

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Кафедра прикладної хімії

Кафедра фізичної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан хімічного факультету

Калугін О.М.



“ 31 ” серпня 2023 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

**ПРОГНОЗУВАННЯ ПОВЕДІНКИ ЕКОСИСТЕМ ТА КІНЕТИКА
ПРОЦЕСІВ У РОЗЧИНАХ**

рівень вищої освіти _____ бакалавр _____

галузь знань _____ 10 Природничі науки _____
(шифр і назва)

спеціальність _____ 102 Хімія _____
(шифр і назва)

освітня програма _____ Освітньо-професійна програма “Хімія” _____
(шифр і назва)

спеціалізація _____
(шифр і назва)

вид дисципліни _____ за вибором _____
(обов’язкова / за вибором)

факультет _____ хімічний _____

2023 / 2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету
“ 30 ” _____ серпня _____ 2023 року, протокол № 8

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Черановський Владислав Олегович, д. фіз-мат. н., професор кафедри прикладної хімії;

Сльцов Сергій Віталійович к.х.н., доцент кафедри фізичної хімії
Програму схвалено на засіданні кафедри прикладної хімії;

Протокол від “ 29 ” _____ серпня _____ 2023 року № 1

Завідувач кафедри прикладної хімії



_____ / Валентин ЧЕБАНОВ /

(підпис)

Програму схвалено на засіданні кафедри фізичної хімії;

протокол від 28 серпня _____ 2023 року, № 1

Завідувач кафедри фізичної хімії



_____ / Микола МЧЕДЛОВ-ПЕТРОСЯН /

(підпис)

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми “Хімія”

Гарант освітньо-професійної програми “Хімія”



_____ / Олег КАЛУГІН /

(підпис)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “ 29 ” _____ серпня _____ 2023 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету



_____ / Павло ЄФІМОВ /

(підпис)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Прогнозування поведінки екосистем та кінетика процесів у розчинах” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки бакалавр

спеціальності (напрямку) 102 «хімія»

Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни

Познайомити студентів з теоретичними основами хімії які застосовуються для довгострокового прогнозування поведінки екологічних систем та оптимізації екологічного моніторингу навколишнього середовища, сформуванню уявлень про основні положення теорії динамічних систем і хімічної кінетики у розчинах та їх застосуванням в хімії.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

Основними завданнями вивчення дисципліни «Квантова хімія» є формування у здобувачів вищої освіти таких загальних і фахових компетентностей:

загальні:

- здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК-1);
- здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК-2);
- здатність працювати у команді (ЗК-3);
- здатність бути критичним і самокритичним (ЗК-11).

фахові:

– здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії (ФК-1);

– здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії (ФК-2);

– здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання (ФК10);

– здатність до розуміння та аналізу явищ, які спостерігаються при проведенні хімічних процесів, методів експериментальних досліджень фізико-хімічних властивостей та аналізу експериментальних даних. (ФК19);

– здатність до проведенні кінетичних розрахунків складних динамічних систем та інтерпретації їх результатів, оцінці впливу середовища реакції на її кінетичні закономірності. (ФК31)

1.3. Кількість кредитів 10

1.4. Загальна кількість годин 300

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання

Рік підготовки	
4-й	3-й
Семестр	
8-й	4-й
Лекції	
32 год.	12 год.
Практичні, семінарські заняття	
-год.	- год.
Лабораторні заняття	
64 год.	12 год.
Самостійна робота	
204 год.	276 год.
Індивідуальні завдання	
год.	

1.6. Заплановані результати навчання

Згідно з вимогами освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:

знати: основні положення теорії динамічних систем і хімічної кінетики у розчинах та їх застосуванням в хімії.

вміти: проводити розрахунки складних динамічних систем та інтерпретувати їх результатів; оцінювати вплив середовища реакції на її кінетичні закономірності.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Моделювання поведінки екологічних систем з точки зору фізичної та хімічної кінетики

Тема 1. Динамічні системи та їх еволюція

Проблема довгострокового прогнозування поведінки екосистем. Хімічна кінетика та її зв'язок з моделюванням еволюції екологічних і хімічних систем. Рівноважні і нерівноважні стани термодинамічних систем. Задачі оптимізації екологічного моніторингу з точки зору хімічної кінетики. Динамічна система як модель навколишнього середовища. Рівняння матеріального балансу. Нерівноважні стаціонарні стани.

Тема 2. Стаціонарні точки двовимірної динамічної системи.

Класифікація стаціонарних точок на прикладі системи хімічних реакцій. Критерій стійкості Ляпунова і його застосування для прогнозування поведінки екологічних систем і оптимізації екологічного моніторингу.

Тема 3. Лінійна нерівноважна термодинаміка

Термодинамічні сили та лави. Рівняння одновимірної дифузії та його застосування до прогнозування змін у навколишньому середовищі під впливом антропогенних факторів. Закони Онзагера. Теорема про мінімальне виробництво ентропії в нерівноважному стаціонарному стані.

Тема 4. Вступ до синергетики

Коливання у екосистемах та хімічних реакціях. Екологічний осцилятор. Автоколивання. Граничний цикл та умови його появи. Солітони у природі. Солітонне рішення рівняння Кортевега де Вриза. Фрактали і хаотизація у динамічних системах. Принципові труднощі довгострокових прогнозів поведінки екосистем. Топологія фазового портрету динамічної системи. Локальні співвідношення еквівалентності. Індекси Пуанкаре і біфуркації. Прогнозування техногенних катастроф.

Тема 5. Застосування елементів фізичної кінетики у прогнозуванні еволюції екосистем. Фізична кінетика як інструмент теоретичного дослідження складних хімічних та екологічних систем. Функція розподілу та її зв'язок із густиною вірогідності переходу.

Принцип детальної рівноваги. Рівняння Смолуховського та рівняння кінетичного балансу. Кінетичне рівняння Больцмана.

Розділ 2. Кінетика реакцій у розчинах

Тема 6. Формальна кінетика

Швидкість хімічної реакції. Кінетичний закон дії мас. Кінетичні рівняння. Необоротні реакції першого, другого й третього порядків. Поняття про механізм хімічних реакцій. Експериментальне визначення константи швидкості й порядку реакції. Принцип незалежності елементарних стадій. Методи складання кінетичних рівнянь. Кінетичний аналіз процесів, що протікають через утворення проміжних продуктів. Принцип квазістаціонарності Боденштейна та область його застосовності.

Тема 7. Теоретичні уявлення хімічної кінетики

Теорія перехідного стану (активованого комплексу). Властивості активованого комплексу. Основні допущення теорії активованого комплексу та область її застосовності. Статистичне та термодинамічне формулювання теорії, їх використання для розрахунку констант швидкості реакцій в розчинах.

Тема 8. Сольові ефекти у кінетиці реакцій у розчинах

Первинний та вторинний сольові ефекти. Застосування теорії перехідного стану для реакцій, що перебігають у розчинах. Теорія сильних електролітів Дебая–Хюккеля та сольові ефекти у кінетиці реакцій: рівняння Бренстеда–Б'єррума. Правило Олсона–Сімонсона.

Тема 9. Вплив розчинника на швидкість реакцій у розчинах

Поняття про полярність та параметри полярності розчинника. Вплив властивостей розчинника на швидкість реакцій: правила Х'юза–Інгольда. Кореляція швидкості реакцій у розчинах з параметрами полярності розчинника: співвідношення лінійності вільних енергій сольватації. Залежність швидкості реакцій між іонами від діелектричної проникності середовища: рівняння Лейдлера–Ейрінга та Скетчарда.

Тема 10. Міцелярні ефекти у кінетиці реакцій у розчинах

Міцелоутворення у розчинах поверхнево-активних речовин (ПАР). Солюбілізація. Міцели поверхнево-активних речовин, як середовище для перебігання хімічних реакцій. Псевдофазна іоно-обмінна модель міцел. Міцелярний каталіз. Механізми міцелярного каталізу. Кінетика реакцій у мікроемульсіях.

Тема 11. Кінетика ферментативних реакцій

Загальні відомості про кінетику й механізми ферментативних реакцій. Субстратна специфічність ферментів. Активні центри ферментів. Застосування принципу стаціонарності для ферментативної реакції за участю одного реагенту. Рівняння Міхаеліса-Ментен. Визначення кінетичних постійних рівняння Міхаеліса-Ментен з експериментальних даних. Інгібування ензимів. Вплив температури та рН середовища на швидкість ферментативних реакцій.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
л		п	лаб.	інд.	с. р.	л		п	лаб.	інд.	с. р.	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Моделювання поведінки екологічних систем з точки зору фізичної та хімічної кінетики												
Разом за розділом 1	150	16		32		102	150	6		6		138
Розділ 2. Кінетика реакцій у розчинах												

Разом за розділом 2	150	16		32		102	150	6		6		138
Усього годин	300	32		64		204	300	12		12		276

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ теми	Назва теми	Кількість годин
1	Розрахунки модельних динамічних систем	8
2	Моделювання дифузійних процесів у розчинах	8
3	Визначення характеру та стійкості особливих точок систем хімічних реакцій	8
4	Аналіз можливості появи граничних циклів у динамічних системах, що моделюють складні реакції у розчинах	8
6	Визначення порядку хімічної реакції	8
8	Дослідження сольового ефекту у кінетиці реакції, що перебігає у розчині	8
9	Вивчення впливу розчинника на швидкість реакції у розчині	8
10	Міцелярні ефекти у кінетиці реакцій	8
	Всього:	64

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Тема 1. Динамічні системи та їх еволюція	25
2	Тема 2. Стаціонарні точки двовимірної динамічної системи	22
3	Тема 3. Лінійна нерівноважна термодинаміка	20
4	Тема 4. Вступ до синергетики	20
5	Тема 5. Елементи фізичної кінетики	15
6	Тема 6. Формальна кінетика	17
7	Тема 7. Теоретичні уявлення хімічної кінетики	17
8	Тема 8. Сольові ефекти у кінетиці реакцій у розчинах	17
9	Тема 9. Вплив розчинника на швидкість реакцій у розчинах	17
10	Тема 10. Міцелярні ефекти у кінетиці реакцій у розчинах	17
11	Тема 11. Кінетика ферментативних реакцій	17
	Всього:	204

6. Індивідуальні завдання

Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота.

7. Методи контролю

Написання контрольних робіт за основними темами дисципліни, екзамен.

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання					Екзамен (залікова робота)	Сума
Розділ 1	Розділ 2	Контрольна робота, пе- редбачена навчальним планом	Індивідуальне завдання	Разом		
T1-5	T6-T11	T1-11				
20	20	20	-	60	40	100

Для допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен виконати всі контрольні роботи і набрати не менше 25 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяль- ності протягом семестру	Оцінка	
	для екзамену	для заліку
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

9. Рекомендована література

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Мультимедійні презентації лекцій.

Основна література

1. Черановський В.О. Основи хімічної нерівновагої термодинаміки. – Харків, ХНУ, 2010. 43 с.
2. Сугаков В. Й. Основи синергетики. – Київ: Обереги, 2001. 287 с.
3. Швед О.М. Термодинамічні та кінетичні аспекти хімічних реакцій – Вінниця, 2021. 144 с.
4. Epstein I.R., Pojman J.A. An introduction to nonlinear chemical dynamics. Topics in Physical Chemistry – Oxford University Press 1998, 480 p.
5. Wright M.R. An introduction to chemical kinetics. John Wiley & Sons, 2004. 441 p.
6. Khan M.N. Micellar catalysis. CRC Press, 2007. 482 p.
7. Reichardt Chr., Welton T. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry. 4-th ed. WILEY-VCH, 2011. 692 p.

Допоміжна література

1. Глумачний термінологічний словник з хімічної кінетики / НАН України, Ін-т фіз.-орган. хімії та вуглехімії ; уклад. Й. Опейда [та ін.]. - Донецьк, 1995. - 263 с.
2. Connors K.A. Chemical kinetics. The study of reaction rates in solutions. VCH Publishers, 1990. 480 p.
3. Amis E.S. Solvent Effects on Reaction Rates and Mechanisms – Academic Press, 1966. – 326 p.
4. Reichardt C., Welton T. Solvents and solvent effects in organic chemistry. 4th ed. – WILEY-VCH, 2011. 692 p.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. [https://uk.wikipedia.org/wiki/Коливальні реакції](https://uk.wikipedia.org/wiki/Коливальні_реакції).
2. Файл-сервер хімічного факультету ХНУ імені В.Н. Каразіна: <http://www-chemistry.univer.kharkov.ua/uk/>
3. <https://doi.org/10.1093/oso/9780195096705.001.0001>