

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
физической химии



д.х.н., доц. О.А. Козадеров

01.07.2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ФТД.В.02 Графо-кинетический анализ многостадийных процессов

Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация: Экспертная химия

3. Квалификация выпускника: магистр

4. Форма обучения: очно-заочная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: физической химии

6. Составители программы: Зарцын Илья Давидович, д.х.н., проф.

7. Рекомендована: НМС химического факультета от 17.06.2021, протокол № 5

8. Учебный год: 2022 /2023

Семестр: 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины являются:

обучить студентов графо-кинетическому анализу кинетики сложных многостадийных химических процессов.

Задачи учебной дисциплины:

- сформировать навыки применения 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: вариативная часть блока Б1, факультативная дисциплина

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

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПКВ - 2	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области физической и неорганической химии	ПКВ - 2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	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; Владеть: основными расчетными методами графо-кинетического анализа применительно к электродным процессам.
		ПКВ - 2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Знать: систему фундаментальных понятий и методологических аспектов многостадийных электрохимических процессов Уметь: применять систему фундаментальных физико-химических понятий при моделировании процесса ионизации металла; Владеть: навыками моделирования конкретных электрохимических процессов методом кинетических графов.

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 2 / 72.

Форма промежуточной аттестации зачет

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость			
		Всего	По семестрам		
			3 семестр	№ семестра	...
Контактная работа		38	38		
в том числе:	лекции	38	38		
	практические				
	лабораторные				

	курсовая работа				
Самостоятельная работа		34	34		
Промежуточная аттестация					
Итого:		72	72		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
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 скоростноопределяющих 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	<p>Моделирование двух- и трехстадийных реакций ионизации металлов в электролитах.</p> <p>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.</p> <p>Конкретные примеры: процессы ионизации железа, никеля, меди в различных средах.</p> <p>Моделирование явления пассивности металлов методом кинетических графов.</p> <p>Термодинамическое и кинетическое сопряжение процессов ионизации металла и восстановления окислителя при наличии общих промежуточных частиц на поверхности металла. Условия для реализации химической индукции.</p> <p>Электрохимическое и химическое сопряжение совместно протекающих электродных реакций.</p> <p>Химическое растворение металлов в электролитах как предельный случай химического сопряжения совместно протекающих электродных реакций.</p>	
1.6	Моделирование нестационарных процессов методом кинетических графов	<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 темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Общие представления о теории сложных многостадийных химических процессов	6			6	12
2	Начальные сведения по теории графов	6			6	12
3	Графо-кинетический анализ многостадийных многомаршрутных реакций	6			6	12
4	Моделирование закономерностей ионизации металлов в электролитах на основе метода кинетических	8			6	14

	графов при наличии промежуточных частиц в при-электродном слое раствора					
5	Моделирование закономерностей ионизации металлов в электролитах методом кинетических графов при наличии промежуточных частиц в адсорбированном состоянии на поверхности электрода	6			4	10
6	Моделирование нестационарных процессов методом кинетических графов	6			4	10
Итого:		38	-	-	34	72

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Работа с конспектами лекций, выполнение практических заданий, заданий текущей аттестации. При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton, Zoom, Discord и др.), электронная почта, мессенджеры и соцсети.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

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. - 472 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Пригожин И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур/ И. Пригожин, Д. Канделупи, - 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), курсовых 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. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

Лекции, практические задания для самостоятельной работы, подготовка к промежуточной аттестации. При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения и различные дистанционные образовательные технологии, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций (в том числе с применением сервисов Zoom, Discord и др.), взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Проектор, ноутбук, доска ученическая

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Общие представления о теории сложных многостадийных химических процессов	ПКВ-2	ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Перечень вопросов</i>
2.	Начальные сведения по теории графов	ПКВ-2	ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Перечень вопросов</i>
3.	Графо-кинетический анализ многостадийных многомаршрутных реакций	ПКВ-2	ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Перечень вопросов</i>
4.	Моделирование закономерностей ионизации металлов в электролитах на основе метода кинетических графов при наличии промежуточных частиц в при-электродном слое раствора	ПКВ-2	ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Перечень вопросов</i>
5.	Моделирование	ПКВ-2	ПКВ-2.1	<i>Перечень вопросов</i>

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
	закономерностей ионизации металлов в электролитах методом кинетических графов при наличии промежуточных частиц в адсорбированном состоянии на поверхности электрода		ПКВ-2.2	
6.	Моделирование нестационарных процессов методом кинетических графов	ПКВ-2	ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Перечень вопросов</i>
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет с оценкой				<i>Перечень вопросов</i>

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется в форме двух письменных контрольных работ. Первая контрольная работа включает вопросы с первого по девятый, вторая – с 10-го по 19-й.

Требования к выполнению заданий: наиболее полное и краткое изложение сути вопроса. Ответ должен отражать способность обучающегося применять знание законов термодинамики необратимых процессов к практическим задачам, умение работать с литературой и находить нужную информацию. В этом случае выставляется оценка зачтено.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация осуществляется по результатам контрольных работ. При успешном прохождении текущей аттестации зачет выставляется автоматически. В случае, если обучающийся не справился с заданиями контрольных работ, он получает вопросы из перечня для прохождения промежуточной аттестации.

Требования к выполнению заданий: наиболее полное и краткое изложение сути вопроса. Ответ должен отражать способность обучающегося применять знание законов термодинамики необратимых процессов к практическим задачам, умение работать с литературой и находить нужную информацию. В этом случае выставляется оценка зачтено.

Перечень вопросов:

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.