

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Кафедра общей и физической химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А.Маракаев

« 20 » мая 2021 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**«Методы исследования механизма химических реакций»**

Направление подготовки  
04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль)  
«Физическая химия»

Прием 2021 г.

Форма обучения очная

Программа рассмотрена  
на заседании кафедры общей и физической химии  
от 14 мая 2021 г., протокол № 8

Зав. кафедрой  Е.М. Плисс

Ярославль

### 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Методы исследования механизма химических реакций» являются формирование у обучающихся системы знаний и представлений о различных методах исследования кинетики и установления механизма химических реакций с применением современного аналитического оборудования.

### 2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Дисциплина «Методы исследования механизма химических реакций» относится к разделу «Вариативная часть» и является дисциплиной по выбору (Б1.В.ДВ.1.2).

Дисциплина представляет собой изучение кинетических методов, позволяющих устанавливать механизмы протекания химических реакций, а также получать набор кинетических данных необходимый для полного описания данного процесса. Для изучения данной дисциплины необходимы «входные» знания, умения, полученные в процессе обучения по программам специалитета или бакалавриата–магистратуры:

- знание основ физической химии, органической химии, квантовой химии;
- владение современными физико-химическими методами исследования.

Дисциплина является предшествующей для выполнения диссертационной работы.

### 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине – знания, умения, навыки и (или) опыт деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций и обеспечивающие достижение планируемых результатов освоения программы аспирантуры, и критерии их оценивания

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

#### Профессиональные компетенции:

- способностью творчески использовать в научной и производственно технологической деятельности фундаментальные знания по физической химии, применять методические навыки исследования механизмов химических реакций с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств (ПК-1).

Код компетенции	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения		
		Пороговый уровень	Продвинутый уровень	Высокий уровень
ПК-1	<b>Знать:</b> – теоретические основы методов исследования кинетики и установления механизма химических реакций; – особенности и области применения данных методов в рамках протекающих химических процессов; <b>Уметь:</b> – с использованием кинетических методов получать массивы кинетических данных для подробного описания протекающих химических процессов; <b>Владеть:</b> – навыками исследования кинетики и	1. Знает основные методы исследования кинетики и установления механизма химических реакций, может сформулировать теоретические положения, лежащие в основе данных методов. 2. Знает области применения методов, может выбрать метод исследования кинетики для конкретного процесса. 3. Умеет получать первичную кинетическую информацию при проведении кинетического эксперимента по имеющейся методике. 4. Владеет базовыми навыками исследования макроскопической кинетики сложных процессов, но испытывает затруднения при исследовании детального	–	–

	механизма химических реакций. – навыками обработки экспериментальных кинетических данных.	механизма процесса. 5. Владеет базовыми навыками обработки экспериментальных кинетических данных: определение порядков реакции, констант скорости, энергий активации процесса.		
--	--	--	--	--

#### 4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 ЗЕ, 108 акад.ч.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий и их трудоемкость (в академических часах)					Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			лекции	практические	лабораторные	консультации	самостоятельная работа	
1.	Продукты химической реакции и ее механизм	2	1				20	Собеседование
2.	Методы исследования механизма цепных реакций	2	2			1	35	Собеседование
3.	Методы исследования быстрых реакций	2	2			1	30	Собеседование
4.	Неизотермические методы исследования кинетики	2	1				15	Собеседование, защита реферата
	<b>Всего</b>		<b>6</b>			<b>2</b>	<b>100</b>	<b>Зачет</b>

#### Содержание разделов дисциплины

##### 1. Продукты химической реакции и ее механизм.

Стабильные продукты и механизм реакции. Активные промежуточные частицы и способы их идентификации. Стереохимия и механизм реакции. Применение изотопов в химической кинетике.

Кинетика медленной реакции. Методы исследования кинетики газофазных и жидкофазных реакций. Химические и инструментальные методы контроля за протеканием реакции.

##### 2. Методы исследования механизма цепных реакций.

Метод акцепторов свободных радикалов. Изучение распада инициаторов на радикалы. Кинетические методы исследования ингибиторов окисления. Метод смещения пределов цепного воспламенения. Методы изучения гомогенно-гетерогенных реакций.

Методы исследования механизма окисления органических соединений. Типы реакторов для проведения жидкофазного окисления. Кинетический и диффузионный режимы окисления.

Газометрические методы изучения реакций окисления. Изучение кинетики реакций окисления методом хемилюминесценции. Методы исследования кинетики накопления продуктов окисления. Кинетические методы изучения макроскопического механизма реакций окисления. Применение метода стационарных концентраций к процессу окисления органических соединений.

Методы измерения скоростей образования свободных радикалов при жидкофазном окислении. Методы измерения параметров окисляемости органических соединений.

Методы изучения элементарных реакций пероксидных радикалов при жидкофазном окислении. Методы идентификации радикалов, образующихся в жидкофазном окислении.

### *3. Методы исследования быстрых реакций.*

Метод конкурирующих реакций. Методы остановки реакции. Проведение реакций при низких температурах. Струевые методы. Постоянная, ускоренная и остановленная струи.

Метод фотохимического преддействия и последствия. Секторный метод (метод прерывистого освещения). Флуоресцентный метод.

Импульсные методы. Импульсный фотолиз. Лазерный фотолиз. Импульсная спектроскопия. Импульсный радиолиз. Элементарные процессы при облучении электронами. Релаксационные методы.

Спектроскопические методы исследования быстрых реакций. Метод ЯМР. Метод ЭПР. Лазерный магнитный резонанс. Кинетическая резонансно-флуоресцентная спектроскопия.

### *4. Неизотермические методы исследования кинетики.*

Адиабатическое сжатие газа. Тепловой взрыв как метод неизотермической кинетики. Горение. Определение кинетического уравнения по кинетическим кривым разогрева. Термографический метод. Другие неизотермические методы.

## **5. Образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

**Академическая лекция** (или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов.

## **6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень лицензионного программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости).**

В процессе осуществления образовательного процесса используются:

- операционные системы семейства Microsoft Windows;
- программы Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome.

## **7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимых для освоения дисциплины**

### **а) основная литература**

1. Плисс Е. М. Кинетика гомолитических жидкофазных реакций: учеб. пособие для студентов, обучающихся по направлению Химия. / Е. М. Плисс, Е. Т. Денисов; Яросл. гос. ун-т им. П. Г. Демидова, Науч.-метод. совет ун-та; Учебно-методическое объединение по классическому университетскому образованию. – Ярославль: ЯрГУ, 2015. – 310 с.  
<http://www.lib.uni Yar.ac.ru/edocs/iuni/20150304.pdf>

2. Физико-химические методы анализа : учебное пособие для вузов / В. Н. Казин [и др.] ; под редакцией Е. М. Плисса. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 201 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-14964-7. – Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. – URL: <https://urait.ru/bcode/485733>

#### **б) дополнительная литература**

1. Плисс Е. М. Применение спектральных методов для исследования механизма химических реакций [Электронный ресурс]: метод. указания для студентов, обучающихся по направлению Химия. / Е. М. Плисс, И. В. Тихонов, А. И. Русаков; Яросл. гос. ун-т им. П. Г. Демидова, Науч.-метод. совет ун-та – Ярославль: ЯрГУ, 2013. – 74 с.  
<http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20130303.pdf>

#### **в) ресурсы сети «Интернет»**

1. Научная библиотека ЯрГУ им. П.Г. Демидова (доступ к лицензионным современным библиографическим, реферативным и полнотекстовым профессиональным базам данных, в том числе международным реферативным базам данных научных изданий, и информационным справочным системам: реферативные базы данных Web of Science, Scopus; научная электронная библиотека eLIBRARY.RU; электронно-библиотечные системы Юрайт, Проспект, издательства «ЛАНЬ»; базы данных Polpred.com, «Диссертации РГБ (авторефераты)», ProQuest Dissertations and Theses Global; электронные коллекции Springer; издательство Elsevier на платформе ScienceDirect; журналы Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS), Nature Publishing Group, Американского химического общества Core Package Web Edition (American Chemical Society – ACS) и др.) [http://www.lib.uniyar.ac.ru/content/resource/net\\_res.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/content/resource/net_res.php)

### **8. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории (ноутбук и/или персональный компьютер, мультимедиа-проектор, настенный проекционный экран).

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока обучающихся.

Автор:

Профессор, зав. кафедрой  
общей и физической химии, д.х.н.



Плисс Е.М.

**Приложение № 1 к рабочей программе дисциплины  
«Методы исследования механизма химических реакций»**

**Оценочные средства для проведения текущей и/или промежуточной аттестации  
аспирантов по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания или иные материалы,  
необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности,  
характеризующих этапы формирования компетенций**

**1.1 Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации**

**Вопросы к зачету**

1. Стабильные продукты химической реакции и ее механизм.
2. Активные промежуточные частицы и способы их идентификации.
3. Стереохимия и механизм реакции.
4. Применение изотопов в химической кинетике.
5. Кинетика медленных химических реакций.
6. Методы исследования медленных газофазных реакций.
7. Методы исследования медленных жидкофазных реакций.
8. Химические методы контроля за протеканием реакции.
9. Инструментальные методы контроля за протеканием реакции.
10. Метод конкурирующих реакций.
11. Методы остановки реакции.
12. Метод проведения быстрых реакций при низких температурах.
13. Струевые методы изучения быстрых реакций.
14. Метод фотохимического преддействия и последствия.
15. Метод прерывистого освещения.
16. Флуоресцентный метод изучения быстрых реакций.
17. Импульсные методы изучения быстрых реакций.
18. Релаксационные методы изучения быстрых реакций.
19. Изучение быстрых реакций методом ЯМР.
20. Изучение быстрых реакций методом ЭПР.
21. Лазерные методы изучения быстрых реакций.
22. Метод акцепторов свободных радикалов (метод ингибиторов).
23. Изучение распада инициаторов на радикалы.
24. Кинетические методы исследования ингибиторов окисления.
25. Метод смещения пределов цепного воспламенения.
26. Методы изучения гомогенно-гетерогенных реакций.
27. Газометрические методы изучения реакций окисления.
28. Химические методы анализа продуктов окисления.
29. Полярографический анализ продуктов окисления.
30. Хроматографические методы анализа продуктов окисления.
31. Кинетические методы изучения макроскопического механизма реакций окисления.
32. Хемилюминесценция как метод изучения кинетики и механизма реакций окисления.
33. Методы измерения скоростей образования свободных радикалов при жидкофазном окислении.
34. Методы изучения элементарных реакций перекисных радикалов в жидкофазном окислении углеводородов.
35. Методы измерения относительных констант скоростей реакций перекисных радикалов с ингибиторами.
36. Неизотермические методы изучения кинетики: адиабатическое сжатие газа.

37. Неизотермические методы изучения кинетики: тепловой взрыв.
38. Определение кинетического уравнения по кинетическим кривым разогрева.
39. Термографический метод исследования кинетики.

### **Правила выставления оценки на зачете**

Устный ответ на зачете оценивается по двухбалльной системе.

Отметка «зачтено» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- аспирант свободно владеет научной терминологией;
- ответ аспиранта структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов по вопросу билета;
- логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ иллюстрируется примерами, в том числе из собственной практики;
- аспирант демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию.

Отметка «не зачтено» ставится, если:

- обнаружено незнание или непонимание аспирантом сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов билета не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые аспирант не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию экзамена аспирант затрудняется дать ответ или не дает верных ответов.

### **1.2 Контрольные задания и иные материалы, используемые в процессе текущей аттестации**

Текущий контроль осуществляется путем собеседования, которое проводится в соответствии с перечнем вопросов к зачету. Также для самостоятельной работы аспирантам предлагается написание реферата по одной из тем.

#### **Темы рефератов**

1. Методы определения элементарных констант скоростей реакций рекомбинации и диспропорционирования радикалов.
2. Применение УФ-спектроскопии к исследованию кинетики химических процессов.
3. Применение спектроскопии ЭПР к исследованию кинетики химических процессов.
4. Калориметрический метод исследования кинетики полимеризации.
5. Полярография как метод анализа продуктов реакций окисления.
6. Применение ингибиторов для исследования механизма гомолитических реакций.
7. Изотопный метод исследования механизма химических процессов.
8. Применение спиновых ловушек в химической кинетике.
9. Методы исследования кинетики окисления биологических образцов *in vitro*.
10. Применение импульсного фотоллиза и импульсного радиоллиза в химической кинетике.

#### **Правила выставления оценки по результатам собеседования**

- *Отлично* выставляется, если продемонстрированы знание вопроса и самостоятельность мышления, ответ соответствует требованиям правильности, полноты и

аргументированности.

- *Хорошо* выставляется при неполном, недостаточно четком и убедительном, но в целом правильном ответе.

- *Удовлетворительно* выставляется, если обучающийся отвечает неконкретно, слабо аргументировано и не убедительно, хотя и имеется какое-то представление о вопросе.

- *Неудовлетворительно* выставляется, если обучающийся отвечает неправильно, нечетко и неубедительно, дает неверные формулировки, в ответе отсутствует какое-либо представление о вопросе.

### **Правила оценивания реферата**

- *Отлично* выставляется, если реферат оформлен с учётом всех требований, подготовлен кратко, научно, логично, в дискуссии по реферату обучающийся может ответить на все вопросы оппонентов.

- *Хорошо* выставляется, если реферат оформлен с учётом всех требований, имеются замечания по подготовке доклада к реферату, в дискуссии по реферату обучающийся ответил на часть вопросов оппонентов.

- *Удовлетворительно* выставляется, если реферат оформлен с замечаниями по требованиям, имеются замечания по подготовке доклада к реферату, в дискуссии по реферату обучающийся не ответил на вопросы оппонентов.

- *Неудовлетворительно* выставляется, если реферат оформлен с замечаниями по требованиям, имеются замечания по подготовке доклада к реферату, либо доклад отсутствует, в дискуссии по реферату обучающийся не ответил на вопросы оппонентов, либо отказался участвовать в дискуссии, реферат отсутствует.



## **Приложение № 2 к рабочей программе дисциплины «Методы исследования механизма химических реакций»**

### **Методические указания для аспирантов по освоению дисциплины**

Основной формой работы аспирантов по освоению дисциплины «Методы исследования механизма химических реакций» является самостоятельная работа. Это связано с ограниченностью времени, отводимого на аудиторные занятия. Базовые понятия и положения дисциплины излагаются преподавателем на лекциях с применением электронных презентаций. Это связано с тем, что изучаемый курс содержит большое количество теоретической информации, рисунков и схем. Лекционный курс предоставляется аспиранту в электронном виде. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо самостоятельно прорабатывать и дополнять информацией из рекомендуемой учебной литературы и интернет-ресурсов.

Практические и лабораторные занятия в рамках данного курса не предусмотрены, поэтому разбор изучаемого материала происходит в рамках лекций и консультаций. При этом происходит закрепление лекционного материала путем применения его к конкретным задачам дисциплины. Основная цель рассмотрения практических примеров – помочь усвоить методы планирования кинетического эксперимента и обработки его результатов с целью установления механизма процесса.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала и приобретенных практических навыков в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде контрольной работы и защиты реферата. Также проводятся консультации (при необходимости) по разъяснению материала, который вызвал затруднения при самостоятельном изучении. В конце семестра аспиранты сдают зачет, который выставляется по результатам устного собеседования при условии успешного прохождения мероприятий текущей аттестации.

### **Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов по дисциплине**

В качестве учебно-методического обеспечения рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе № 7 данной рабочей программы.

В процессе изучения дисциплины рекомендуется использовать широкий спектр интернет-ресурсов:

**1. Учебные материалы по физической химии электронной библиотеки химического факультета МГУ** (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>). Данный сайт содержит учебные пособия и методические указания, из которых наиболее полезными в рамках данного курса являются:

Пергушов В.И. Анализ сверхтонкой структуры изотропных жидкофазных спектров ЭПР (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/epr/welcome.html>)

Разделы сборника «Экспериментальные методы химической кинетики» (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/kinetics-exp/>)

Мельников М.Я., Иванов В.Л. Экспериментальные методы химической кинетики. Фотохимия (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/photochem/welcome.html>)

### **2. Сайты издательств научных журналов и базы данных:**

eLibrary.ru – Электронная научная библиотека (<http://elibrary.ru/>)

Портал издательства RSC Publishing (<http://pubs.rsc.org/>)

Портал издательства ACS Publications (<http://pubs.acs.org/>)

Портал Wiley Online Library (<http://onlinelibrary.wiley.com/>)

Портал Scencedirect (<http://www.sciencedirect.com/>)

Портал издательства Annual Reviews (<http://www.annualreviews.org/>)

Портал SpringerLink (<http://springerlink.com/chemistry-and-materials-science/journals/>)

Портал издательства Taylor & Francis Group (<http://www.informaworld.com/>)

Портал издательства Science (<http://www.sciencemag.org/journals/>)

Портал издательства Nature (<http://www.nature.com/nature/index.html>)

База данных ВИНТИ РАН

([http://www2.viniti.ru/index.php?option=com\\_content&task=view&id=23&Itemid=100](http://www2.viniti.ru/index.php?option=com_content&task=view&id=23&Itemid=100))

База данных NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>)

База данных ChemSpider (<http://chemspider.com>)

**3. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам"** (<http://window.edu.ru/library>).

Целью создания информационной системы "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (ИС "Единое окно ") является обеспечение свободного доступа к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.

Полезными для самостоятельной работы являются следующие издания, представленные в библиотеке этого сайта:

**1) Черкасов В.К., Курский Ю.А., Кожанов К.А., Бубнов М.П., Куропатов В.А. Методы ЭПР и ЯМР в органической и элементоорганической химии. Электронное учебное пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2010. – 53 с. <http://window.edu.ru/resource/052/74052>**

(В настоящем учебном пособии рассматриваются физические основы методов электронного парамагнитного и ядерного магнитного резонанса. Описаны возможности данных методов для идентификации и установления строения органических и элементоорганических соединений. Электронное учебное пособие предназначено для студентов ННГУ, обучающихся по направлению подготовки 02010 "Химия" и специальностям 020101 "Химия", 020801 "Экология", 240306 "Химическая технология монокристаллов, материалов и изделий электронной техники", изучающих курс "Радиохимия и радиоэкология".)

Для самостоятельного подбора литературы в библиотеке ЯрГУ рекомендуется использовать:

**1. Личный кабинет** ([http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_login.php](http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_login.php)) дает возможность доступа к списку выданной в автоматизированном режиме литературы, просмотра и копирования электронных версий изданий сотрудников университета (учеб. и метод. пособия, тексты лекций и т.д.) Для работы в «Личном кабинете» необходимо зайти на сайт Научной библиотеки ЯрГУ с любой точки, имеющей доступ в Internet, в пункт меню «Электронный каталог»; пройти процедуру авторизации, выбрав вкладку «Авторизация», и заполнить представленные поля информации.

**2. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ** ([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)) содержит более 2500 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете. Доступ в сети университета, либо по логину/паролю.

**3. Электронная картотека «Книгообеспеченность»** ([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_bookreq\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_bookreq_find.php)) раскрывает учебный фонд научной библиотеки ЯрГУ, предоставляет оперативную информацию о состоянии книгообеспеченности дисциплин основной и дополнительной литературой, а также цикла дисциплин и специальностей. Электронная картотека «Книгообеспеченность» доступна в сети университета и через Личный кабинет.