретические модели для описания конкретного химического	Успешное умение выбирать теоретические модели для описания конкретного химического процесса с использованием	Зачет в форме индивидуального собеседования

теорий		ванием аппарата современных теорий	цесса с использованием аппарата современных	процесса с использованием аппарата современных	аппарата современных теорий	
--------	--	------------------------------------	---	--	-----------------------------	--