

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ



Заведующий кафедрой
физической химии

А.В. Введенский
31.08.2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
ФТД.В.02 Графо-кинетический анализ
многостадийных процессов

1. Шифр и наименование направления подготовки: 04.04.01 - Химия
2. Профиль подготовки/специализации: Физическая химия.
3. Квалификация (степень) выпускника: магистр
4. Форма образования: очная
5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: физической химии
6. Составители программы: Зарцын Илья Давидович, д.х.н., проф.
7. Рекомендована: НМС химического факультета от 26.06.17, протокол № 6
8. Учебный год: 2018 / 2019 **Семестр 3**

9. Цели и задачи учебной дисциплины: Обучить студентов графо-кинетическому анализу кинетики сложных многостадийных химических процессов, расширить их возможности в применении термодинамических методов к описанию неравновесных систем, необратимых химико-технологических процессов, проиллюстрировать возможности графо-кинетического анализа на примерах электрохимических систем.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:
ФТД. Факультативы. Вариативная часть.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	знать: принципы построения кинетических графов для химических и электрохимических процессов; уметь: оценивать возможность реализации определенного типа химических процессов и вычислять концентрации компонентов и скорости элементарных стадий; иметь навыки: основных расчетных методов графо-кинетического анализа применительно к электродным процессам.
ПК-2	Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	знать: систему фундаментальных понятий и методологических аспектов многостадийных электрохимических процессов уметь: применять систему фундаментальных физико-химических понятий при моделировании процесса ионизации металла; иметь навыки: моделирования конкретных электрохимических процессов методом кинетических графов.

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час в соответствии с учебным планом — 2/72.
Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) – зачет.

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)			
	Всего	По семестрам		
		Сем. 3	
Аудиторные занятия	36	36		
в том числе:				
лекции	36	36		
практические	-	-		
лабораторные	-	-		
Самостоятельная работа	36	36		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – 0 час.)	0	0		
Итого:	72	72		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Общие представления о теории сложных многостадийных химических процессов	Элементарные стадии и промежуточные вещества. Кинетические маршруты и стехиометрические числа элементарных стадий. Брутто-уравнения химических реакций и стехиометрические уравнения для различных кинетических маршрутов.

		Уравнение для скорости одномаршрутной многостадийной реакции в стационарном состоянии. Кинетическая трактовка химического сродства для одномаршрутной многостадийной химической реакции в стационарном состоянии.
1.2	Начальные сведения по теории графов	Понятие графа, примеры. Связные и несвязные графы, эйлеровы графы, деревья и леса, циклы и деревья, ориентированные графы, мультиграфы.
1.3	Графо-кинетический анализ многостадийных многомаршрутных реакций	Открытые и закрытые последовательности элементарных стадий по Христиансену. Метод кинетических графов применительно к описанию открытых последовательностей элементарных стадий по Христиансену. Нулевая вершина кинетического графа, работы М.И.Тёмкина. Выражение для стационарных концентраций промежуточных веществ на основе метода кинетических графов. Представление кинетических маршрутов как циклов на кинетическом графе. Уравнения для скоростей реакций по кинетическим маршрутам. Выражения для скоростей брутто-реакций в стационарном состоянии на основе метода кинетических графов.
1.4	Моделирование закономерностей ионизации металлов в электролитах на основе метода кинетических графов при наличии промежуточных частиц в при-электродном слое раствора	Моделирование двух- и трехстадийных процессов ионизации металлов в электролитах. Соотношение для концентраций ионов в промежуточной степени окисления в приэлектродном слое раствора. Уравнение скорости ионизации металла в стационарном состоянии в общем виде. Частные случаи общего уравнения для скорости реакции в стационарном состоянии при различных скоростьопределяющих стадиях. Моделирование влияния диффузионных ограничений на закономерности ионизации металла в стационарном состоянии методом кинетических графов. Многостадийная реакция ионизации металла при наличии диффузионных ограничений как пример многомаршрутного процесса. Примеры многостадийных реакций ионизации металла: растворение амальгамы индия, ионизация меди в сульфатном растворе. Моделирование процесса ионизации металла в присутствии окислителей методом кинетических графов. Термодинамическое и кинетическое сопряжение реакций ионизации металла и восстановления окислителя при наличии общих промежуточных стадий: взаимодействие ионов металла в промежуточной степени окисления с окислителем. Условия для реализации катализа, термодинамического сопряжения и химической индукции при совместном протекании на одном электроде реакций ионизации металла и восстановления окислителя.
1.5	Моделирование закономерностей ионизации металлов в электролитах методом кинетических графов при наличии промежуточных частиц в адсорбированном состоянии на поверхности электрода	Моделирование двух- и трехстадийных реакций ионизации металлов в электролитах. Соотношение для концентраций промежуточных поверхностных частиц в стационарном состоянии в общем виде. Частные случаи общего уравнения для скорости реакции в стационарном состоянии при различных скоростьопределяющих стадиях. Конкретные примеры: процессы ионизации железа, никеля, меди в различных средах. Моделирование явления пассивности металлов методом кинетических графов. Термодинамическое и кинетическое сопряжение процессов ионизации металла и восстановления окислителя при наличии общих промежуточных частиц на поверхности металла. Условия для реализации химической индукции. Электрохимическое и химическое сопряжение совместно протекающих электродных реакций. Химическое растворение металлов в электролитах как предельный случай химического сопряжения совместно протекающих электродных реакций.

1.6	<p>Моделирование нестационарных процессов методом кинетических графов</p>	<p>Общее представление об интегральном преобразовании Лапласа – Карсона. Поиск решений систем обыкновенных линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами с применением интегрального преобразования Лапласа – Карсона. Метод кинетических графов применительно к описанию переходных процессов. Моделирование нестационарных электродных процессов с двумя и тремя промежуточными частицами методом кинетических графов с применением интегрального преобразования Лапласа – Карсона.</p>
-----	---	--

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Общие представления о теории сложных многостадийных химических процессов	4			6	10
2	Начальные сведения по теории графов	4			6	10
3	Графо-кинетический анализ многостадийных многомаршрутных реакций	4			4	8
4	Моделирование закономерностей ионизации металлов в электролитах на основе метода кинетических графов при наличии промежуточных частиц в при-электродном слое раствора	8			6	14
5	Моделирование закономерностей ионизации металлов в электролитах методом кинетических графов при наличии промежуточных частиц в адсорбированном состоянии на поверхности электрода	8			8	16
6	Моделирование нестационарных процессов методом кинетических графов	8			6	14
Итого:		36	-	-	36	72

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Работа с конспектами лекций, выполнение практических заданий, заданий текущей аттестации.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Пармон В.Н. Термодинамика неравновесных процессов для химиков. Приложения к химической кинетике, катализу, материаловедению и биологии / В.Н. Пармон - М.: Издательский дом «Интеллект», 2014. - 471 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Пригожин И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур/ И. Пригожин, Д. Кандепуди, - М.: Мир, 2002.- 451 с.
3	Бажин Н.М. Термодинамика для химиков / Н.М. Бажин, В.А.Иванченко, В.Н.Пармон. – М.: Химия, 2004.- 415 с.
4	Агеев Е.П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах / Е.П. Агеев.-М.: УРСС, 2001.- 135 с.
5	Гленсдорф П. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций/ П. Гленсдорф, И.Пригожин.-М.:Москва. УРСС, 2003.-273 с.
6	Эбелинг В. Образование структур при необратимых процессах. Введение в теорию диссипативных структур / В.Эбелинг. - М.:Москва - Ижевск, 1979. - 253 с.
7	Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов. / Р.Хаазе. - М.: Мир, 1967.- 534 с.
8	Анищенко В.С. Знакомство с нелинейной динамикой /В.С. Анищенко. - М. : Москва - Ижевск,2002.-142 с.
9	Трубецков Д.И. Введение в синергетику. Хаос и структуры / Д.И. Трубецков.- М.:УРСС,2004. – 232 с.
10	Николис Г. Познание сложного / Г.Николис, И. Пригожин.- М.:Мир,1990.-342 с.
11	Путь в синергетику/ П.Б. Безручко [и др.] - М.:УРСС, 2005.- 303 с.
12	Данилов Ю.А. Лекции по нелинейной динамике / Ю.А.Данилов - М.:Постмаркет,2001.-187с.
13	Справочник по электрохимии / под ред. А.М. Сухотина .— Л. : Химия : Ленингр. отд-ние, 1981 .— 486 с.

в)информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Источник
14	Научная электронная библиотека — < http://www.elibrary.ru >
15	Электронная библиотека Воронежского государственного университета - < http://www.lib.vsu.ru >
16	Официальное электронное издание Химического факультета МГУ в Интернет - < http://www.chemnet.ru >

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Сборник примеров и задач по электрохимии : учеб. пособие /сост.: А.В. Введенский [и др.] - Воронеж : ИПЦ ВГУ, 2010.

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Ноутбук , on-line-проектор, лекционная аудитория

19. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС (средства оценивания)
ОПК-1 Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов	Знать: принципы построения кинетических графов для химических и электрохимических процессов.	1	Контрольная работа
	Уметь: оценивать возможность реализации определенного типа химических процессов и вычислять концентрации компонентов и скорости элементарных стадий.	2	

химии при решении профессиональных задач	Иметь навыки: основных расчетных методов графо-кинетического анализа применительно к электродным процессам.	3	
ПК-2 Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Знать: систему фундаментальных понятий и методологических аспектов многостадийных электрохимических процессов	4	Контрольная работа
	Уметь: применять систему фундаментальных физико-химических понятий при моделировании процесса ионизации металла;	5	
	Иметь навыки: моделирования конкретных электрохимических процессов методом кинетических графов.	6	
Промежуточная аттестация			Комплект вопросов

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Пример:

Для оценивания результатов обучения на экзамене/зачете используются следующие показатели (ЗУНы из 19.1):

- 1) знание учебного материала и владение понятийным аппаратом;
- 2) умение связывать теорию с практикой;
- 3) умение иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

Для оценивания результатов обучения на зачете используется – зачтено, не зачтено
Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Оценка	Критерии оценок
Зачтено	Глубокие знания по всем вопросам билета. Способность находить решения нестандартных научных задач по обсуждаемой проблеме. Понимание сути основных проблем курса. Обоснование ответов.
Незачтено	Отрывочные знания материала. Слабое владение математическим аппаратом. Неумение применять полученные знания к анализу конкретных систем и процессов. Грубые ошибки при решении даже простых задач.

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к экзамену (зачету):

1. Элементарные стадии и промежуточные вещества. Кинетические маршруты и стехиометрические числа элементарных стадий. Брутто-уравнения химических реакций и стехиометрические уравнения для различных кинетических маршрутов.
2. Уравнение для скорости одномаршрутной многостадийной реакции в стационарном состоянии. Кинетическая трактовка химического сродства для одномаршрутной многостадийной химической реакции в стационарном состоянии.
3. Понятие графа, примеры. Связные и несвязные графы, эйлеровы графы, деревья и леса, циклы и деревья, ориентированные графы, мультиграфы.
4. Открытые и закрытые последовательности элементарных стадий по Христиансену. Метод кинетических графов применительно к описанию открытых последовательностей элементарных стадий по Христиансену.
5. Нулевая вершина кинетического графа, работы М.И.Тёмкина. Выражение для стационарных концентраций промежуточных веществ на основе метода кинетических графов. Представление кинетических маршрутов как циклов на кинетическом графе.

6. Уравнения для скоростей реакций по кинетическим маршрутам. Выражения для скоростей брутто-реакций в стационарном состоянии на основе метода кинетических графов.
7. Моделирование двух- и трехстадийных процессов ионизации металлов в электролитах. Соотношение для концентраций ионов в промежуточной степени окисления в приэлектродном слое раствора.
8. Уравнение скорости ионизации металла в стационарном состоянии в общем виде. Частные случаи общего уравнения для скорости реакции в стационарном состоянии при различных скоростьопределяющих стадиях.
9. Моделирование влияния диффузионных ограничений на закономерности ионизации металла в стационарном состоянии методом кинетических графов. Многостадийная реакция ионизации металла при наличии диффузионных ограничений как пример многомаршрутного процесса. Примеры многостадийных реакций ионизации металла: растворение амальгамы индия, ионизация меди в сульфатном растворе.
10. Моделирование процесса ионизации металла в присутствии окислителей методом кинетических графов.
11. Термодинамическое и кинетическое сопряжение реакций ионизации металла и восстановления окислителя при наличии общих промежуточных стадий: взаимодействие ионов металла в промежуточной степени окисления с окислителем.
12. Условия для реализации катализа, термодинамического сопряжения и химической индукции при совместном протекании на одном электроде реакций ионизации металла и восстановления окислителя.
13. Моделирование двух- и трехстадийных реакций ионизации металлов в электролитах. Соотношение для концентраций промежуточных поверхностных частиц в стационарном состоянии в общем виде.
14. Частные случаи общего уравнения для скорости реакции в стационарном состоянии при различных скоростьопределяющих стадиях. Конкретные примеры: процессы ионизации железа, никеля, меди в различных средах.
15. Моделирование явления пассивности металлов методом кинетических графов. Термодинамическое и кинетическое сопряжение процессов ионизации металла и восстановления окислителя при наличии общих промежуточных частиц на поверхности металла.
16. Условия для реализации химической индукции. Электрохимическое и химическое сопряжение совместно протекающих электродных реакций. Химическое растворение металлов в электролитах как предельный случай химического сопряжения совместно протекающих электродных реакций.
17. Общее представление об интегральном преобразовании Лапласа – Карсона. Поиск решений систем обыкновенных линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами с применением интегрального преобразования Лапласа – Карсона.
18. Метод кинетических графов применительно к описанию переходных процессов. Моделирование нестационарных электродных процессов с двумя и тремя промежуточными частицами методом кинетических графов с применением интегрального преобразования Лапласа – Карсона.

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме *письменной работы (контрольная)*. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний, позволяющее(ие) оценить степень сформированности умений и навыков. При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.