

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный  
университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук

---



СОГЛАСОВАНО

Декан ФЕН

Резников В. А.

Подпись

5 октября 2020 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

### **Современные методы химической кинетики**

Направление подготовки

направление подготовки: 04.04.01 Химия  
направленность (профиль): Химия

Форма обучения: очная

Разработчик:

д.х.н., доцент Чесноков Е.Н.

Зав. кафедрой

д.х.н., проф. Пармон В.Н.

Руководитель программы:

чл.-корр. РАН, проф. Нетесов С.В.

Новосибирск, 2020

## Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы .....	3
3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося .....	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного 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 .....	6
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, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<b>М-ОПК-1.</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	<b>М-ОПК-1.2.</b> Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук	<i>умеет</i> искать информацию по химическому составу и свойствам волны горения в научных публикациях с использованием БД; - <i>умеет</i> анализировать, обобщать и систематизировать литературные данные
	<b>М-ОПК-1.3.</b> Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	- <i>знает</i> современные расчетно-теоретические методы химии для решения задач химической кинетики; - <i>умеет</i> применять современные расчетно-теоретические методы химии для решения задач кинетики процессов горения
<b>М-ОПК-2.</b> Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	<b>М-ОПК-2.2.</b> Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	- <i>знает</i> теоретические основы химической кинетики ; - <i>умеет</i> формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных
<b>М-ОПК-3.</b> Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	<b>М-ОПК-3.1.</b> Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля	- <i>знает</i> основные принципы работы компьютера, сети и используемых программ; - <i>умеет</i> использовать интернет для поиска необходимых данных; - <i>умеет</i> систематизировать и обрабатывать информацию
	<b>М-ОПК-3.2.</b> Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	- <i>знает</i> стандартные и оригинальные программные продукты, применяемые для моделирования кинетических процессов; - <i>умеет</i> использует стандартные и оригинальные программные продукты, применяемые для моделирования кинетических процессов.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), изучение которых необходимо для освоения дисциплины *Современные методы химической кинетики*:

- Физическая химия
- Основы тепло-массо обмена
- Химическая кинетика

Дисциплины и практики, для изучения которых необходимо освоение дисциплины *Современные методы химической кинетики*:

- Охрана окружающей среды
- Химические основы жизни
- Физические методы установления строения органических соединений
- Избранные главы химии элементоорганических соединений
- Вычислительные методы в химии
- Стереохимия органических соединений

А также специальные курсы профилей «аналитическая химия», «физическая химия», «кинетика и катализ».

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

Трудоемкость дисциплины – 2 зачетные единицы (72 ч)

Форма аттестации: 1 семестр – экзамен

№	Вид деятельности	Семестр
		1
1	Лекции, ч	34
2	Практические занятия, ч	0
3	Лабораторные занятия, ч	0
4	Занятия в контактной форме, ч	38
5	из них аудиторных занятий, ч	34
6	групповая работа с преподавателем, ч	-
7	консультаций, час.	2
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	34
10	Всего, ч	72

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

*1 семестр*

Лекции (34 ч)

Наименование темы и их содержание	Объем, час
<b>Тема 1. Оптические методы регистрации промежуточных частиц.</b> Электронные спектры их характеристика. Спектры молекул в газовой фазе. Спектры с разрешенной вращательной структурой. Пример – спектр радикала ОН. Сплошные спектры. Пример спектры галогенов, озона. Электронные спектры в конденсированной фазе.	2
<b>Тема 2. Люминесцентные методы регистрации промежуточных частиц.</b> Метод ЛИФ (Лазерноиндуцированной флюоресценции). Пример – регистрация радикалов ОН. Чувствительность метода. Применения для исследования процессов горения. Техника получения изображений. Измерения концентраций радикалов. Измерения температур. Роль релаксации.	4
<b>Тема 3. Методы регистрации промежуточных частиц, использующие их колебательные спектры.</b> Ширины линий в ИК спектрах. Доплеровская ширина линии. Ударное уширение. Поглощение излучения диодных лазеров. Пример регистрация SiF <sub>2</sub> диод-	4

ными лазерами.	
<b>Тема 4. Фотоионизация атомов и молекул.</b> Метод REMPI ( <u>Resonance enhanced multiphoton ionization</u> )	2
<b>Тема 5. Методы радиоспектроскопии.</b> Импульсный ЭПР.	4
<b>Тема 6. Способы увеличения чувствительности детектирования малых поглощений излучения.</b> Многоходовые оптические системы. Использование внутривибраторного поглощения. Cavity ring down spectroscopy. Модуляционные методы. Метод лазерного магнитного резонанса.	4
<b>Тема 7. Импульсная постановка эксперимента в химической кинетике.</b> Импульсная постановка эксперимента. Пример – эксперименты по импульсному флеш фотолизу. Лазеры, используемые для фотолиза, их параметры. Чувствительность, зависимость чувствительности от сечений поглощения для фотолитизирующего излучения и мониторирующего излучения.	4
<b>Тема 8. Постановка эксперимента по импульсному фотолизу в пико- и фемто-секундном диапазоне</b> Генерация сверхкоротких импульсов. Фемтосекундные лазеры, генераторы гармоник. Генерация импульсов с широким спектром. Современные приемники излучения – ICCD камера. Пример конкретной установки. Чувствительность, требования к энергетическим параметрам лазеров.	4
<b>Тема 9. Струевые методы.</b> Замена времени на координату или скорость в струевых экспериментах. Учет изменения числа частиц. Кинетика реакции с изменением объема. Кинетические закономерности реакции в струе с изменением числа частиц. Реактор идеального вытеснения и реактор полного перемешивания. Обратная диффузия в струе. Ламинарный и турбулентный потоки. Профиль скорости по сечению реактора. Кавитация. Методы непрерывной, ускоренной и остановленной струи.	4
<b>Тема 10. Инфракрасные лазеры в химической кинетике</b> Краткие сведения об инфракрасных лазерах. Диапазон длин волн, возможности перестройки, мощности и длительности импульсов. Конкуренция теплового и фотохимического механизма действия ИК-излучения на скорость химических превращений. Многофотонная диссоциация молекул под действием импульсного ИК-излучения. Селективность по связям и молекулам. Изотопная селективность. Изучение роли различных видов Энергии в преодолении активационного барьера элементарных бимолекулярных реакций.	2

#### Самостоятельная работа студентов (34 ч)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Самостоятельная работа во время занятий из них:	34
закрепление, обобщение и повторение пройденного учебного материала	7
уточнение и дополнение сведений и знаний, полученных на лекциях	3
изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	7
Самостоятельная работа во время промежуточной аттестации из них:	17
подготовка к экзамену	17

## 5. Перечень учебной литературы

1. Н.М.Эмануэль, Д.Г.Кнорре. Курс химической кинетики. Москва. Высшая школа. 1984. – 72 экз.
2. Е.Т.Денисов, О.М.Саркисов, Г.И.Лихтенштейн. Химическая кинетика. Москва. Химия. 2000. – 1 экз.
3. Методы исследования быстрых реакций. Ред. Т. Хеммис. Мир. 1977. – 1 экз.
4. Ю.Н.Молин, В.Н.Панфилов, А.К.Петров. Инфракрасная фотохимия. Новосибирск. Наука, Сибирское отделение, 1985. – 1 экз.
5. Г. Эйринг, С.Г. Лин, С.М. Лин. *Основы химической кинетики*. М.: Мир, 1983, 528 с. – 6 экз.
6. В.Демтредер. Современная лазерная спектроскопия. Долгопрудный, Интеллект, 2014. – 7 экз.

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

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

#### 7.1 Ресурсы сети Интернет

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.
- «Российская национальная платформа открытого образования» (<http://openedu.ru/>), Coursera ([www.coursera.org](http://www.coursera.org)), edX ([www.edx.org](http://www.edx.org)).

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС и электронную почту.

#### 7.2 Современные профессиональные базы данных:

- Реферативно-поисковая база данных Reaxys (Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scopus (Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scifinder (Chemical Abstracts Service)
- Библиометрическая база данных Web of Science Core Collection (Thomson Reuters Scientific LLC.)
- База данных полнотекстовых научных журналов JSTOR.
- Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки (ЭБД РГБ)
- Электронные ресурсы российской научной библиотеки eLibrary.ru
- Электронные ресурсы издательства American Chemical Society (ACS)

- Электронные ресурсы издательства Annual Reviews
- Электронные ресурсы Freedom Collection издательства Elsevier
- Электронные ресурсы издательства The Royal Society of Chemistry (RSC)
- Электронные ресурсы издательства Wiley

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

### 8.1 Перечень программного обеспечения

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

Использование специализированного программного обеспечения для прохождения практики не требуется.

### 8.2 Информационные справочные системы

Не используются

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

Для реализации дисциплины *Современные методы химической кинетики* используются специальные помещения:

1. Аудитории в ИХКГ СО РАН укомплектованные специализированной мебелью и оборудованные всем необходимым для чтения лекций: доска, экран, компьютер, мультимедийный проектор.

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

Перечень результатов обучения по дисциплине *Современные методы химической кинетики* и индикаторов их достижения представлен в разделе 1.

### Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине *Современные методы химической кинетики*

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<p><b>Экзамен:</b>  <b>Теоретические вопросы:</b>            – наличие полных ответов на все вопросы с непринципиальными неточностями,            – осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность ответов,            – точность и корректность применения терминов и понятий,</p>	<p><i>отлично</i></p>

<p><b>Экзамен:</b> <b>Теоретические вопросы:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– наличие полных ответов на все вопросы с несущественными ошибками,</li> <li>– осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность ответов, наличие затруднений в объяснении отдельных процессов и явлений,</li> <li>– точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок.</li> </ul>	<i>Хорошо</i>
<p><b>Экзамен:</b> <b>Теоретические вопросы:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– наличие ответов на все вопросы, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками,</li> <li>– осмысленность и структурированность в изложении материала, наличие ошибок в логике, аргументации и объяснении отдельных процессов и явлений,</li> <li>– корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок.</li> </ul>	<i>Удовлетворительно</i>
<p><b>Экзамен:</b> <b>Теоретические вопросы:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– наличие ответов не на все вопросы, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками,</li> <li>– отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала,</li> <li>– грубые ошибки в применении терминов и понятий.</li> </ul>	<i>Неудовлетворительно</i>

***Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения***

*Примеры экзаменационных заданий:*

1. Рассчитайте, какая доля молекул Cl<sub>2</sub> продиссоциирует после облучения импульсом излучения третьей гармоники Nd лазера ( $\lambda=353$  нм) с энергией  $E= 50$  мJ. Площадь сечения лазерного луча  $S= 0.4$  см<sup>2</sup>. Спектр поглощения молекулярного хлора приведен на рисунке.
2. В установке, использующей метод cavity ring down spectroscopy, оптическая ячейка с исследуемым образцом образована зеркалами с коэффициентом отражения  $R_1 = R_2 = 99.998\%$ . Расстояние между зеркалами равно 30 см. Чему равно время жизни фотонов в ячейке в отсутствие поглощения в образце? Насколько сократится время жизни фотонов, если образец длиной 10 см имеет коэффициент поглощения  $10^{-8}$  см<sup>-1</sup>?



**Лист актуализации рабочей программы дисциплины**  
*«Современные методы химической кинетики»*

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Ученого совета ФЕН	Подпись ответственного