

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМ. В.Н. КАРАЗІНА

КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧНОЇ ХІМІЇ
КАФЕДРА ФІЗИЧНОЇ ХІМІЇ

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“ ___ ” _____ 20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

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

За напрямом підготовки 040101 "хімія"

для спеціальності 6.040101 "хімія"

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу
(заочна форма навчання)

Харків – 2014

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів: 7	Галузь знань 0401 “Природничі науки” Напрямок підготовки 040101 "хімія" Спеціальність 6.040101	денна форма навчання, нормативна дисципліна
Модулів: 2		Рік підготовки: IV-й
Загальна кількість годин: 252		Семестр: 8-й
Тижневих годин для денної форми навчання: – аудиторних: 6 – самостійної роботи студента 10		Лекції: 12 години
		Лабораторні заняття: 12 години
	Самостійна робота: 228 годин	
	Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	Вид контролю: екзамен

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: сформулювати уявлення про основні положення нерівноважної хімічної термодинаміки та кінетики, познайомити студентів з теоретичними основами сучасних методів нерівноважної термодинаміки та їх застосуванням в хімії.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: основні закони нерівноважної термодинаміки і методи їх застосування для вирішення проблем моделювання фізико-хімічних процесів у розчинах.

вміти: проводити розрахунки термодинамічних властивостей речовини у нерівноважному стані та інтерпретувати результати цих розрахунків, а також оцінювати вплив середовища реакції на її кінетичні закономірності.

3. Програма навчальної дисципліни

Модуль 1. Основи нерівноважної термодинаміки і фізичної кінетики

Тема 1. Динамічні системи та їх еволюція

Відкриті термодинамічні системи. Нерівноважні стаціонарні стани. Рівняння матеріального балансу. Хімічна кінетика та її зв'язок з моделюванням поведінки відкритих систем.

Тема 2. Стаціонарні точки двовимірної динамічної системи.

Класифікація стаціонарних точок. Критерій стійкості Ляпунова.

Тема 3. Лінійна нерівноважна термодинаміка

Термодинамічні сили та лави. Рівняння одновимірної дифузії та її застосування до опису еволюції відкритих хімічних термодинамічних систем. Закони Онзагера. Теорема про мінімальне виробництво ентропії в нерівноважному стаціонарному стані.

Тема 4. Вступ до синергетики

Коливання у хімічних реакціях. Автоколивання. Осцилятор Ван-дер-Поля. Граничний цикл та умови його появи. Солітонне рішення рівняння Кортевега де Вриза. Фрактали і хаотизація поведінки динамічної системи. Топологія фазового портрету динамічної системи. Локальні співвідношення еквівалентності Індекси Пуанкаре. Біфуркації. Теорема Гленсдорфа-Пригожина.

Тема 5. Елементи фізичної кінетики.

Функція розподілу в n -просторі. Густина вірогідності переходу та її зв'язок із функцією розподілу. Принцип детальної рівноваги. Рівняння Смолуховського. Рівняння кінетичного балансу. Кінетичне рівняння Больцмана.

Модуль 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. Корреляція 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

Міцелютворення 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.

4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин				
	Денна форма				
	Усього	у тому числі			
		л	п	лаб	інд
Модуль 1					
Тема 1		1		1	23
Тема 2		1		1	23
Тема 3		1		2	23
Тема 4		2		2	23
Тема 5		1		–	22
Разом за модулем 1	126	6		6	114
Модуль 2					
Тема 6		3		–	19
Тема 7		3		–	19
Тема 8		3		2	19
Тема 9		3		2	19
Тема 10		2		2	19
Тема 11		2		–	19
Разом за модулем 2	126	6		6	114
Усього годин	252	12		12	228

5. Теми лабораторних робіт

№ теми	Назва теми	Кількість годин
1	Розрахунки модельних динамічних систем	1
2	Моделювання дифузійних процесів у розчинах	1
3	Визначення характеру та стійкості особливих точок систем хімічних реакцій	2
4	Аналіз можливості появи граничних циклів у динамічних системах, що моделюють складні реакції у розчинах	2
8	Дослідження сольового ефекту у кінетиці реакції, що перебігає у розчині	2
9	Вивчення впливу розчинника на швидкість реакції у розчині	2
10	Міцелярні ефекти у кінетиці реакцій	2
	Всього:	12

6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	ср	пір
Тема 1. Динамічні системи та їх еволюція	23	
Тема 2. Стаціонарні точки двовимірної динамічної системи	23	
Тема 3. Лінійна нерівноважна термодинаміка	23	
Тема 4. Вступ до синергетики	23	
Тема 5. Елементи фізичної кінетики	22	
Тема 6. Формальна кінетика	19	
Тема 7. Теоретичні уявлення хімічної кінетики	19	
Тема 8. Сольові ефекти у кінетиці реакцій у розчинах	19	
Тема 9. Вплив розчинника на швидкість реакцій у розчинах	19	
Тема 10. Міцелярні ефекти у кінетиці реакцій у розчинах	19	
Тема 11. Кінетика ферментативних реакцій	19	
Всього:	228	

7. Методи навчання

Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота.

8. Методи контролю

Написання контрольних робіт за основними темами дисципліни, екзамен.

9. Розподіл балів, які отримують студенти

№	Вид учбової діяльності	Максимальна рейтингова оцінка
1	Контрольні роботи за темами першого модулю	30
3	Контрольна робота за темами другого модулю	15
2	Виконання лабораторних робіт другого модулю	15
4	Екзамен	40
Всього		100

Співвідношення рейтингових балів та оцінок

Кількість балів за 100 бальною шкалою	Оцінка в ECTS	Оцінка за вітчизняною шкалою
90-100	A	відмінно
80-89	B	добре
70-79	C	добре
60-69	D	задовільно
50-59	E	задовільно
<50	FX	незадовільно

10. Рекомендована література

Модуль 1.

Базова

1. Черановский В.О. Элементы термодинамики и кинетики неравновесных процессов. – Харьков, ХНУ, 2003. 40 с.
2. Анищенко В.С. Динамические системы. Соросовский образовательный журнал, 2002. <http://www.issep.rssi.ru/journal/>
3. Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С.Э. Теория колебаний. – М.: Наука, 1981. 568 с.
4. Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. М.: Наука, 1972. 399 с.

Допоміжна

1. Кудрявцев И.К. Химические нестабильности. М.: Изд. МГУ, 1987. 255 с.
2. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф Т.1 – М.: Мир, 1984. – 350 с.
3. Трубецков Д.И. Введение в синергетику. Хаос и структуры. М.: УРСС. 2004. 235 с.
4. И. Пригожин, Д. Кондепуди Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002. 461 с.

Модуль 2.

Базова

1. Wright M.R. An introduction to chemical kinetics. John Wiley & Sons, 2004. 441 p.
2. Khan M.N. Micellar catalysis. CRC Press, 2007. 482 p.
3. Reichardt Chr., Welton T. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry. 4-th ed. WILEY-VCH, 2011. 692 p.
4. Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983. 528 с.

Допоміжна

1. Connors K.A. Chemical kinetics. The study of reaction rates in solutions. VCH Publishers, 1990. 480 p.
2. Райхардт К. Растворители и эффекты среды в органической химии. М.: Мир, 1991. 783 с.
3. Глесстон Г., Лейдлер К., Эйринг Г. Теория абсолютных скоростей реакций. М.: Изд-во иностранной литературы, 1948. 583 с.
4. Мелвин-Хьюз Е.А. Равновесие и кинетика реакций в растворах. М.: Химия, 1975. 472 с.
5. Луци А., Чубар Б. Солевые эффекты в органической и металлоорганической химии. М.: Мир, 1991. 376 с.
6. Энтелис С.Г., Тигер Р.П. Кинетика реакции в жидкой фазе. Количественный учет влияния среды. М.: Химия, 1973. 416 с.
7. Амис Э. Влияние растворителя на скорость и механизм химических реакций. М.: Мир, 1968. 328 с.