

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Кемеровский государственный университет»
Кафедра «Химии твердого тела»



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по НРиИ
К.Е. Афанасьев
_____ 2012 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ОД.А.06.01 «Цепные твердофазные реакции при стационарных и
импульсных воздействиях»

для аспирантов специальности
02.00.04 – Физическая химия

Квалификация (степень)
Кандидат наук

Кемерово 2012 г.

Рабочая программа составлена на основании паспорта научной специальности 02.00.04 - физическая химия, в соответствии с Программой-минимум кандидатского экзамена по специальности 02.00.04 – «Физическая химия» по физико-математическим и химическим наукам, утвержденной приказом Министерства образования и науки РФ №274 от 08.10.2007 г., и учебным планом КемГУ по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

Составитель рабочей программы: Каленский А. В., профессор кафедры «Химия твердого тела», доктор физико-математических наук.

Рабочая программа дисциплины
обсуждена на заседании кафедры химии твердого тела

Протокол № 10 от « 31 » мая 201 2 г.
Зав. кафедрой ХТТ _____ Захаров Ю.А.
(подпись) Ф. И. О

Рабочая программа утверждена на заседании ученого совета химического факультета
протокол № 11 от 28.05.2012

Декан химического факультета

 А.А. Мороз

Начальник отдела аспирантуры и докторантуры

 М.И. Рябова

« 25 » 06 2012 г.

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Цепные твердофазные реакции при стационарных и импульсных воздействиях» является углубленное изучение теоретических и прикладных основ физической химии, необходимых для самостоятельной научно-исследовательской деятельности аспиранта, требующей широкой фундаментальной подготовки в современных направлениях техники и технологии.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Цепные твердофазные реакции при стационарных и импульсных воздействиях» относится к циклу дисциплин по выбору аспиранта.

Курс «Цепные твердофазные реакции при стационарных и импульсных воздействиях» является разделом физической химии, изучает природу химической связи, реакционную способность, строение и закономерности медленного и взрывного разложения энергетических материалах. Объектами изучения являются энергетические материалы и образцы на их основе.

3. Требования к знаниям и умениям

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

Знать:

- основные понятия химической кинетики;
- особенности кинетики сложных химических реакций, кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций, квазистационарное приближение;
- основные аспекты применения энергетических материалов.

Уметь:

- анализировать вопросы, связанные с физико-химическими методами исследования строения и реакционной способности энергетических материалов;
- моделировать физико-химические процессы механизмов неразветвленных и разветвленных цепных реакций.

Владеть:

- основами применения расчетных методов к исследованию кинетики сложных химических реакций;
- общими основами применения физико-химических методов в исследовании энергетических материалов.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа.

4.1 Лекционные (теоретические) занятия

№ раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Трудоемкость, часов
1	2	3	4
1.	Основные понятия химической кинетики.	Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.	2
2.	Феноменологическая кинетика сложных химических реакций.	Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и	2

		последовательных реакций. Квазистационарное приближение.	
1	2	3	4
3.	Элементарные акты химических реакций	Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией, время релаксации в молекулярных системах..	2
4.	Цепные реакции	Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции.	2
5.	Цепные твердофазные реакции при стационарных воздействиях	Фото- и радиационно-стимулированные процессы в энергетических материалах. Спектральные, люкс-амперные и кинетические закономерности процессов. Явления фотоусталости. Участие малых кластеров металла в рекомбинационных процессах. Механизм автоингибирования разложения продуктами реакции.	2
6.	Цепные твердофазные реакции при импульсных воздействиях	Стадии зарождения, развития и обрыва цепи. Экспериментальные методы изучения закономерностей быстропротекающих реакций. Существующие модели разветвленных цепных реакций импульсного инициирования энергетических материалов. Роль диффузии, размерные эффекты твердофазных цепных реакций. Определение подвижности электронных возбуждений. Передача энергии реакции кристаллической решетке.	2
Итого			12

4.2. Практические (семинарские) занятия - нет

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость, часов
1	2	3	4
1.	Цепные твердофазные реакции при стационарных воздействиях	Запись механизма фото- и радиационно-стимулированных процессов в энергетических материалах. Моделирование процессов с учетом влияния малых кластеров металла на рекомбинационные процессы. Определение условий реализации колебательных и самоускоряющихся режимов протекания реакции. Освоение основ применения расчетных методов к исследованию кинетики сложных химических реакций	4
2.	Цепные твердофазные реакции при	Модельные подходы к исследованию физико-химических процессов в энергетических	4

импульсных воздействий	материалов инициированных импульсным воздействием различной природы, моделирование этих процессов в рамках существующих моделей разветвленных цепных реакций импульсного инициирования энергетических материалов, учет диффузии переносчиков цепи.	
Итого		8

4.3. Лабораторные занятия - нет

4.4. Самостоятельная работа аспиранта

Наименование раздела дисциплины	Вид самостоятельной работы	Трудоемкость, часов
1	2	3
1. Химическая связь в энергетических материалах	Физико-химические методы исследования строения и реакционной способности энергетических материалов. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	8
2. <i>Основные понятия химической кинетики</i>	Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	8
3. Процессы переноса вещества, заряда и энергии в твердых телах	Процессы переноса вещества, заряда и энергии в твердых телах. Взаимосвязь процессов разложения в подрешетках. Условия стационарного разложения. Влияние начальных условий (начальной нестехиометрии) на кинетику разложения. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	8
4. Теория активных столкновений.	Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор. Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	8
5. Цепные твердофазные реакции при стационарных воздействиях	Запись механизма фото- и радиационно-стимулированных процессов в энергетических материалах. Моделирование процессов с учетом влияния малых кластеров металла на рекомбинационные процессы. Определение условий реализации колебательных и самоускоряющихся режимов протекания реакции. Освоение основ применения расчетных	8

	методов к исследованию кинетики сложных химических реакций. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	
1	2	3
6. Цепные твердофазные реакции при импульсных воздействиях	Модельные подходы к исследованию физико-химических процессов в энергетических материалах инициированных импульсным воздействием различной природы, моделирование этих процессов в рамках существующих моделей разветвленных цепных реакций импульсного инициирования энергетических материалов, учет диффузии переносчиков цепи. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	8
7. Применение энергетических материалов	Применение энергетических материалов в горной промышленности, тушении пожаров и т.д. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	4
Итого		52

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

№ п/п	Библиографическое описание рекомендуемого источника литературы	Шифр библиотеки КемГУ	Планируемое число пользователей	Число экз., выделяемое библиотекой
1	2	3	4	5
	Основная			
1.	Ярославцев А.Б. Химия твердого тела [Текст] М. : Научный мир , 2009 .- 327 с.	521 Я 76	7	10
2.	Захаров Ю.А., Рябых С.М., Сечкарев Б.А. Химия твердого тела: учеб. пособие [Текст] ; Кемеровский гос. ун-т, Кафедра химии твердого тела .- Кемерово : Кузбассвуиздат , 2006 .- 123 с.	Г521я73 З-38	7	10
	Методические разработки кафедры			
3.	В. Г. Кригер, А. В. Каленский, М. В. Ананьева, Боровикова А. П., Звекон А. А. Численные методы и программирование. Методическое пособие для студентов химического факультета КемГУ. [Текст] : - Кемерово: КемГУ. - 2008. - 63 с.	М 1528 Ч-67	7	25

Дополнительная литература

- 1 Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела. / Ч. Киттел. – М. – 1978. – 792 с.
- 2 Рывкин, С. М. Фотоэлектрические явления в полупроводниках. / С. М. Рыбкин. – М.: Наука. – 1963. – 495 с.
- 3 Эммануэль, Н.М. Курс химической кинетики. / Н. М. Эммануэль, Д. Г. Кнорре. – М.: Высшая школа. – 1974. – 495 с.
- 4 Барре, П. Кинетика гетерогенных процессов. / П. Борре. – М.: Мир. – 1976. – 400 с.
- 5 Смит, Р. Полупроводники. / Р. Смит – М.: Мир. – 1982. – 562 с.
- 6 Джеймс, Т. Теория фотографического процесса. / Т. Джеймс. – Л: Химия. – 1980. – 672 с.
- 7 Крегер, Ф. Химия несовершенных кристаллов. / Ф. Крегер – М.: Мир. –1969. – 654 с.

- 8 Николис, Г. Самоорганизация в неравновесных системах. / Г. Николис, И. Пригожий. – М. : Мир. – 1979. – 512 с.
- 9 Бутягин, П. Ю. Химическая физика твердого тела. / П. Ю. Бутягин. – М.: МГУ. – 2007. – 310 с.
- 10 Вест, А. Химия твердого тела. Теория и приложения: 2-х ч. / А. Вест. – М.: Мир. – 1988. Ч. 1. – 588 с. , Ч. 2 – 336 с.
- 11 Вест, А. Химия твердого тела. Теория и приложения: 2-х ч. / А. Вест. – М.: Мир. – 1988. Ч. 2 – 336 с.
12. Фистуль, В. И. Физика и химия твердого тела, т. 1. / В. И. Фистуль. – М.: Metallurgia. – 1995. – 480 с.
13. Фистуль, В. И. Физика и химия твердого тела, т. 2. / В. И. Фистуль. – М.: Metallurgia. – 1995. – 320 с.
- 14 Боуден, Ф. Быстрые реакции в твердых веществах. / Ф. Боуден, А. Иоффе. – М.: Мир. – 1969. – 247 с.
- 15 Янг, Д. Кинетика разложения твердых веществ. / Д. Янг. – М.: Мир. – 1969. – 263 с.

5.2. Информационное обеспечение дисциплины

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Учебные материалы химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/inorg.html>.
2. Википедия, химия твердого тела http://en.wikipedia.org/wiki/Solid-state_chemistry.
3. Учебные материалы сайта университета г. Огайя, химия твердого тела http://www.chemistry.ohio-state.edu/~woodward/chem_754.htm ()
4. Электронная библиотека РФФИ <http://elibrary.ru/defaultx.asp>
5. Сайт о химии для химиков <http://xumuk.ru>
6. Открытый доступ к вузовской электронной библиотеке на <http://e-lib.kemtipp.ru/> на платформе Web-ИРБИС-64.2009, ЭБС «Инфра-М» <http://www.znanium.com/> (договор №130 эбс от 02.11.2011), «Лань» <http://e.lanbook.com/> (контракт 1/11-2011 от 07.11.2011), к виртуальному читальному залу Электронной Библиотеки Диссертаций РГБ <http://www.diss.rsl.ru/>, к удаленным сетевым ресурсам консорциума НЭИКОН <http://www.neicon.ru/>