АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.1.2 «Теория химических реакций»

по направлению подготовки: 04.06.01 «Химические науки»
по направленности: «Нефтехимия»
«Квалификация выпускника: ИССЛЕДОВАТЕЛЬ. ПРЕПОДАВАТЕЛЬ-ИССЛЕДОВАТЕЛЬ
Кафедра-разработчик ОПОП: ОХТ
Кафедра-разработчик рабочей программы: ОХТ

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины **«Теория химических реакций»** является:
а) формирование знаний основ теории химических реакций,
б) обучение технологии получения сведений о различных параметрах, характеризующих протекание химических реакций,
в) обучение способам применения различных подходов и методов для изучения химических реакций,
г) раскрытие сущности процессов, происходящих при протекании химических реакций

2. Содержание дисциплины **«Теория химических реакций»**

Термодинамика – феноменологическая наука. Термодинамические функции и суммы по состояниям. Начала термодинамики. Закон Гесса. Термодинамический потенциал. Определение термодинамических функций. Термохимическая кинетика.

Поверхность потенциальной энергии химической реакции. Квантово-химические представления энергии активации химической реакции.

Квантово-механическое описание процессов микромира. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Дискретность уровней энергии. Общие принципы неэмпирических методов квантово-химических расчетов ППЭ.

Координата реакции и переходное состояние. Образование и распад активированного комплекса. Термодинамический подход к рассмотрению активированного комплекса.

Возбуждение молекул. Принцип Франка-Кондона (вертикальный переход). Различные способы возбуждения молекул. Релаксация. Различные подсистемы моле-кулярной системы. Внутренняя динамика молекул и реакционная способность.

Лазеры. Особенности фемтосекундных лазеров и их экспериментальные возможности. Экспериментальные методы фемтохимии, основанные на использовании двух фемтосекундных импульсов в схеме «возбуждение-зондирование».

3. В результате освоения дисциплины аспирант должен:

1) Знать:

а) физику атомов и молекул,

б) элементы квантовой механики,

в) элементы химической термодинамики

г) основы физических методов исследования параметров и механизмов химических реакций,

д) основы компьютерных программ, используемых при расчетах путей химических реакций методами квантовой химии и молекулярной динамики

е) кинетику химических реакций.

2) Уметь:

а) проводить термодинамические оценки возможности протекания реакций и тепловых эффектов реакций,

б) проводить квантово-химические расчеты химических реакций,

в) анализировать экспериментальные данные о параметрах протекания химических реакций.

3) Владеть:

а) программами квантово-химических расчетов,

б) основными представлениями фемтохимии,

в) основами кинетики химических реакций,

г) основными представлениями квантовой химии.

Зав.каф. ОХТ Х. Э. Харлампиди