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

КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЇ 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"

хімічного факультету

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу

Харків – 2014

Робоча програма навчальної дисципліни „ Прогнозування поведінки екосистем та кінетика процесів у розчинах ” для студентів за напрямом підготовки 0703 хімія, спеціальністю 8.070301 хімія.

Розробники:

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

Єльцов Сергій Віталійович к.х.н., доцент кафедри фізичної

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри фізичної хімії

Протокол № ___ від “ ___ ” _____ 2014 р.

Завідувач кафедри

Мчедлов-Петросян М.О.

“ ___ ” _____ 2014 р.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри прикладної хімії

Протокол 8 від “ 24 ” 04 _____ 2014 р.

Завідувач кафедри

Чебанов В. А.

“ ___ ” _____ 2014 р.

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 10 від “ 14 ” 05 _____ 2014 р.

“ ___ ” _____ 2014 р.

Голова методичної комісії хімічного факультету

Юрченко О.І.

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів: 7	Напрямок підготовки: 0703 хімія	денна форма навчання, нормативна дисципліна
Модуль: 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: 32 години
		Лабораторні заняття: 64 години
	Самостійна робота: 156 годин	
	Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	Вид контролю: екзамен

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

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

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: основи фізичної та хімічної кінетики і методи їх застосування для вирішення проблем моделювання екосистем та фізико-хімічних процесів у розчинах.

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

3. Програма навчальної дисципліни

Модуль 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.

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

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.

4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин				
	Денна форма				
	Усього	у тому числі			
л		п	лаб	інд	ср
Модуль 1					
Тема 1	27	3		8	16
Тема 2	27	3		8	16
Тема 3	27	3		8	16
Тема 4	27	4		8	15
Тема 5	18	3		–	15
Разом за модулем 1	126	16		32	78
Модуль 2					
Тема 6	24	3		8	13
Тема 7	16	3		–	13
Тема 8	24	3		8	13
Тема 9	24	3		8	13
Тема 10	23	2		8	13
Тема 11	15	2		–	13
Разом за модулем 2	126	16		32	78
Усього годин	252	32		64	156

5. Теми лабораторних робіт

№ 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

6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин
------------	-----------------

	ср	пір
Тема 1. Динамічні системи та їх еволюція	16	
Тема 2. Стаціонарні точки двовимірної динамічної системи	16	
Тема 3. Лінійна нерівноважна термодинаміка	16	
Тема 4. Вступ до синергетики	15	
Тема 5. Елементи фізичної кінетики	15	
Тема 6. Формальна кінетика	13	
Тема 7. Теоретичні уявлення хімічної кінетики	13	
Тема 8. Сольові ефекти у кінетиці реакцій у розчинах	13	
Тема 9. Вплив розчинника на швидкість реакцій у розчинах	13	
Тема 10. Міцелярні ефекти у кінетиці реакцій у розчинах	13	
Тема 11. Кінетика ферментативних реакцій	13	
Всього:	156	

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 металло-органической 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.