

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет
Кафедра химической и биологической физики**



Рабочая программа дисциплины

**ОСНОВЫ ТЕОРИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ
В КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ**

направление подготовки: **03.04.01 Прикладные математика и физика**
направленность (профиль): **все профили**

**Форма обучения
Очная**

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
2	72	32			18	18	2		2
Всего 72 часа / 2 зачетные единицы из них: - контактная работа 36 часов									
Компетенции ПК-1									

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2025

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	3
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	4
5. Перечень учебной литературы.	6
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	6
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	7
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	7
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	7
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	7

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Цель учебного курса «Основы теории химических реакций в конденсированной среде» – обучение слушателей основам базовых физических представлений, методов и моделей современной теории реакций, их применению в практике научно-исследовательской работы в области химической физики и биофизики.

Материал лекционного курса увязывается с передовыми исследованиями всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов. Уделяется особое внимание современным представлениям в теории реакций, связанным с темами курса. В каждом случае специально отмечаются вопросы, активно обсуждаемые в современной профессиональной научной литературе. В начале каждого очередного занятия проводится проверка усвоения предыдущего материала в интерактивной форме – умение студентов сходу отвечать на вопросы (а также формулировать их). Это развивает профессиональные навыки, которые будут необходимы в дальнейшей профессиональной деятельности.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен осваивать и применять специализированные знания в области физико-математических и (или) естественных наук в своей профессиональной деятельности.	ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Знать основные уравнения, методы и приближения в теории элементарных физико-химических процессов: уравнения для матрицы плотности, метод переходного комплекса, квантово-классическое, полуклассическое и адиабатическое приближения. Уметь применять усвоенные методы, уравнения и модели для понимания и описания протекания физико-химических процессов в газах и конденсированных средах. Владеть способами интерпретации экспериментальной кинетики химических реакций на основе физических представлений.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Основы теории химических реакций в конденсированной среде» реализуется для обучающихся по направлению подготовки **03.04.01 Прикладные математика и физика**. Курс относится к числу специальных дисциплин, реализуемых кафедрой химической и биологической физики физического факультета Новосибирского Государственного Университета. При изучении курса магистранты должны понимать, что основные законы химической кинетики и вообще теории реакций всецело базируются на законах и принципах общефизических дисциплин, изученных ими ранее. Необходимыми предпосылками для успешного освоения курса

являются следующие. В цикле математических дисциплин: знание математического анализа, линейной алгебры, основ функционального анализа и методов математической физики и умение применять эти знания при решении задач. Эти знания необходимы для понимания смысла подходов, моделей и уравнений в теории химических реакций и химической кинетики, которые требуют решения обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений математической физики. В цикле общефизических дисциплин необходимыми предпосылками являются знание и умение применять основные принципы классической механики, молекулярной физики, квантовой механики и статистической физики, поскольку знание этих дисциплин необходимо при изучении теоретических методов, используемых в построении теории реакций. Освоение базовых представлений о протекании реакций необходимо не только теоретикам, но и экспериментаторам, так как позволяет значительно расширить кругозор и ориентироваться в современной литературе по химической физике. Кроме того, знание основ теории физико-химических процессов необходимо при изучении других курсов цикла обучения студентов, специализирующихся в области химической и биологической физики и при прохождении научной практики.

3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Трудоемкость дисциплины – 2 з.е. (72 ч)

Форма промежуточной аттестации: 3 семестр – экзамен

Таблица 3.1

№	Вид деятельности	Semestr
		3
1	Лекции, ч	32
2	Практические занятия, ч	
3	Лабораторные занятия, ч	
4	Занятия в контактной форме, ч, из них	36
5	из них аудиторных занятий, ч	32
6	в электронной форме, ч	-
7	консультаций, час.	2
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	36
10	Всего, ч	72

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Программа и основное содержание лекций (32 часа)

№ п/п	Наименование темы и её содержание	Объем, час
1	Приближение Борна-Оппенгеймера Разделение движений электронной и ядерной подсистем. Смысл вида волновой функции адиабатического приближения. Базисные функции адиабатического приближения: базис адиабатического приближения,	2

	грубого адиабатического приближения и нулевого адиабатического приближения. Уравнения эволюции в адиабатическом базисе. Возможность пересечение адиабатических термов. Адиабатические термы двухатомной молекулы.	
2	Особенности протекания реакций в конденсированных средах. Теория элементарного акта Влияние среды на протекание химических реакций в конденсированных средах. Понятие встречи реагентов. Структура теории: разделение на теорию элементарного акта и теорию реакций, зависимых от движения реагентов. Элементарный акт переноса энергии.	2
3	Координата реакции химического процесса в конденсированной среде Определение координаты реакции в конденсированной среде. Поверхность свободной энергии. Численные методы расчета поверхности свободной энергии. Метод umbrella sampling.	2
4	Теория переходного состояния химического процесса в конденсированной среде Константа скорости химической реакции в теории переходного состояния в конденсированной среде. Сравнение с теорией переходного состояния в газах.	2
5	Метод Крамерса описания химических процессов в конденсированных средах Уравнение Ланжевена, уравнение Фоккера-Планка. Предел энергетической диффузии, предел диффузии координаты реакции. Обобщенное уравнение Ланжевена.	4
6	Численные методы расчета констант скоростей в конденсированных средах Определения константы скорости химических процессов в конденсированных средах в методах reaction flux и flux - flux correlation.	2
7	Неадиабатические процессы Общие уравнения в базисе адиабатических состояний. Диагональные и недиагональные элементы неадиабатической связи. Критерии применимости адиабатического приближения, параметр Месси. Классификация неадиабатических переходов. Неадиабатические переходы при наличии квазипересечения адиабатических термом. Диабатические термы. Описание неадиабатических переходов в полуклассическом приближении (задача Ландау - Зинера). Зона неадиабатичности.	4
8	Неадиабатические процессы в конденсированных средах	2

	Применимость адиабатического приближения в конденсированной среде. Численные методы расчета кинетики неадиабатических процессов. Метод surface hopping.	
9	Перенос электрона в конденсированной среде Теоретические методы описания неадиабатических процессов на примере реакции переноса электрона. Координата реакции. Слабый неадиабатический предел. Сильный неадиабатический предел.	4
10	Кинетика реакций, зависимых от движения реагентов Кинетические уравнения для реакций между движущимися реагентами. Многочастичное рассмотрение. Статические реакции.	4
11	Диффузионно-контролируемые реакции Теоретическое описание кинетики диффузионно-контролируемых реакций. Константы скоростей. Дистанционные и контактные реакции. Кинетический и диффузионный контроль. Кинетика контактных геминальных и объемных реакций. Обратимые и многостадийные реакции. Флуктуационные асимптотики. Численные методы моделирования диффузионно-контролируемых реакций.	4

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	18
Подготовка к экзамену.	18

5. Перечень учебной литературы.

- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Т.3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Изд. 6-е, испр. 2008 800 с.: ил. ISBN 978-5-9221-0530-9. Наука, 1974. (1 экз.)

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

- Красноперов Л.Н. Химическая кинетика. Учеб. пособие / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1988 г. 92 с.
- Бакланов А. В. Химическая кинетика: Учеб. пособие / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2009. 100 с. ISBN 978-5-94356-701-8

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

Не используются.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины История используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по

дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется по оценочной системе в виде: заданий для самостоятельного решения. Оценка знаний, умений, навыков и освоения компетенций обучающимися в рамках текущего контроля может проводиться согласно шкале и критериям, представленным ниже.

Оценка за работу в семестре учитывает активность студента на практических занятиях, оцениваемую преподавателем, а также количество сданных задач из заданий для самостоятельного решения. За работу в семестре выставляется оценка “2” («неудовлетворительно») в случае, если сдано менее 100% задач из заданий.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области Основ теории элементарных реакций в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене с учётом результатов текущего контроля успеваемости. Итоговая оценка не может быть выше “3” («удовлетворительно»), если оценка за работу в семестре “2” («неудовлетворительно»). Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию, по билетам, в устной форме. Билет состоит из двух вопросов.

Уровень сформированности компетенций оценивается преподавателем по пятибалльной шкале с учётом критериев (таблица) по результатам ответов на вопросы билета и на дополнительные уточняющие вопросы.

Для получения оценки «отлично» (продвинутый уровень усвоения компетенций) необходимо развёрнуто ответить на два вопроса из билета, аргументированно ответить на дополнительные вопросы.

Для получения оценки «хорошо» (базовый уровень усвоения компетенций) нужно развернуто ответить на два вопроса билета, допускается отсутствие ответов на дополнительные вопросы.

Для получения оценки «удовлетворительно» (пороговый уровень усвоения компетенций) необходимо ответить на два вопроса билета, допускается несколько несущественных ошибок.

Оценка «неудовлетворительно» - уровень усвоения компетенций не сформирован.

Обучающийся, имеющий неудовлетворительные результаты при прохождении промежуточной аттестации, обязан ликвидировать академическую задолженность по дисциплине, согласно установленным факультетом срокам прохождения повторной промежуточной аттестации. Сроки проведения повторной промежуточной аттестации согласовываются с преподавателем и утверждаются распоряжением декана.

Выход об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
------------------------	------------------	---	---------------------------

ПК-2	ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Знать основные уравнения, методы и приближения в теории элементарных физико-химических процессов: уравнения для матрицы плотности, метод переходного комплекса. квантово-классическое, полуклассическое и адиабатическое приближения.	Прием заданий, проведение контрольных работ, экзамен.
	ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Уметь применять усвоенные методы, уравнения и модели для понимания и описания протекания физико-химических процессов в газах и конденсированных средах. Владеть способами интерпретации экспериментальной кинетики химических реакций на основе физических представлений.	Прием заданий, проведение контрольных работ, экзамен.

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<p><u>Решение заданий:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – задание решено правильно, – работа оформлена аккуратно, четкие рисунки и чертежи, – осмыслинность, логичность и аргументированность изложения материала, – точность и корректность применения терминов и понятий. <p>«Сдать задачу» означает объяснение хода её решения и, при необходимости, ответы на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы. В ответах на вопросы преподавателя обучающийся мог допустить непринципиальные неточности.</p> <p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – не менее 95% ответов должны быть правильными. <p><u>Экзамен:</u></p>	<i>Отлично</i>

<ul style="list-style-type: none"> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, отсутствие затруднений в объяснении процессов и явлений, а также при формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий, – наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы. <p>При изложении ответа на вопрос(ы) преподавателя обучающийся мог допустить непринципиальные неточности.</p>	
<p><u>Решение заданий:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – задание решено правильно, – работа оформлена аккуратно, четкие рисунки и чертежи, – осмысленность, логичность и аргументированность изложения материала, наличие затруднений в формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий, при наличии незначительных ошибок. <p>«Сдать задачу» означает объяснение хода её решения и, при необходимости, ответы на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины. Отвечает на дополнительные вопросы.</p> <p>В ответах на вопросы преподавателя обучающийся мог допустить непринципиальные неточности.</p> <p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – не менее 80% ответов должны быть правильными. <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, наличие затруднений в объяснении отдельных процессов и явлений, а также при формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок, – наличие полных ответов на дополнительные вопросы с возможным присутствием ошибок. 	<i>Хорошо</i>
<p><u>Решение заданий:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – задание решено правильно, - работа оформлена неаккуратно – неосознанность и неосновательность выбранных методов анализа, – нет осмысленности в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, – корректность применения терминов и понятий, при наличии незначительных ошибок. <p>«Сдать задачу» означает объяснение хода её решения и, при необходимости, ответы на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины. При ответах на вопросы допускает ошибки.</p> <p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – не менее 50% ответов должны быть правильными. <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – теоретический и фактический материал в слабой степени подкреплен ссылками на научную литературу и источники, – частичное понимание и неполное изложение причинно-следственных связей, 	<i>Удовлетворительно</i>

<ul style="list-style-type: none"> – самостоятельность и осмысленность в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, в объяснении процессов и явлений, а также затруднений при формулировке собственных суждений, – корректность применения терминов и понятий, при наличии незначительных ошибок, – наличие неполных и/или содержащих существенные ошибки ответов на дополнительные вопросы. 	
<p><u>Решение заданий:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – задание решено неправильно, – компилятивное, неосмысленное, нелогичное и неаргументированное изложение материала, – грубые ошибки в применении терминов и понятий, <p>«Сдать задачу» означает объяснение хода её решения и, при необходимости, ответы на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины. На дополнительные вопросы не отвечает.</p>	<i>Неудовлетворительно</i>
<p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – присутствие многочисленных ошибок (более 70% ответов содержат ошибки). <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – фрагментарное и недостаточное представление теоретического и фактического материала, не подкрепленное ссылками на научную литературу и источники, – непонимание причинно-следственных связей, – отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала, – грубые ошибки в применении терминов и понятий, – отсутствие ответов на дополнительные вопросы. 	

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС ВО, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Основы теории химических реакций в конденсированной среде»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного