

**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
ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА**

направление подготовки: **03.03.02 Физика**
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
6	108	32	32		22	18	2			2
Всего 108 часов /3 зачетные единицы из них: - контактная работа 68 часов										
Компетенции ПК-1										

Ответственный за образовательную программу,
д.ф.-м.н., проф.

С.В. Цыбуля

Новосибирск, 2022

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	4
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.	5
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	5
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	10
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	10
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	11
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	11
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	11

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

Цель учебного курса «Химическая кинетика» – обучение слушателей основам науки о скоростях и механизмах химических реакций, и получение ими практических навыков использования полученных знаний в области химической физики и биофизики.

Материал лекционного курса увязывается с результатами современных исследований там, где это позволяет уровень знаний и подготовки студентов. Уделяется особое внимание современным направлениям в науке, связанным с темами курса, например, такими как фемтохимия и связанная с ней область «когерентного контроля» химической динамики при изучении кинетики фотохимических реакций, полимеразная цепная реакция при изучении цепных реакций и др. Во время лекций преподаватель старается использовать элементы диалога с аудиторией, с целью привлечь студентов к активному усвоению материала лекций. Материал семинарских занятий увязан с материалом лекций. При этом часто в течение лекции студентам даются небольшие задания, в которых требуется, используя прослушанный до этого материал, выполнить количественные оценки, результаты которых затем используются в лекции. Во время семинарских занятий также уделяется внимание самостоятельному решению задач студентами. При этом решению задачи предшествует коллективное обсуждение условий задачи и возможных путей решения. Важным элементом работы на семинаре является индивидуальное общение преподавателя со студентами, при котором у преподавателя есть возможность увидеть пробелы в понимании темы данным студентом и помочь ему в преодолении трудностей. При наличии активно взаимодействующих групп студентов приветствуется решение задачи в группе. При возникновении трудностей у большей части студентов, задача разбирается у доски с одним из решивших ее студентов. Отличительной особенностью задач, решаемых на семинарах, является необходимость выполнения количественных оценок кинетических параметров, что позволяет студентам лучше ориентироваться в изучаемом материале, а также важно для их последующей практики в научной лаборатории.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующей профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способность использовать специализированные знания в области физики при построении теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	<p>ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.</p> <p>ПК 1.2 Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области.</p> <p>ПК 1.3 Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p>	<p>Знать основные зависимости (закон действующих масс, уравнение Аррениуса) кинетических характеристик (скорость и константа скорости химической реакции) от условий протекания реакции.</p> <p>Уметь на основе исходных экспериментальных данных определить широко используемые кинетические характеристики (порядок реакции, константа скорости, энергия активации и предэкспонент); решать задачи формальной кинетики для простых и сложных химических процессов, рассчитывать константы скорости с</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		<p>помощью теории переходного состояния.</p> <p>Владеть представлениями о возможных методах измерения кинетических параметров химической реакции; о возможностях современной теории элементарного акта химической реакции для расчета констант скорости элементарных реакций в газовой и конденсированной фазах.</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Химическая кинетика» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.03.02 Физика. Общая и фундаментальная физика. Курс относится к циклу дисциплин, являющихся базовыми для студентов-физиков, специализирующихся на кафедре химической и биологической физики физического факультета Новосибирского Государственного Университета. При изучении курса студенты-физики должны понять, что основные законы и методы науки о скоростях химических процессов в значительной мере 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 и методов математической физики и умение применять эти знания при решении задач. Эти знания необходимы для решения задач формальной кинетики, которые требуют решения 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 моделей, используемых для расчета скорости химических реакций, и других разделов курса «Химическая кинетика». Современные исследования в области химической и биологической физики как правило направлены на изучение механизма и динамики химических и биологических процессов. Поэтому знание основ химической кинетики необходимо при изучении других курсов цикла обучения студентов по специальности химическая и биологическая физика и при прохождении научной практики в лабораториях институтов СО РАН.

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

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
6	108	32	32		22	18	2			2
Всего 108 часов /3 зачетные единицы, из них: - контактная работа 68 часов										
Компетенции ПК-1										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, задачи для самостоятельного решения, консультации, самостоятельная работа студента, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: решение задач из задания для самостоятельного решения

Промежуточная аттестация: экзамен

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **108** академических часов / **3** зачетные единицы:

- занятия лекционного типа – 32 часа;
- практические занятия – 32 часа;
- самостоятельная работа, не включая период сессии – 22 часа;
- самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации (подготовка к экзамену, консультации, экзамен)– 22 часа.

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (лекции, практические занятия, консультации, экзамен) составляет 68 часов.

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётные единицы, 108 академических часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включающая самостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1.	Предмет и основные понятия химической кинетики. Скорость и константа скорости химической реакции. Закон действующих масс. Закон Аррениуса. Связь константы скорости с дифференциальным сечением реакции.	1	6	2	2	2	
2	Формальная кинетика простых реакций.	2	4	2	2		
3	Формальная кинетика сложных реакций. Приближение квазистационарных концентраций.	3	6	2	2	2	
4.	Открытые системы. Реактор идеального перемешивания. Реактор идеального вытеснения.	4	6	2	2	2	
5.	Механизм элементарного химического превращения. Поверхность потенциальной энергии. Расчет константы скорости бимолекулярной реакции в рамках теории столкновений. Модель «линии центров».	5	6	2	2	2	
6.	Мономолекулярные реакции. Квантовый и классический варианты теории Касселя. Зависимость константы скорости от давления. Схема Линдемана. Переходное давление и его оценка. Зависимость «константы скорости в пределе высоких давлений» от температуры.	6	6	2	2	2	
7.	Теория переходного состояния (метод активированного комплекса). Расчет констант скорости мономолекулярной и бимолекулярной реакций. Кинетический изотопный эффект.	7-8	10	4	4	2	
8.	Туннельный эффект в элементарных химических реакциях.	9	4	2	2		
9.	Кинетика реакций в жидкости. Диффузионный и кинетический пределы константы скорости. Диффузионная константа скорости реакции нейтральных частиц и реакции между ионами. Метод	10	6	2	2	2	

	активированного комплекса для жидкофазных реакций.						
10.	Неразветвленные цепные реакции. Кинетика установления стационарного режима протекания неразветвленной цепной реакции. Средняя длина цепи. Скорость цепной реакции. Примеры цепных реакций: реакция хлорирования водорода, разложение озона в атмосфере.	11-12	10	4	4	2	
11.	Разветвленные цепные реакции. Кинетика протекания разветвленной цепной реакции. Предельные явления. Реакция окисления водорода. Полуостров воспламенения. Механизмы разветвления цепей. Полимеразная цепная реакция и ее применение в молекулярной биологии.	13	8	3	3	2	
12.	Фотохимические реакции. Основные и возбужденные электронные состояния молекул. Поглощение света молекулами. Принцип Франка-Кондона. Закон Ламберта-Бера. Основные фотофизические и фотохимические процессы в сложных молекулах. Фемтохимия. Когерентный контроль химической динамики. Многофотонные процессы.	14	8	3	3	2	
13.	Химическая индукция и катализ. Химическая индукция. Катализ. Гомогенный катализ. Химические механизмы гомогенного катализа. Гетерогенный катализ. Адсорбция и десорбция. Особенности кинетики гетерогенных каталитических реакций. Электростатический катализ ионами поверхности.	15-16	6	2	2	2	
	Групповая консультация		2				2
	Самостоятельная подготовка обучающегося к экзамену		18				18
	Экзамен		2				2
Всего			108	32	32	22	22

Программа и основное содержание лекций (32 часа)

1. Предмет и основные понятия химической кинетики. (2 часа)

Определение скорости химической реакции. Константа скорости химической реакции. Порядок реакции. Закон действующих масс и его обоснование в рамках статистической модели. Оценка сверху для константы скорости элементарных реакций первого, второго и третьего порядков в рамках статистической модели. Причины доминирования в природе реакций первого, второго и третьего порядка. Температурная зависимость константы скорости. Закон Аррениуса. Предэкспонент и энергия активации константы скорости. Связь константы скорости бимолекулярной реакции с дифференциальным сечением реакции.

2. Формальная кинетика. (2 часа)

Формальная кинетика простых реакций. Реакции первого, второго и третьего порядков. Метод линейных анаморфоз. Кинетика установления равновесия в обратимой реакции $A \rightleftharpoons B$. Условия пренебрежения обратной реакцией.

3. Формальная кинетика сложных реакций. (2 часа)

Запись кинетических уравнений для сложной реакции. Решение системы кинетических уравнений методом детерминантов. Приближение квазистационарных концентраций. Условия применения и анализ точности приближения квазистационарных концентраций. Лимитирующая стадия сложного химического процесса.

4. Открытые системы. (2 часа)

Реактор идеального перемешивания. Реактор идеального вытеснения. Использование реакторов идеального перемешивания и идеального вытеснения для экспериментального изучения кинетики химических реакций.

Связь констант скорости прямой и обратной реакций через константу равновесия. Вычисление статсумм и константы равновесия. Принцип детального равновесия и его применение для вычисления констант скорости элементарных процессов.

5. Механизм элементарного химического превращения. (2 часа)

Поверхность потенциальной энергии. Активационный барьер и прицельный параметр. Сечение реакции и его зависимость от кинетической энергии относительного движения реагентов. Расчет константы скорости бимолекулярной реакции. Стерический фактор. Оценка в рамках теории столкновений константы скорости тримолекулярной реакции как последовательности бимолекулярных реакций.

6. Мономолекулярные реакции. (2 часа)

Типы мономолекулярных реакций. Квантовый и классический варианты теории Касселя. Зависимость константы скорости мономолекулярной реакции от колебательной энергии и числа колебательных степеней свободы молекулы. Зависимость константы скорости мономолекулярного распада от давления. Схема Линдемана. Переходное давление и его оценка для реакции диссоциации двухатомных молекул. Зависимость положения области перехода от сложности молекулы. Зависимость «константы скорости в пределе высоких давлений» от температуры. Зависимость от давления константы скорости реакции рекомбинации, обратной мономолекулярной реакции распада.

7. Теория переходного состояния (метод активированного комплекса). (4 часа)

Основные предположения теории и вывод выражения для константы скорости. Расчет констант скорости мономолекулярной и бимолекулярной реакций. Сравнение с экспериментом. Нормальные значения предэкспонента константы скорости. Вариация значения предэкспонента в зависимости от строения переходного состояния. Особенности теории переходного состояния с учетом квантовых эффектов. Кинетический изотопный эффект. Термодинамическая формулировка теории переходного состояния.

8. Туннельный эффект в элементарных химических реакциях. (2 часа)

Зависимость вероятности туннелирования от ширины барьера и массы туннелирующей частицы. Характерные «расстояния туннелирования» протона (атома водорода) и электрона. Изотопный эффект в реакциях туннелирования. Кинетика туннельных реакций. Примеры реакций туннелирования в природе.

9. Кинетика реакций в жидкости. (2 часа)

Диффузионный и кинетический пределы константы скорости. Константа скорости диффузионно-контролируемой реакции нейтральных частиц и реакции между ионами. Частота столкновений и частота встреч реагентов в растворе. Время жизни клеточной пары. Эффект клетки. Метод активированного комплекса для жидкофазных реакций. Учет сольватации ионов в рамках теории Дебая-Хюккеля и влияние сольватации на константу скорости бимолекулярной реакции с участием ионов. Солевой эффект.

10. Неразветвленные цепные реакции. (4 часа)

Кинетика установления квазистационарного режима протекания неразветвленной цепной реакции. Скорость цепной реакции. Средняя длина цепи. Примеры цепных реакций: реакция хлорирования водорода, разложение озона в атмосфере с участием фреонов. Кинетика гибели радикалов на поверхности. Константа скорости гибели радикалов на поверхности в диффузионном и кинетическом пределах.

11. Разветвленные цепные реакции. (3 часа)

Кинетика протекания разветвленной цепной реакции. Предельные явления. Реакция окисления водорода. Первый и второй пределы воспламенения. Полуостров воспламенения. Механизмы разветвления цепей. Энергетическое разветвление цепей. Работа атомного реактора как пример цепного разветвленного процесса. Полимеразная цепная реакция и ее применение в молекулярной биологии.

12. Фотохимические реакции. (3 часа)

Основные и возбужденные электронные состояния молекул. Поглощение света молекулами. Закон Ламберта-Бера. Квантовый выход. Константа скорости фотовозбуждения. Принцип Франка-Кондона и его классическое обоснование. Квантово-механический анализ вероятности переходов между электронно-колебательными состояниями молекул под действием излучения. Фактор Франка-Кондона. Основные фотофизические и фотохимические процессы в сложных молекулах. Влияние кинетических параметров элементарных фотоиницируемых процессов на интегральные характеристики фотохимических реакций. Многофотонные процессы. Инфракрасная лазерная фотохимия. Лазерное разделение изотопов. Прогресс во временном разрешении кинетических измерений: от секундомера к аттосекундным лазерным импульсам. Фемтохимия. Измерение внутримолекулярной динамики молекул с фемтосекундным временным разрешением. Когерентный контроль химической динамики: схемы и примеры контроля химической динамики.

13. Химическая индукция и катализ. (2 часа)

Химическая индукция. Фактор индукции. Примеры химической индукции. Катализ. Снижение энергии активации как основной фактор каталитического ускорения реакций. Гомогенный катализ. Химические механизмы гомогенного катализа. Ферментативный катализ. Гетерогенный катализ. Адсорбция и десорбция. Особенности кинетики гетерогенных каталитических реакций.

Использование идеи химического катализа для ускорения реакции слияния ядер.

Программа практических занятий (32 часа)

1. Предмет и основные понятия химической кинетики. (2 часа)

2. Формальная кинетика. (2 часа)

3. Формальная кинетика сложных реакций. (2 часа)

4. Открытые системы. (2 часа)

5. Механизм элементарного химического превращения. (2 часа)

6. Мономолекулярные реакции. (2 часа)

7. Теория переходного состояния (метод активированного комплекса). (4 часа)
8. Туннельный эффект в элементарных химических реакциях. (2 часа)
9. Кинетика реакций в жидкости. (2 часа)
10. Неразветвленные цепные реакции. (4 часа)
11. Разветвленные цепные реакции. (3 часа)
12. Фотохимические реакции. (3 часа)
13. Химическая индукция и катализ. (2 часа)

Самостоятельная работа студентов (40 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	22
Подготовка к экзамену (зачету/дифференцированному зачету/)	18

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература

1. Бакланов А.В., Химическая кинетика. Учебное пособие. Новосибирск, 2009.
2. Красноперов Л.Н., Химическая кинетика. Учебное пособие. Новосибирск, 1988.

5.2. Дополнительная литература

1. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е., Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.
2. Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М., Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983.

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Бакланов А.В., Химическая кинетика. Учебное пособие. Новосибирск, 2009.
2. Красноперов Л.Н., Химическая кинетика. Учебное пособие. Новосибирск, 1988.

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.

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

Для реализации дисциплины «Химическая кинетика» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации;
2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;
3. Лаборатории;
4. Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования.

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: контрольных работ, 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 результаты решения задач из двух больших семестровых заданий и результаты трёх контрольных работ.

Семестровые задания студенты сдают в форме беседы с преподавателем в специально отведенное время (прием заданий). За сданные вовремя задачи из семестрового задания начисляются баллы:

первое семестровое задание – максимум 30 баллов;

второе семестровое задание – максимум 40 баллов.

Задача считается сданной вовремя, если она сдана не позже даты, указанной в задании. За не сданные вовремя задачи баллы не начисляются. Неспособность студента быстро ответить на технические вопросы по представленному решению считается попыткой сдать списанную задачу. В этом случае баллы за задачу не начисляются.

К полученным за задания баллам добавляются баллы, полученные на контрольных работах (суммарно максимум 30 баллов за три контрольные работы). На решение каждой из контрольных работ дается короткое время (от 15 до 20 минут) в начале занятия. За отведенное время студент может выполнить работу только при хорошем владении материалом.

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 Химической кинетики в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене с учётом результатов текущего контроля успеваемости. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию, по билетам, в устной форме.

Билет состоит из двух вопросов. Если по результатам контрольных работ и заданий в течение семестра набрано менее 40 баллов, необходимо дополнительно правильно решить две задачи за фиксированное время. Если в течение семестра набрано более 40, но менее 70 баллов, необходимо дополнительно правильно решить одну задачу. Если в течение семестра набрано более 70 баллов, дополнительные задачи решать не нужно. При решении задачи допускаются ошибки, не влияющие на общий способ предлагаемого решения.

Уровень сформированности компетенций оценивается преподавателем по пятибалльной шкале с учётом критериев (таблица 2) по результатам решения задач, ответов на вопросы билета и на дополнительные уточняющие вопросы.

Для получения оценки «отлично» (продвинутый уровень освоения компетенций) необходимо либо получить не менее 95 баллов в течение семестра по результатам контрольных работ и заданий, либо продемонстрировать отличное знание по двум вопросам из экзаменационного билета, а также по дополнительным вопросам из курса.

Для получения оценки «хорошо» (базовый уровень освоения компетенций) нужно ответить на оба вопроса билета, допускается несколько несущественных ошибок. Необходимо также ответить на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины.

Для получения оценки «удовлетворительно» (пороговый уровень освоения компетенций) необходимо ответить хотя бы на один вопрос в билете по теории. Необходимо также ответить на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для изученной дисциплины.

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.

Вывод 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

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.	Знать основные зависимости (закон действующих масс, уравнение Аррениуса) кинетических характеристик (скорость и константа скорости химической реакции) от условий протекания реакции.	Проведение контрольных работ, экзамен.
ПК 1.2 Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области	Уметь на основе исходных экспериментальных данных определить широко используемые кинетические характеристики (порядок реакции, константа скорости, энергия активации и предэкспонент); решать задачи формальной кинетики для простых и сложных химических процессов, рассчитывать константы скорости с помощью теории переходного состояния.	Проведение контрольных работ, экзамен.
ПК 1.3 Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	Владеть представлениями о возможных методах измерения кинетических параметров химической реакции; о возможностях современной теории элементарного акта химической реакции для расчета констант скорости элементарных реакций в газовой и конденсированной фазах.	Проведение контрольных работ, экзамен.

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Химическая кинетика».

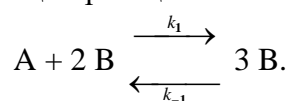
Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК 1.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры некоторых типовых заданий для самостоятельного решения для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся.

1. Записать кинетические уравнения для концентраций веществ А и В, участвующих в следующих реакциях:

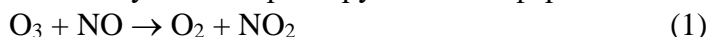


Записать уравнение материального баланса для этой обратимой реакции, если известны начальные условия:

в момент $t=0$ $[A]=[A]_0$ и $[B]=[B]_0$.

Чему равны суммарный порядок прямой (v_1) и обратной (v_{-1}) реакций, если известно, что указанные реакции-элементарные?

2. Молекула озона реагирует в атмосфере Земли с окислами азота в соответствии с уравнениями:



Чему равно отношение скоростей этих процессов в атмосфере при $T=300^\circ\text{K}$, если концентрации NO и NO_2 можно считать равными, а значения аррениусовских параметров константы скорости (энергия активации E и предэкспонент A) для этих реакций равны:

$$A_1 = 2 \times 10^{-12} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}; \quad E_1 = 2780 \frac{\text{кал}}{\text{моль}};$$

$$A_2 = 8.4 \times 10^7 \text{ л моль}^{-1} \text{ с}^{-1}; \quad E_2 = 5000 \frac{\text{кал}}{\text{моль}}.$$

3. Рассчитать концентрацию молекул углекислого газа в основном колебательном состоянии $[\text{CO}_2]_{\text{осн}}$ при $T=1000^\circ\text{K}$. Молекула CO_2 -линейная. Ее частоты колебаний равны: $\bar{\nu}_1=1351 \text{ см}^{-1}$, $\bar{\nu}_2=2396 \text{ см}^{-1}$, $\bar{\nu}_3=\bar{\nu}_4=672 \text{ см}^{-1}$. Полная концентрация молекул углекислого газа равна $[\text{CO}_2]=10^{16} \text{ 1/см}^3$.

4. Оценить константу скорости диссоциации $k(E^*)$ колебательно возбужденных молекул воды $\text{H}_2\text{O}(E^*) \rightarrow \text{H} + \text{OH}$ по классической теории Касселя. Энергия возбуждения молекул $E^*=42000 \text{ см}^{-1}$.

Известно, что молекула воды-нелинейная, а энергия разрыва связи O-H в молекуле воды равна $D_0^0(\text{O-H}) \approx 41000 \text{ см}^{-1}$.

5. Одним из каналов гибели молекул озона O_3 в атмосфере является их диссоциативная адсорбция на частицах аэрозоля A



Оцените константу скорости этого процесса, если известно, что скорость этой реакции лимитируется диффузией. Радиус молекулы озона положить равным $r_{\text{O}_3}=2 \text{ \AA}$, а арозольных частиц $r_A=100 \text{ микрон}$. Коэффициент диффузии молекул озона равен $D_{\text{O}_3}=0.2 \text{ см}^2/\text{с}$.

Примерные вопросы на экзамен

1. Стехиометрическое уравнение химической реакции. Скорость химической реакции. Закон действующих масс. Константа скорости реакции. Температурная зависимость константы скорости. Энергия активации и предэкспонент константы скорости.
2. Кинетический изотопный эффект (КИЭ). Вклад поступательных, вращательных и колебательных статсумм. Роль энергии нулевых колебаний. Оценка величины КИЭ.

Пример экзаменационного билета

<p>МИНОБРНАУКИ РОССИИ</p> <p>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)</p> <p>Физический факультет</p>
<p>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</p>

1.Стехиометрическое уравнение химической реакции. Скорость химической реакции. Закон действующих масс. Константа скорости реакции. Температурная зависимость константы скорости. Энергия активации и предэкспонент константы скорости (на компетенцию ПК-1).

2. Кинетический изотопный эффект (КИЭ). Вклад поступательных, вращательных и колебательных статусумм. Роль энергии нулевых колебаний. Оценка величины КИЭ (на компетенцию ПК-2).

Составитель _____ / Бакланов А.В. /
(подпись)

« ____ » _____ 20 ____ г.

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

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Химическая кинетика»
по направлению подготовки 03.03.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

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