

**Аннотация**  
**к рабочей программе дисциплины «Введение в теорию химических реакций»**

специальность 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия  
направленность (профиль): Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения: очная

**1. Цель изучения дисциплины**

Дисциплина «Введение в теорию химических реакций» направлена на изучение и усвоение студентами теорий описания элементарного химического акта, статистических теорий мономолекулярного распада, теорий бимолекулярных реакций, а также процессов обмена энергией, необходимых для научно-исследовательской работы в области физической химии и химической физики.

Основной целью освоения дисциплины является приобретение знаний в области динамики элементарных химических реакций и описания внутримолекулярных процессов. В курсе излагаются основные сведения о методах построения поверхностей потенциальной энергии, их структуре и особых точках. Изучаются статистические теории мономолекулярных реакций, рассматриваются неадиабатические переходы и способы их описания – модель Ландау-Зинера и переходы в областях конических пересечений. Рассматриваются экспериментальные данные по прохождению конической области. Излагаются процессы обмена энергией в столкновениях, в том числе теория Ландау-Теллера. Даются основные представления о возникновении хаоса в элементарном акте.

**2. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Введение в теорию химических реакций» входит в вариативную часть образовательной программы (Б1.В.ДВ.1.19) и изучается в 8 семестре.

Для изучения дисциплины «Введение в теорию химических реакций» необходимы знания в объёме университетских курсов общей физики, квантовой механики, строения вещества, химической кинетики и комплексного анализа, в том числе теории вычетов для вычисления интегралов. Курс «Введение в теорию химических реакций» является необходимым для успешной работы в научно-исследовательских лабораториях в области физической химии и химической физики и изучения элементарных процессов в газовой фазе.

**3. Планируемые результаты обучения по дисциплине**

Индикатор компетенции	Результаты обучения по дисциплине
<b>С-ОПК-1.</b> Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных («в стекле» и « <i>in silico</i> ») работ химической направленности	
<b>С-ОПК-1.1.</b> Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	- умеет анализировать и обобщать теоретические данные; - имеет опыт анализа постановки и результатов экспериментов по химической кинетике/химической физике
<b>С-ОПК-1.3.</b> Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных и собственных	– анализирует результаты экспериментов/журнальных публикаций и соотносит их с основными представлениями изученных теорий; – применяет полученные знания в научно-исследовательской работе по изучению элементарного акта.

экспериментальных работ химической направленности	
<b>С-ОПК-5.</b> Способен использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	
<b>С-ОПК-5.1.</b> Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности	<ul style="list-style-type: none"> <li>– знает и использует основные информационные базы данных по константам элементарных реакций;</li> <li>– использует информационные ресурсы, стандартизирующие основные определения терминов в химии.</li> </ul>
<b>С-ПК-1.</b> Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	
<b>С-ПК-1.1.</b> Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий НИР или НИОКР	– выбирает последовательность действий при анализе экспериментальных данных для получения адекватного соответствия выбираемой модели
<b>С-ПК-2.</b> Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук, способен к анализу и обобщению отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования	
<b>С-ПК-2.2.</b> Анализирует и обобщает отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования в выбранной области химии (химической технологии)	<ul style="list-style-type: none"> <li>– способен ставить задачи поиска и расчета адекватных моделей элементарного акта, исходя из литературных данных;</li> <li>– составляет обзоры литературных результатов по тематике элементарного акта.</li> </ul>
<b>С-ПК-3.</b> Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и/или продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	
<b>С-ПК-3.1.</b> Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными	<ul style="list-style-type: none"> <li>– критически анализирует результаты литературные данные и соотносит их с основными теоретическими представлениями;</li> <li>– применяет полученные знания в научно-исследовательской теоретической или экспериментальной работе по изучению элементарного акта.</li> </ul>
<b>С-ПК-3.2.</b> Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического	<ul style="list-style-type: none"> <li>– выбирает тематику работы на основании приобретенных знаний и предсказывает перспективные направления исследований, в том числе в беседах с научным руководителем;</li> <li>– анализирует результаты смежных наук с целью использования аналогий при планировании химического эксперимента</li> </ul>

применения полученных результатов	
---	--

#### 4. Трудоемкость дисциплины, вид учебной деятельности и форма аттестации

Трудоемкость дисциплины – 2 з.е. (72 ч)

Форма итоговой аттестации: 8 семестр – экзамен.

№	Вид деятельности	Семестр 8, час.
1	Лекции	32
2	Занятия в контактной форме, из них:	36
3	аудиторных занятий	32
4	консультаций	2
5	промежуточная аттестация	2
6	Самостоятельная работа	36
7	Всего	72

#### 5. Содержание дисциплины

- Раздел 1. Вариационный принцип, адиабатическое приближение, поверхности потенциальной энергии.
- Раздел 2. Пересечения и антипересечения ППЭ, конические пересечения.
- Раздел 3. Теория активированного комплекса и принцип детального равновесия.
- Раздел 4. Статистические теории мономолекулярных реакций.
- Раздел 5. Обмен энергией в столкновениях. Теория Ландау–Теллера.
- Раздел 6. Стохастические явления в элементарном акте.