

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

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Кинетика диффузионно-контролируемых реакций**

Данный курс направлен на формирование у аспирантов представлений о методах математического моделирования химических процессов, скорость которых обусловлена как скоростью собственно химической реакции, так и скоростью диффузии реагирующих веществ. Задача курса – научить слушателей рассчитывать эффективную скорость химических реакций, происходящих в диффузионном режиме в системах различной топологии. Аспиранты осваивают методы математического моделирования сложных химических процессов с применением современных компьютерных программ.

2. Уровень высшего образования – аспирантура.

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки, профиль 02.00.15 Кинетика и катализ

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП:

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	З1 (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
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов иссле-	У1 (ОПК-1) УМЕТЬ: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования.

дования и информационно-коммуникационных технологий	
ПК-13 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) 02.00.15 Кинетика и катализ	У1 (ПК-13) УМЕТЬ: использовать имеющиеся теоретические модели, проводить в соответствии с этими моделями оценки кинетических характеристик конкретных химических реакций В1 (ПК-13) ВЛАДЕТЬ: навыками анализа полученных экспериментальных и расчетных кинетических данных.

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 62 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов занятия семинарского типа, 26 часов групповых и индивидуальных консультаций и мероприятий текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 46 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: Общие закономерности протекания химических реакций. Иметь представление о скорости и энергетике реакций.

Уметь: Решать дифференциальные уравнения.

Владеть: Основными навыками пользования компьютерными программами.

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 Механизмы диффузионных процессов. Законы Фика. Уравнения Стокса-Энштейна и Дебая-Стокса-Энштейна.	12	2	2	2	2		8	4		4
Тема 2 Диффузионные задачи в стационарном приближении. Граничные условия. Кинетический и диффузионный режимы химического процесса.	16	4	4	2	2		12	4		4
Тема 3 Нестационарная диффузионная кинетика. Начальное и граничные условия. Применение пре-	16	4	4	2	2		12	4		4

образования Лапласа для решения нестационарных диффузионных задач.										
Тема 4 Вращательная диффузия, её влияние на скорость химических процессов. Кинетическое описание вращательной диффузии.	16	4	4	2	2		12	4		4
Тема 5 Численное решение диффузионных задач.	28	4	4	2	2	2	14	4	12	16
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	18			2	2		4	14		14
Итого	108	18	18	12	12	2	62	34	12	46

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. Воробьев А.Х., Диффузионные задачи в химической кинетике, Москва, Изд-во МГУ, 2003.
2. Овчинников А. А., Тимашев С. Ф., Белый Ф. Ф., Кинетика диффузионно-контролируемых реакций, Москва, Химия, 1986.

Дополнительная литература

3. Франк-Каменецкий Д.А., Диффузия и теплопередача в химической кинетике, Москва, Наука, 1987.

- 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.

- 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:

Чумакова Наталья Анатольевна, к.х.н., доцент, harmonic2011@yandex.ru

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 на определение скорости диффузионного процесса.

Пример.

1. Реакция первого порядка протекает на поверхности катализатора, представляющего собой сферические частицы радиуса R . В зависимости от интенсивности перемешивания процесс может протекать в кинетическом или диффузионном режиме. Установить условия смены режима.
2. Получите решение задачи Смолуховского для условия серой сферы в стационарном и нестационарном режимах.

Примеры.

1. На оптически плотный образец, содержащий вещество А в большой концентрации, падает свет постоянной интенсивности. Вещество А под действием света превращается в вещество В, которое флуоресцирует и термически превращается в вещество С. Установить временную эволюцию распределения интенсивности флуоресценции по образцу с учетом трансляционной диффузии вещества В.
2. В тонкой полимерной пленке равномерно распределен стабильный нитроксильный радикал (зонд). При помещении пленки в воду зонд постепенно выходит из полимера в водную фазу. Предсказать временную эволюцию формы спектра ЭПР системы «полимер-вода-зонд».

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет предполагает самостоятельное формулирование и решение студентом задачи, включающей химическое превращение, а также диффузию реагирующих веществ. Задача предполагает расчет параметров химического процесса (профиля концентрации или температуры, времени установления равновесия в системе, эффективной константы химической реакции и т.п.) для конкретной системы в рамках рассмотренного приближения. Задача должна быть оформлена в печатном виде с графиками, оценками величин - времен, расстояний и т.д. Зачет проводится в форме индивидуального собеседования. 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.

Приложение 1

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине Кинетика диффузионно-контролируемых реакций 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 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	Отсутствие знаний по кинетике диффузионно-контролируемых реакций	Фрагментарные знания в области кинетики диффузионно-контролируемых реакций	Общие, но не структурированные знания в области кинетики диффузионно-контролируемых реакций	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания в области кинетики диффузионно-контролируемых реакций	Сформированные систематические знания в области кинетики диффузионно-контролируемых реакций	Зачет в форме индивидуального собеседования
У1 (ОПК-1) УМЕТЬ: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования.	Отсутствие умений выбирать теоретические модели для описания конкретного химического процесса	Частично освоенное умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов для описания конкретного химического	В целом успешное, но не систематическое умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов математического моде-	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов описания конкретного хими-	Успешное и систематическое умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов описания конкретного хими-ческого про-	Письменное решение задач

		процесса	лирования конкретного химического процесса	ческого процесса	цесса	
У1 (ПК-13) УМЕТЬ: использовать имеющиеся теоретические модели, проводить в соответствии с этими моделями оценки кинетических характеристик конкретных химических реакций	Отсутствие умения	Частично освоенное умение на основе имеющихся теоретических моделей проводить в соответствии с этими моделями оценки кинетических характеристик конкретных химических реакций	В целом успешное, но не систематическое умение в выборе и применении моделей для проведения оценки кинетических характеристик конкретных химических реакций	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение в выборе и применении моделей для проведения оценки кинетических характеристик конкретных химических реакций	Успешное и систематическое умение в выборе и применении моделей для проведения оценки кинетических характеристик конкретных химических реакций	Письменное решение задач
В1(ПК-13) ВЛАДЕТЬ: навыками анализа полученных экспериментальных и расчетных кинетических данных.	Отсутствие навыков	Частично освоенные навыки анализа полученных экспериментальных и расчетных кинетических данных.	В целом успешное, но не систематическое использование навыков анализа полученных экспериментальных и расчетных кинетических данных.	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование навыков анализа полученных экспериментальных и расчетных кинетических данных.	Успешное и систематическое умение использовать навыки анализа полученных экспериментальных и расчетных кинетических данных.	Решение зачетной задачи