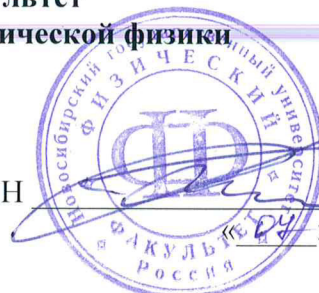


**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»  
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет**  
**Кафедра химической и биологической физики**



академик РАН

УТВЕРЖДАЮ  
Декан ФФ  
А. Е. Бондарь  
2020 г.

**Рабочая программа дисциплины**

**ОСНОВЫ ТЕОРИИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ РЕАКЦИЙ**

направление подготовки: **03.04.02 Физика, Курс 1, семестр 2**  
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      |
| 2  | 72          | 32   |                      |                      | 18   | 18  | 2  |       |                          | 2       |
| Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них:<br>- контактная работа 36 часов |             |  |                      |                      |  |   |  |       |                          |         |
| Компетенции ПК-1, ПК-2   |             |  |                      |                      |  |   |  |       |                          |         |

Разработчик:  
д.ф.-м.н.

  
К.Л. Иванов

Зав. кафедрой ХиБФ ФФ НГУ  
д.ф.-м.н., проф.

  
С. А. Дзюба

Руководитель программы  
д.ф.-м.н.

  
И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2020

|   |    |
|---|----|
| <b>Содержание</b>   |    |
| <b>Аннотация</b> .....  | 3  |
| 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы. ....   | 4  |
| 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  |
| 5. Перечень учебной литературы. ....  | 13 |
| 6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся. ....  | 13 |
| 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины. ....  | 13 |
| 8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине. ....   | 14 |
| 9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине. ....  | 14 |
| 10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине. ....  | 14 |

## Аннотация

### к рабочей программе дисциплины «Основы теории элементарных реакций»

Направление: **03.04.02 Физика**

### Направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Программа дисциплины «Основы теории элементарных реакций» составлена в соответствии с требованиями СУОС к уровню магистратуры по направлению подготовки **03.04.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная физика»**, а также задачами, стоящими перед Новосибирским государственным университетом по реализации Программы развития НГУ. Дисциплина реализуется на физическом факультете Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ) кафедрой химической и биологической физики в качестве дисциплины по выбору. Дисциплина изучается студентами первого курса магистратуры физического факультета в весеннем семестре.

Цель курса – знакомство с базовыми представлениями, подходами и моделями современной теории элементарных физико-химических процессов и их применением для рассмотрения различных типов химических реакций в газах и конденсированных средах.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующих профессиональных компетенций:

**ПК-1 способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта**

**ПК-2 способность свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.**

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **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.

Курс рассчитан на один семестр (2-й). Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, 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 **72** академических часа / **2** зачетные единицы.

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

Цель учебного курса «Основы теории элементарных реакций» – 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.

Профессиональная компетенция ПК-1 - способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики (*в части основ теории элементарных реакций*) и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

Профессиональная компетенция ПК-2 - способность свободно владеть разделами физики (*в части основ теории элементарных реакций*), необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.

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, например, проявлением немарковских эффектов в кинетике реакций в растворах. 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.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **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 (ПК-1.1).
- **Уметь:** применять усвоенные методы, уравнения и модели для понимания и описания протекания физико-химических процессов в газах и конденсированных средах (ПК-1.2).
- **Владеть:** способами интерпретации экспериментальной кинетики химических реакций на основе физических представлений (ПК-2.3).

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Основы теории элементарных реакций» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.04.02 Физика. Общая и фундаментальная 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 общезначимых 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.**

| 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      |
| 2  | 72          | 32   |                      |                      | 18   | 18  | 2  |       |                          | 2       |
| Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них:<br>- контактная работа 36 часов |             |  |                      |                      |  |   |  |       |                          |         |
| Компетенции ПК-1, ПК-2   |             |  |                      |                      |  |   |  |       |                          |         |

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, 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 **72** академических часа / **2** зачетные единицы.

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачётные единицы, 72 академических часа.

| № п/п | Раздел дисциплины | Неделя семестра | Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах) |                 |                      |                | Консультации перед экзаменом (часов) | Промежуточная аттестация (в период сессии) (в часах) |
|-------|-------------------|-----------------|--|-----------------|----------------------|----------------|--------------------------------------|--|
|       |                   |                 | Всего  | Аудиторные часы | Сам. работа во время | Сам. работа во |                                      |  |

|    |   |   |   | Лек-<br>ции | Прак-<br>тиче-<br>ские<br>заня-<br>тия | занятий (не<br>включая<br>период<br>сессии | время<br>промежу-<br>точной<br>аттестаци<br>и |   |    |
|----|---|---|---|-------------|--|--|---|---|----|
| 1  | 2   | 3 | 4 | 5           | 6                                      | 7  | 8   | 9 | 10 |
| 1. | <b>Основы кван-<br/>тово-<br/>статистическо-<br/>го описания</b><br>Матрица<br>плотности.<br>Матричное<br>представление<br>матрицы<br>плотности.<br>Смешанное<br>представление<br>для матрицы<br>плотности.<br>Чистые и<br>смешанные<br>состояния.  | 1 | 4 | 2           |  | 2  |   |   |    |
| 2  | <b>Квантово-<br/>классическое<br/>рассмотрение.</b><br>Соответствие<br>Вейля.<br>Интегральное<br>представление<br>оператора<br>плотности,<br>средние<br>значения<br>физических<br>величин и<br>функции<br>Вигнера.<br>Основное<br>уравнение в $pq$ -<br>пространстве.<br>Квантово-<br>классическое<br>приближение.<br>Полуклассичес-<br>кое<br>приближение. | 2 | 4 | 2           |  | 2  |   |   |    |
| 3  | <b>Адиабатическое<br/>приближение.</b><br>Разделение<br>движений  | 3 | 4 | 2           |  | 2  |   |   |    |

|    |  |   |   |   |  |   |  |  |  |
|----|--|---|---|---|--|---|--|--|--|
|    | <p>быстрой и медленной подсистем.<br/> Базисные функции адиабатического приближения.<br/> Адиабатическая классификация электронных состояний.<br/> Пересечение адиабатических термов.<br/> Адиабатические термы двухатомной молекулы.<br/> Поверхность потенциальной энергии системы реагирующих атомов.</p>   |   |   |   |  |   |  |  |  |
| 4. | <p><b>Неадиабатическая связь.</b><br/> Критерии применимости адиабатического приближения.<br/> Классификация неадиабатических переходов.<br/> Вероятность неадиабатических переходов<br/> Переходы между пересекающимися адиабатическим и термами.<br/> Предиссоциация Столкновения второго рода.<br/> Неадиабатические переходы при наличии квазипересечения адиабатических термов.<br/> Адиабатические термы..</p> | 4 | 6 | 4 |  | 2 |  |  |  |

|    |   |     |   |   |  |   |  |  |  |
|----|---|-----|---|---|--|---|--|--|--|
| 5. | <b>Полуклассическая теория столкновений.</b><br>Описание столкновения двух частиц. Сечения и константа скорости реакции. Критерий бинарности и равновесности. Сечения некоторых процессов. Простейшие модели химических реакций. Элементы квантовой теории столкновений. Метод переходного комплекса.   | 5   | 6 | 4 |  | 2 |  |  |  |
| 6. | <b>Термическая релаксация.</b><br>Неравновесные и квазиравновесные химические реакции. Кинетические уравнения, описывающие обмен энергией при столкновениях. Модель слабых и сильных столкновений. Ступенчатое возбуждение. $T$ - $T$ и $T$ - $R$ – обмен. $T$ - $V$ и $V$ - $V$ -обмен. Межмолекулярный и внутримолекулярный перенос энергии электронного возбуждения. | 6   | 6 | 4 |  | 2 |  |  |  |
| 7. | <b>Мономолекулярные реакции.</b>  | 7-8 | 6 | 4 |  | 2 |  |  |  |



|     |   |       |   |   |  |   |  |  |  |
|-----|---|-------|---|---|--|---|--|--|--|
|     | Активация и дезактивация молекул. Схема Линденмана. Модификация подхода. Теория Слейтера. Теории Хиншельвуда и Касселя. Теория РРKM. Неадиабатическое реакции. Термический распад двухатомной молекулы  |       |   |   |  |   |  |  |  |
| 8.  | <b>Бимолекулярные реакции.</b> Реакции рекомбинации атомов и радикалов и реакции присоединения. Обменные реакции. Сечения обменных реакций.   | 9     | 6 | 4 |  | 2 |  |  |  |
| 9.  | <b>Особенности протекания реакций в конденсированных средах. Теория элементарного акта.</b> Структура теории. Элементарный акт переноса энергии. Элементарный акт неадиабатического переноса электрона в полярных жидкостях. Задача Крамерса. | 10-11 | 4 | 2 |  | 2 |  |  |  |
| 10. | <b>Основы теории</b>  | 12-13 | 2 | 2 |  |   |  |  |  |

|     |  |       |    |   |  |  |    |   |
|-----|--|-------|----|---|--|--|----|---|
|     | <b>реакций, зависящих от движения реагентов.</b><br>Стохастические процессы.<br>Стохастическое усреднение отклика.<br>Необратимые реакции<br>$A+B \Rightarrow C$<br>изолированных пар реагентов (геминальные реакции).<br>Объёмные необратимые псевдомономолекулярные реакции.<br>Реакции неизолерованных пар реагентов. |       |    |   |  |  |    |   |
| 11. | <b>Кинетика реакций, зависящих от движения реагентов.</b><br>Общие уравнения.<br>Статические реакции.<br>Квазистационарные реакции.<br>Контактные реакции.<br>Кинематическое приближение в теории контактных реакций.<br>Кинетические схемы протекания бимолекулярных квазистационарных контактных реакций               | 14-16 | 2  | 2 |  |  |    |   |
|     | Групповая консультация   |       | 2  |   |  |  |    | 2 |
|     | Самостоятельная работа в период  |       | 18 |   |  |  | 18 |   |

|  |                                       |  |           |           |  |           |           |          |          |
|--|---------------------------------------|--|-----------|-----------|--|-----------|-----------|----------|----------|
|  | подготовки к промежуточной аттестации |  |           |           |  |           |           |          |          |
|  | Экзамен                               |  | 2         |           |  |           |           |          | 2        |
|  | <b>Всего</b>                          |  | <b>72</b> | <b>32</b> |  | <b>18</b> | <b>18</b> | <b>2</b> | <b>2</b> |

## Программа и основное содержание лекций (32 часа)

### 1. Основы квантово-статистического описания (2 часа)

Замкнутые и открытые системы. Волновая функция и матрица плотности. Замкнутое уравнение для матрицы плотности и возможность описания незамкнутых квантовых систем. Матричное (в дискретном базисе ортонормированных функций) представление матрицы плотности. Матричное определение среднего от физической величины. Матричное уравнение. Основные свойства матрицы плотности. Смешанное (координатно-матричное) представление для матрицы плотности. Чистые и смешанные состояния квантовой системы. Критерий чистоты состояний.

### 2. Квантово-классическое рассмотрение. (2 часа)

Классические и квантовые степени свободы. Прямое соответствие Вейля и цель его введения. Важные свойства операторов. След от произведения операторов в  $pq$ -представлении. Обратное преобразование Вейля для оператора плотности (матрицы плотности) и произвольных операторов, средние значения физических величин в  $pq$ -представлении и функции Вигнера. Основное уравнение в  $pq$ -пространстве в интегральной и дифференциальной формах. Квантово-классическое приближение. Пример двухуровневой системы. Полуклассическое приближение и его связь с квантово-классическим приближением.

### 3. Адиабатическое приближение. (2 часа)

Разделение движений быстрой и медленной подсистем. Смысл вида волновой функции адиабатического приближения. Квантовые уравнения в адиабатическом приближении. Адиабатические термы. Адиабатические волновые функции в полуклассическом приближении. Базисные функции адиабатического приближения: базис адиабатического приближения, грубого адиабатического приближения и нулевого адиабатического приближения. Адиабатическая классификация электронных состояний атомов, двухатомных и многоатомных молекул. Возможность пересечения адиабатических термов. Адиабатические термы двухатомной молекулы. Электронные, колебательные и вращательные уровни энергии и их величины. Учёт спиновых состояний. Поверхность потенциальной энергии системы реагирующих атомов. Система трёх атомов. Понятия пути, профиля пути и теплового эффекта реакции. Типичные типы поверхностей потенциальной энергии.

### 4. Неадиабатическая связь. (4 часа)

Общие уравнения в базисе адиабатических состояний. Диагональные и недиагональные элементы неадиабатической связи. Критерии применимости адиабатического приближения, параметр Мессе. Классификация неадиабатических переходов. Вероятность слабых переходов при квантовом и полуклассическом способе описания движения медленной подсистемы. Слабые неадиабатические переходы между пересекающимися адиабатическими термами. Преддиссоциация. Столкновения второго рода. Сильные неадиабатические переходы в полуклассическом приближении (задача Зенера). Область неадиабатичности. Критерии линейной аппроксимации термов. Неадиабатические переходы при наличии квазипересечения адиабатических термов. Адиабатические термы.

### 5. Полуклассическая теория столкновений. (4 часа)

Описание столкновения двух частиц. Система столкновения. Классическое упругое рассеяние. Сечение, эффективное сечение и константа скорости реакции. Критерий бинарности и равновесности. Сечения некоторых процессов: столкновение жёстких шаров, сечение захвата, поправка Сезерленда. Простейшие модели химических реакций: модель линии центров, ступенчатая модель, модель неадиабатических переходов. Элементы квантовой теории неупругого рас-

сеяния. Каналы двухфрагментарного рассеяния и каналы реакции. Амплитуды и сечения неупругих каналов рассеяния. Инвариантность относительно обращения времени и кинетический принцип детального баланса. Метод переходного комплекса и условия его применимости. Энергия активации, статистические суммы и трансмиссионный коэффициент.

#### **6. Термическая релаксация. (4 часа)**

Неравновесные и квазиравновесные химические реакции. Кинетические уравнения, описывающие обмен энергией при столкновениях. Релаксация в “тепловой ванне”. Модель слабых столкновений и кинетика релаксации средней энергии. Модель сильных столкновений. Кинетика мономолекулярной реакции в приближении сильных столкновений. Искажение начального равновесного распределения. Ступенчатое возбуждение. Поступательно-поступательный и поступательно-вращательный обмен энергией (Т-Т и Т-Р – обмен). Поступательно-колебательный обмен (Т-V – обмен) в рамках полуэмпирической одномерной модели. Кинетика релаксации средней энергии. Формула Ландау-Теллера. Колебательно-колебательный обмен (V-V-обмен). Межмолекулярный и внутримолекулярный перенос энергии электронного возбуждения. Электронно-колебательные (вибронные) переходы.

#### **7. Мономолекулярные реакции. (4 часа)**

Активация и дезактивация молекул. Схема Линденмана и её недостатки. Модификация подхода. Понятие активированной молекулы. Динамические и статистические теории. Динамическая теория Слейтера. Статистические теории Хиншельвуда и Касселя. Активные, неактивные и адиабатические степени свободы. Теория РРКМ. Неадиабатические реакции. Термический распад двухатомной молекулы.

#### **8. Бимолекулярные реакции. (4 часа)**

Реакции рекомбинации атомов и радикалов и реакции присоединения. Ударная и радиационная стабилизации. Механизмы передачи энергии, рекомбинации через образование комплекса и рекомбинации через образование стабилизированного комплекса. Вероятность радиационной стабилизации. Обменные реакции и их классы. Классификация трехцентровых обменных реакций. Сечения обменных реакций, текущих через образование долгоживущего комплекса и прямых реакций срыва.

#### **9. Особенности протекания реакций в конденсированных средах. Теория элементарного акта. (2 часа)**

Влияние среды на протекание химических реакций в конденсированных средах. Сольватационный и клеточный эффекты. Стохастическое движение в клетке. Понятие встречи реагентов. Структура теории: разделение на теорию элементарного акта и теорию реакций, зависимых от движения реагентов. Элементарный акт переноса энергии: динамический и стохастический обратимый и необратимый переносы. Элементарный акт неадиабатического переноса электрона в полярных жидкостях. Задача Крамерса.

#### **10. Основы теории реакций, зависимых от движения реагентов. (2 часа)**

Стохастические процессы. Многомерная вероятность. Марковские процессы. Двухмерная условная вероятность. Нормировка и соотношение Энштейна-Смолуховского. Условие стационарности. Стационарный марковский процесс. Стохастическое усреднение отклика. Общие кинетические уравнения для необратимых реакций  $A+B \Rightarrow C+V$  изолированных пар реагентов (геминальные реакции) и объёмных необратимых псевдомономолекулярных реакций. Вероятность реакции и вероятность выживания. Немарковская константа скорости. Кинетические уравнения для реакции неизоллированных пар реагентов. Неоднородный источник начальных корреляций. Временные стадии протекания реакций неизоллированных пар реагентов.

#### **11. Кинетика реакций, зависимых от движения реагентов. (2 часа)**

Общие уравнения для реакций между сферическими частицами с изотропной реакционной способностью. Статические реакции. Кинетика резонансных и обменных статических реакций. Квазистационарные резонансные и обменные реакции. Константы скоростей. Дистанционные и контактные реакции. Среднее время прохождения реакционного слоя. Характерное время встречи (полное характерное время пребывания в клетке). Полное время контактов при встрече. Контактная идеализация. Кинетический и диффузионный контроль. Кинетика контактных ге-

минальных и объемных реакций. Временные стадии протекания реакций. Кинематическое приближение в теории контактных реакций. Кинетические схемы протекания бимолекулярных квазистационарных контактных реакций.

### 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.

### 5.1. Основная литература

1. Докторов А.Б., Иванов К.Л. Основы теории элементарных реакций. Новосибирск, НГУ. 2017.

### 5.2. Дополнительная литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
2. Тейлор Дж. Теория рассеяния. М.: Мир, 1975.

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Докторов А.Б., Иванов К.Л. Основы теории элементарных реакций. Новосибирск, НГУ. 2017.

## 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 заявленные компетенции ПК-1 и ПК-2 сформированы 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 развернуто 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.

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.

### **Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Основы теории элементарных реакций».**

| 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. | Минимально допустимый уровень знаний. Допускается значительное количество негрубых ошибок. | Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/ несущественных ошибок. Не отве- | Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные |

|                                   |        |  |   |  |   |
|-----------------------------------|--------|--|---|--|---|
|                                   |        |  |   | чает на дополнительные вопросы.  | 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 задания 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 2.3 | 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. |

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

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

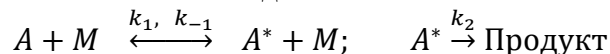
1) Получите выражение для константы скорости газофазной реакции в рамках ступенчатой модели, т.е. вероятность рассеяния равна:

$$P_{if} = \begin{cases} p(u), & \rho \leq R_0; \\ 0, & \rho > 0; \end{cases} \quad p(u) = \begin{cases} p_0, & u \geq u_0 \\ 0, & u < u_0 \end{cases}$$

Указание: усреднение по скоростям молекул в газе проводить, пользуясь распределением Максвелла.

2) Вычислите сечение захвата  $\sigma_c(E)$  и эффективное сечение захвата  $\sigma_{c,eff}$  для потенциала с дальнедействующей частью  $U(R) = -\alpha/R^n$ .

3) Элементарные процессы, протекающие при мономолекулярном распаде двухатомных молекул  $A$ , могут быть представлены схемой Линдемана

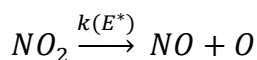


включающей процессы столкновительной активации (дезактивации) с участием буферного газа  $M$  и собственно распада молекул  $A$ , возбужденных выше активационного барьера. В рамках этой модели, для распада молекулярного брома ( $A=Br_2$ ) в буферном газе гелии ( $M=He$ ) требуется найти, насколько отличается значение константы скорости ( $k_{uni}$ ) термического распада ( $T = 700$  К) молекулярного брома  $Br_2 \xrightarrow{k_{uni}} 2Br$  при давлении буферного газа гелия  $P_{He} = 1$  атм от ее значения в пределе высокого давления ( $k_\infty$ ). Предполагается, что дезактивирующие столкновения являются "сильными" и характеризуются газокинетическим фактором двойных



соударений  $k_{-1} \approx Z_0 = 5 \times 10^{-10} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ . Предполагается, что молекула  $\text{Br}_2$  при возбуждении выше барьера диссоциации распадается с частотой колебаний, равной  $10^{13} \text{ с}^{-1}$ .

4) Используя квантовый и классический варианты теории Касселя оценить константу скорости мономолекулярного распада молекул двуокиси азота, имеющих фиксированную колебательную энергию  $E^*$ .



Величина активационного барьера этой реакции составляет  $E_0 \approx 72 \text{ ккал/моль} \approx 25000 \text{ см}^{-1}$ . Молекула  $\text{NO}_2$  – нелинейная. Волновые числа колебаний молекулы положить одинаковыми и равными  $\bar{\nu}_i = \bar{\nu} = 1000 \text{ см}^{-1}$ . Рассмотреть два варианта, при которых энергия возбуждения  $E^*$  молекулы превышает активационный барьер  $E_0$  на 1000 и 5000  $\text{см}^{-1}$ . Фактор вырождения пути реакции равен  $L^\ddagger = 2$ .

5) Получите выражения для  $k^*(E)$  в рамках динамической теории Слэйтера. Данная модель предполагает, что реакция происходит, когда выбранная приведенная координата  $q$  достигает величины  $q_0$ . Считайте, что система состоит из  $n$  гармонических осцилляторов с частотами  $\omega_i$ .

Ответ выразите через параметры  $E_0 = q_0^2/\alpha^2$  и  $\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\sum \alpha_i^2 \omega_i^2 / \alpha^2}$ , где  $\alpha^2 = \sum \alpha_i^2$ ,  $\alpha_i$  – коэффициенты разложения движения по координате  $q$  по нормальным координатам.

6) Получите выражение для константы скорости рекомбинации  $A + B \rightarrow (AB)$ , протекающей по механизмам (а)  $A + M \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} (AM)^*$ ,  $(AM)^* + B \xrightarrow{k_3} AB + M$  и (б)  $A + M \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} (AM)^*$ ,  $(AM)^* + M \xrightleftharpoons[k_2']{k_1'} AM + M$ ,  $AM + B \xrightarrow{k_3} AB + M$ . Указание: для промежуточных столкновительных комплексов можно пользоваться приближением квазистационарных концентраций.

7) Для полимерной молекулы, состоящей из  $N$  одинаковых звеньев длины  $b$  вычислите среднее расстояние между ее концами и ее «радиус инерции». Указание: полимерную молекулу считать «случайным клубком».

### Вопросы на экзамен

*На проверку сформированности компетенции ПК-1:*

1. Матрица плотности, её свойства и различные представления. Чистые и смешанные состояния.
2. Квантово-классическое описание квантовых систем. Основные представления и уравнения.
3. Адиабатическое приближение. Базисные функции и классификация адиабатических электронных термов, их пересечение.
4. Адиабатические термы двухатомной молекулы.
5. Поверхности потенциальной энергии реагирующих систем.
6. Неадиабатическая связь. Критерий адиабатичности. Вероятность неадиабатических переходов между пересекающимися и квазипересекающимися адиабатическими термами.
7. Полуклассическая теория столкновений, сечение и константа скорости реакций.
8. Сечения некоторых процессов и простейшие модели химических реакций.
9. Элементы квантовой теории неупругого рассеяния. Обращение времени и кинетический принцип детального баланса. Метод переходного комплекса.
10. Термическая релаксация. Неравновесные и квазиравновесные химические реакции. Кинетические уравнения энергетического обмена, модели слабых и сильных столкновений.
11. Типы процессов обмена энергией (Т-Т-, Т-Р-, Т-V-, и V-V-обмен). Перенос энергии электронного возбуждения.

*На проверку сформированности компетенции ПК-2:*

12. Адиабатические мономолекулярные реакции. Схема Линденмана и модификация подхода (теории Слэйтера, Хиншельвуда и Касселя).
13. Теория РРКМ. Неадиабатические мономолекулярные реакции.



**Лист актуализации фонда оценочных средств  
по дисциплине «Основы теории элементарных реакций»  
по направлению подготовки 03.04.02 Физика  
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

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