



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Иркутский государственный университет»
(ФГБОУ ВО «ИГУ»)
Факультет химический



Рабочая программа дисциплины (модуля)

Индекс дисциплины по УП: Б1.В.ДВ.1.1

Наименование дисциплины (модуля): Кинетика многомаршрутных реакций

Направление подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
04.06.01 - Химические науки

Направленность программы подготовки кадров высшей квалификации (программы
аспирантуры) **Физическая химия**

Форма обучения **очная / заочная**

Согласовано с УМК химического
факультета
протокол № 12 от «17» 06 2019 г.
Председатель УМК /Вильмс А.И./

Программа рассмотрена на заседании
кафедры физической и коллоидной химии
«07» 06 2019 г. Протокол № 11
Зав. кафедрой /Шмидт А.Ф./

Иркутск 2019 г.

Содержание

1.	Цели и задачи дисциплины	3
2.	Место дисциплины в структуре ОПОП.	4
3.	Требования к результатам освоения дисциплины	4
4.	Объем дисциплины и виды учебной работы	5
5.	Содержание дисциплины	6
5.1	Содержание разделов и тем дисциплины	
5.2	Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами	
5.3	Разделы и темы дисциплин и виды занятий	
5.4	Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ.	
6.	Примерная тематика рефератов (при наличии)	10
7.	Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:	10
	а) основная литература;	
	б) дополнительная литература;	
	в) программное обеспечение;	
	г) интернет-ресурсы, базы данных, информационно-справочные и поисковые системы	
8.	Материально-техническое обеспечение дисциплины.	12
9.	Образовательные технологии	12
10.	Фонды оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	13
	10.1 Оценочные средства текущего контроля	
	10.2 Оценочные средства для промежуточной аттестации	

1. Цели и задачи дисциплины:

Цель дисциплины - Подготовка аспирантов к участию в исследованиях химических процессов проводимых в лабораторных условиях, освоение кинетических методов исследования сложных химических процессов.

Задачи:

- дать аспирантам углубленные представления о способах математического описания сложных химических реакций с большим количеством промежуточных соединений, качественных методах исследования систем дифференциальных уравнений, численных методах решения прямой и обратной кинетических задач;

- сформировать современные представления, обобщающие, полученные на предыдущем этапе обучения сведения о термодинамике и кинетике химических процессов.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП:

Дисциплина «Кинетика многомаршрутных реакций» (Б1.В.ДВ.1.1) относится к вариативной части профессионального цикла программы аспирантуры.

3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля):

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

ОПК-1: способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий;

УК-3: готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач;

ПК-1: уметь собирать и анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования и самостоятельно составлять план исследования в рамках выбранного направления подготовки;

ПК-2: самостоятельно определять перечень необходимых инструментальных методов исследования, используемых при выполнении диссертационной работы по выбранному направлению подготовки; современные способы обработки и интерпретации получаемых результатов; представлять возможности и ограничения методов;

ПК-3: использовать современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных при планировании химических исследований, для обработки и анализа экспериментальных данных, подготовке публикаций и презентации результатов диссертационной работы;

ПК-4: знать основные приемы и методы получения веществ, методы их идентификации, определения структуры и свойств с помощью уникального и серийного

научного оборудования.

В результате изучения дисциплины аспирант должен:

Знать:

- основные понятия современной теории химической кинетики и катализа, закономерности зависимости кинетики каталитических реакций от условий проведения процесса;
- основополагающие принципы функционирования сложных каталитических систем;
- основные поисковые системы химической информации;
- особенности работы научных коллективов при решении научных и научно-исследовательских задач;
- методы и подходы, используемые при проведении исследований в выбранной области, их возможности и ограничения, а также способы обработки получаемых результатов;
- современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных, содержащие информацию из области физической химии;
- основные приемы и методы получения веществ, методы их идентификации, определения структуры и свойств.

Уметь:

- использовать теоретические знания и практические навыки в области кинетики многомаршрутных реакций для решения конкретных научно-исследовательских задач;
- использовать современные методы исследования и информационные технологии при проведении научного исследования;
- собирать, систематизировать и анализировать научную литературу по заданной теме;
- самостоятельно выбирать методы решения задачи, поставленной научным руководителем;
- определять перечень необходимых инструментальных методов для проведения исследований, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты;
- использовать современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных при выполнении научного исследования;
- использовать научное оборудование при получении веществ, их идентификации и определения их структуры и свойств.

Владеть:

- теоретическими представлениями в области кинетики многомаршрутных реакций и основным понятийным аппаратом;
- навыками работы в исследовательском коллективе;
- навыками целенаправленного сбора литературы и анализа научной литературы, в том числе с использованием современных информационных технологий;
- навыками использования различных методов исследования в выбранной области знаний; - навыками планирования исследований, обработки и анализа получаемых результатов с применением современных вычислительных комплексов и баз данных;
- навыками использования уникального и серийного научного оборудования при проведении научного исследования;
- навыками представления результатов научных и научно-образовательных задач на российских и международных конференциях.

4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных единиц		Курс				
	очное	заочное	1	2		3	4
				очное	заочное		
Аудиторные занятия (всего)	36/1	24/0.7		36/1	24/0.7		
В том числе:	-			-			
Лекции	18/0.5	12/0.3		18/0.5	12/0.3		
Практические занятия (ПЗ)							
Семинары (С)	18/0.5	12/0.3		18/0.5	12/0.3		
Лабораторные работы (ЛР)							
КСР							
Контактная работа (всего)	36/1	24/0.7		36/1	24/0.7		
Самостоятельная работа (всего)	72/2	84/2.3		72/2	84/2.3		
В том числе:	-			-			
Курсовой проект (работа)							
Расчетно-графические работы							
Вид промежуточной аттестации: зачет	+	+		+			
Общая трудоемкость	часы	108		108	108		
	зачетные единицы	3		3	3		

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов и тем дисциплины

№	Наименование раздела	Содержание раздела дисциплины
1.	Введение	Цель и задачи курса. Исторический очерк. Примеры последовательно-параллельных сложных реакций. Общие принципы описания динамических систем
2.	Основные типы сложных химических реакций	2.1. Кинетические уравнения обратимых, последовательных, параллельных, сопряженных реакций и автокаталитических реакций. 2.2. Приемы решения прямой и обратных кинетических задач для этих типов реакций
3.	Методы получения кинетических уравнений стационарных процессов	3.1. Стационарные, нестационарные и квазиравновесные процессы. Многомаршрутность каталитических реакций. Теория многомаршрутных реакций Темкина-Хориути. 3.2 Стационарные модели некоторых каталитических процессов (в том числе модели с формированием и дезактивацией катализатора, модели ферментативного катализа, топахимических реакций)
4.	Нестационарные кинетические модели	4.1. Нестационарные модели. Качественные методы исследования систем дифференциальных уравнений (качественная теория дифференциальных уравнений). 4.2 Моделирование нестационарных эффектов (химических колебаний, триггеров)
5.	Обратная задача химической кинетики	5.1. Обратная кинетическая задача. Постановка, единственность решения. Интегральные и дифференциальные методы. Преимущества и недостатки. Простые примеры. 5.2. Линеаризация кинетических уравнений. Линейные методы наименьших квадратов. Численные методы математического моделирования. Методы интегрирования систем дифференциальных уравнений. Стохастические модели и метод "Монте-Карло". 5.3. Проблема жесткости уравнений, описывающих каталитические реакции, варианты ее решения. Нелинейные методы наименьших квадратов. Градиентные и неградиентные методы поиска констант скоростей элементарных стадий

5.2. Разделы дисциплины (модуля) и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами (модулями)

№ п/п	Наименование обеспечиваемых (последующих) дисциплин	№ № разделов и тем данной дисциплины, необходимых для изучения обеспечиваемых (последующих) дисциплин								
		2.1	2.2	3.1	3.2	4.1	4.2	4.3	5.1	5.2
1	Выполнение квалификационной работы									

5.3. Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела	Наименование темы	Виды занятий в часах			
			Лекц.	Практ. зан.	СРС	Всего
1	Введение		2/0	0/0	0/2	2/2
2	Численные методы решения систем линейных уравнений	Кинетические уравнения сложных химических реакций	1/2	1/0	4/4	6/6
		Приемы решения прямой и обратных кинетических задач для сложных реакций	1/0	1/2	4/4	6/6
3	Методы получения кинетических уравнений стационарных процессов	Стационарные, нестационарные и квазиравновесные процессы.	1/2	1/0	6/6	8/8
		Многомаршрутность каталитических реакций. Теория многомаршрутных реакций Темкина-Хориути	2/0	2/2	6/8	10/10

		Стационарные модели некоторых каталитических процессов	2/2	2/0	6/8	10/10
4	Нестационарные кинетические модели	Нестационарные модели. Качественные методы исследования систем дифференциальных уравнений	3/2	2/2	12/13	17/17
		Моделирование нестационарных эффектов	2/0	3/2	10/13	15/15
5	Обратная задача химической кинетики	Обратная кинетическая задача. Интегральные и дифференциальные методы.	1/2	1/0	8/8	10/10
		Линеаризация кинетических уравнений. Численные методы математического моделирования.	1/0	1/2	8/8	10/10
		Кинетика сложных гомогенно катализируемых реакций	2/2	4/2	8/10	14/14

5.4. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/п	№ раздела и темы дисциплины (модуля)	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудо-емкость (часы)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6
1.	2. Основные типы сложных химических реакций	Кинетические уравнения обратимых, последовательных, параллельных, сопряженных реакций и автокаталитических реакций	1/0	Входной контроль в виде тестового задания по химической кинетике с открытыми вопросами.	ОПК-1
		Приемы решение прямой и обратных кинетических задач для этих типов реакций	1/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3, ПК-4
2	3. Методы получения кинетических уравнений стационарных процессов	Стационарные, нестационарные и квазиравновесные процессы.	1/0	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3
		Многомаршрутность каталитических реакций. Теория многомаршрутных реакций Темкина-Хориути.	2/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3
		Стационарные модели некоторых каталитических процессов (в том числе модели с формированием и дезактивацией катализатора, модели ферментативного катализа, топахимических реакций)	2/0	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-1, ПК-2, ПК-3
3.	4. Нестационарные	Нестационарные модели. Качественные методы исследования систем	2/2	Устная беседа. Проверка	ПК-2, ПК-3, УК-3

	кинетические модели	дифференциальных уравнений (качественная теория дифференциальных уравнений).		практических работ	
		Моделирование нестационарных эффектов (химических колебаний, триггеров).	3/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3, УК-3
4	5. Обратная задача химической кинетики	Линеаризация кинетических уравнений. Линейные методы наименьших квадратов. Численные методы математического моделирования. Методы интегрирования систем дифференциальных уравнений. Стохастические модели и метод "Монте-Карло".	2/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3, УК-3
5		Кинетика сложных гомогенно катализируемых реакций	4/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-1, ПК-2, ПК-3, УК-3

6. Примерная тематика рефератов, докладов, проектов (при наличии); перечень вопросов к зачетам, экзаменам и т.п.:

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):

а) основная литература

1. Курохтина, А.А. Метод конкурирующих реакций в исследованиях механизмов каталитических процессов: традиционные и новые способы применения [Текст] : учеб. пособие / А. А. Курохтина, А. Ф. Шмидт ; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2012. - 93 с. ; 20 см. - Библиогр.: с. 83-93. - ISBN 978-5-9624-0667-1 13 экз.
2. Самойлов, Н. А. "Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико-технологических процессов"" [Электронный ресурс] / Н. А. Самойлов. - Москва : Лань", 2013. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=37359. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1553-3 :
3. Марков, Ю. Г. Математические модели химических реакций [Электронный ресурс] / Ю. Г. Марков. - Москва : Лань, 2013. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=30200. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1483-3 :

б) дополнительная литература:

1. Темкин, О. Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты / О. Н. Темкин. - М. : Академкнига, 2008. - 918 с. : ил. ; 24 см. - Библиогр. в конце глав. - ISBN 978-5-94628-336-6. 1 экз.
2. Практическая химическая кинетика. Химическая кинетика в задачах с решениями : учеб. пособие / ред. М. Я. Мельников. - М. : Изд-во МГУ ; СПб. : Изд-во СПбГУ, 2006. - 591 с. : ил. ; 22 см. - Библиогр. в конце глав. - Библиогр.: с. 591. - ISBN 5-211-05233-1. - ISBN 5-288-04155-5 : 2 экз.
3. Самарский, А.А. Введение в численные методы [Текст] : учеб. пособие для вузов / А. А. Самарский ; Московский гос. ун-т им. М. В. Ломоносова. - 3-е изд., стер. - М. : Лань, 2005. - 288 с. ; 21 см. - Библиогр.: с. 281. - Предм. указ.: с. 284-286. - ISBN 5-8114-0602-9. 2 экз.
4. Бахвалов, Н.С. Численные методы. Решения задач и упражнения : Учеб. пособие / Н. С. Бахвалов, А. А. Корнев, Е. В. Чижонков. - М. : Дрофа, 2009. - 394 с. : ил. ; 22 см. - Библиогр.: с. 393-394. - ISBN 978-5-358-03610-9. 1 экз.
5. Формалев, В.Ф. Численные методы [Текст] : учеб. пособие для студ. техн. ун-тов / В. Ф. Формалев, Д. Л. Ревизников. - М. : Физматлит, 2004. - 398 с. : ил. ; 22 см. -

- Библиогр.: с. 391-393. - ISBN 5-9221-0479-9 : 1 экз.
6. Турчак, Л. И. Основы численных методов [Текст] : учеб. пособие для студ. вузов / Л. И. Турчак, П. В. Плотников. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Физматлит, 2005. - 300 с. : ил. - Библиогр.: с. 290-292. - Предм. указ.: с. 293-300. - ISBN 978-5-9221-0153-6. 1 экз.
 7. Горлач, Б. А. Исследование операций [Электронный ресурс] / Б. А. Горлач. - Москва: Лань, 2013. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4865. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1430-7 :
 8. Демидович, Б. П. Численные методы анализа. Приближение функций, дифференциальные и интегральные уравнения [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Б. П. Демидович, И. А. Марон, Э. З. Шувалова. - Москва : Лань, 2010. - 400 с. : ил. - (Классическая учебная литература по математике) (Лучшие классические учебники). - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=537. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-0799-6 :
 9. Волков, Е.А. Численные методы [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Е. А. Волков. - Москва : Лань, 2008. - 256 с. : граф., табл. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=54. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-0538-1 :

в) программное обеспечение

г) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1) <http://study.ustu.ru/view/aid/8473/1/кинетика%20сложных%20реакций.pdf>

учебное пособие «Кинетика сложных реакций» авторов Ю. Н. Макурина, Е. И. Степановских, Л. А. Брусницына;

2) <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/oil/kinetika.html>

данный сайт Московского государственного университета (страница кафедры химии нефти и органического катализа химического факультета), на котором представлены методические материалы по катализу).

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля):

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием и приборной базой, а именно: аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 402, 426, 303);

9. Образовательные технологии:

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения. В частности, в рамках освоения дисциплины «Кинетика многомаршрутных реакций» аспирантами химического факультета предусмотрены

1) лекции с применением:

а) технологий объяснительно-иллюстративных объяснений,

б) объяснительно-иллюстративный метода с элементами проблемного изложения;

в) разбора конкретных ситуаций.

2) практические занятия, во время которых проводится решение типовых задач, контрольные и аудиторные самостоятельные работы, обсуждаются вопросы лекций и домашних заданий;

3) самостоятельная работа аспирантов, включающая подготовку к семинарским занятиям в форме изучения теоретического материала лекций, решения задач по различным разделам дисциплины; подготовку к текущему контролю успеваемости;

4) консультирование аспирантов по изучаемым теоретическим и практическим вопросам.

10.1 Оценочные средства текущего контроля:

Назначение оценочных средств ТК - выявить сформированность у обучающихся компетенций: ОПК-1, УК-3, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4.

Для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации разработан ФОС, включающий тематику заданий и примерный перечень вопросов к зачету.

10.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации.

Промежуточная аттестация (*зачет*) может проводиться в форме устного собеседования или в виде тестовых заданий с открытыми вопросами.

Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для зачета:

1. Кинетические уравнения простейших обратимых реакций.
2. Кинетические уравнения простейших последовательных реакций.
3. Кинетические уравнения простейших параллельных, реакций.
4. Кинетические уравнения простейших сопряженных реакций.
5. Кинетические уравнения автокаталитических реакций.
6. Стационарные, нестационарные и квазиравновесные процессы.
7. Многомаршрутность каталитических реакций. Теория многомаршрутных реакций Темкина-Хориути.
8. Стационарные модели некоторых каталитических процессов (в том числе модели с формированием и дезактивацией катализатора, модели ферментативного катализа, топохимических реакций).
9. Нестационарные модели. Качественные методы исследования систем дифференциальных уравнений (качественная теория дифференциальных уравнений).
10. Моделирование нестационарных эффектов (химических колебаний, триггеров).
11. Обратная кинетическая задача. Постановка, единственность решения. Интегральные и дифференциальные методы. Преимущества и недостатки.
12. Линеаризация кинетических уравнений. Линейные методы наименьших квадратов.
13. Численные методы математического моделирования. Методы интегрирования систем дифференциальных уравнений. Стохастические модели и метод "Монте-Карло".
14. Нелинейные методы наименьших квадратов. Градиентные и неградиентные методы поиска констант скоростей элементарных стадий.

Критерии оценивания см. *ФОС УМКД*

Разработчик:

 профессор

А.Ф. Шмидт

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии
«07» 06 2019 г.

Протокол № 11 Зав. кафедрой  /Шмидт А.Ф./