

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета
_____ А.С. Князев

» апрель 20 22 г.

Рабочая программа дисциплины

Методы неизотермической кинетики и термического анализа в гетерогенном катализе

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2021

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.В.ДВ.01.04

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

_____ А.С. Князев

Председатель УМК

_____ В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

– ПК-3. Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-1.1. Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

ИПК-1.3. Использует современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования.

ИПК-3.1. Анализирует имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производству химической продукции и предлагает технические средства для решения поставленных задач.

ИПК-3.2. Производит оценку применимости стандартных и/или предложенных в результате НИР технологических решений на применимость с учетом специфики изучаемых процессов.

2. Задачи освоения дисциплины

– Получить представление о методах нестационарной кинетики, назначении и экспериментальном оформлении методов;

– Освоить принципы выбора метода нестационарной кинетики для решения реальных практических задач, в том числе в рамках НИР;

– Научиться планировать кинетические исследования в нестационарных условиях;

– Приобрести навыки работы на хемосорбционном анализаторе, обработки и интерпретации результатов, полученных методами неизотермической кинетики при исследовании носителей и катализаторов.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы. Дисциплина входит в модуль Дисциплины (модули) по выбору 1 (ДВ.1).

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 3, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины магистранты должны иметь необходимые знания, навыки, умения и профессиональные компетенции по дисциплинам обязательной части общепрофессионального цикла: кристаллохимия, строение вещества и математический анализ; профессионального цикла: неорганическая химия, органическая химия, аналитическая химия, физическая химия, коллоидная химия, физико-химические методы анализа, вариативной части профессионального цикла: адсорбционные процессы, гетерогенный катализ, методы приготовления и исследования катализаторов учебного

плана по программе бакалавриата 04.03.01, а также знания и профессиональные компетенции по дисциплине физико-химия поверхности нанокompозитных систем.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

– лекции: 12 ч.;

– практические занятия: 20 ч.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Введение в методы нестационарной кинетики

Промежуточные соединения в катализе. Определение и классификация промежуточных соединений. Формы хемосорбции. Методы изучения структуры и химического состава промежуточных соединений. Механизмы взаимодействия реагентов с поверхностью катализатора: механизм Ленгмюра-Хиншельвуда, механизм Или-Ридила, окислительно-восстановительный механизм Марса-Ван-Кревелена. Классификация неизотермических методов.

Тема 2. Аппаратурное оформление методов неизотермической кинетики.

Аппаратурное оформление методов. Хемосорбционные анализаторы ChemiSorb 2750 и AutoChem, их использование при изучении состава и функциональных свойств поверхности твердофазных систем, а также для проведения исследований в режиме ТПО-ТПВ. Детекторы отходящих газов, их возможности и ограничения. Масс-спектрометрическое детектирование продуктов превращения.

Тема 3. Метод температурно-программированной десорбции

Метод температурно-программированной десорбции. Основные понятия и определения: десорбция, активные центры поверхности, степень заполнения поверхности, энергия активации десорбции. Кинетика десорбции: уравнение Вигнера-Поляни. Экспериментальные методы определения порядка, энергии активации десорбции и частотного фактора: влияние скорости нагрева образца на положение максимума десорбционного пика, метод одновременно определения кинетических параметров десорбции по одному десорбционному пику, ступенчатая десорбция. Кислотно-основные центры твердых тел. Применение неизотермических методов для оценки кислотно-основных центров твердых тел. Определение дисперсности металлических частиц по данным сорбционных экспериментов. Оформление экспериментальной установки (анализ схем, приводимых в литературе, сопоставление вакуумных и проточных термодесорбционных систем).

Тема 4. Температурно-программированное окисление/восстановление

Температурно-программированное окисление и температурно-программированное восстановление. Термодинамика, кинетика и механизм восстановления. Теория неизотермического восстановления и влияние параметров эксперимента. Особенности реализации методов ТПО и ТПВ.

Тема 5. Температурно-программированная реакция. Метод импульса.

Температурно-программированная реакция. Экспериментальные особенности метода и примеры применения. Теоретические основы импульсного метода. Особенности протекания каталитических реакций в импульсном режиме. Импульсный нехроматографический режим: уравнение Хабгуда-Бассета для необратимых реакций первого порядка; уравнение для реакций любого порядка; определение кинетических

параметров каталитических реакций. Исследования механизмов каталитических реакций: спектроскопия *in-situ* и *Operando*.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения тестов по лекционному материалу, выполнения домашних заданий, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Изучение дисциплины завершается зачётом, допуском к которому является успешное выполнение заданий текущего контроля. Зачёт проводится в виде устной защиты доклада по теме выбранного студентом индивидуального задания, оформленного в виде презентации и пояснительной записки.

Результаты зачета определяются успешной защитой индивидуального задания, проверяющего освоение компетенций ИПК-1.1., ИПК-1.2., ИПК-1.3., ИПК-3.1., ИПК-3.2. и ответами на вопросы.

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если даны исчерпывающие и правильные ответы на уточняющие и дополнительные вопросы аудитории; содержание ответа изложено логично и последовательно; существенные фактические ошибки отсутствуют.

Оценка «не зачтено» выставляется студенту, если он не дал ответа на большинство вопросов при защите индивидуального задания; дал неверные, содержащие фактические ошибки, ответы на все вопросы; не смог ответить более, чем на половину дополнительных и уточняющих вопросов.

Примерный перечень тем индивидуальных заданий

1. Определение кислотных центров Al_2O_3 методами неизотермической кинетики
2. Определение дисперсности частиц активного компонента катализаторов (Pd, Ni, Ag и др. по выбору студента)
3. Определение основных центров носителя La_2O_3 и катализаторов на его основе
4. Определение кислородной емкости материалов на основе CeO_2
5. Определение кинетических параметров температурно-программированного восстановления оксидной фазы нанесенного катализатора

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22092>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План практических занятий по дисциплине.

г) Методические указания по проведению лабораторных работ.

д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Чоркендорф И. Современный катализ и химическая кинетика / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт; пер. с англ. В. И. Ролдугина – Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 500 с.

– Ролдугин В. И. Физикохимия поверхности / В. И. Ролдугин. – Долгопрудный: Интеллект, 2011. – 565 с.

– Карнаухов А. П. Адсорбция. Текстура дисперсных и пористых материалов / А. П. Карнаухов. – Новосибирск : Наука, Сиб. Предприятие РАН, 1999. – 470 с. – URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000343275/000343275.pdf>.

– Крылов О. В. Гетерогенный катализ / О. В. Крылов. – М. : Академкнига, 2004. – 679 с.

б) дополнительная литература:

– Суздаев И. П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И.П. Суздаев. – М.: Комкнига, 2006. – 529 с.

– Дельмон Б. Кинетика гетерогенных реакций / Б. Дельмон; Пер. с фр. Н. М. Бажина и др.; Под ред. В. В. Болдырева. – М.: Мир, 1972 – 554 с.

– Марголис Л. Я. Окисление углеводов на гетерогенных катализаторах / Л. Я. Марголис. - М. : Химия, 1977. – 326 с.

– Weckhuysen В. М., ed. In-situ spectroscopy of catalyts. // American Scientific Publishers Stevenson Ranch, CA. 2004. ISBN 978-1-58883-026-5.

URL:http://dspace.library.uu.nl/bitstream/handle/1874/23445/weckhuysen_04_in_situspectroscopyofcatalyts.pdf

в) ресурсы сети Интернет:

– Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU – <http://elibrary.ru/defaultx.asp>;

– Платформа SpringerLink – <http://link.springer.com/>;

– База данных ScienceDirect – URL: <http://www.sciencedirect.com/>;

– Поисковая система научных публикаций Google Scholar – <http://scholar.google.com/>;

– Библиографическая и реферативная база данных рецензируемой научной литературы Scopus – scopus.com/home.uri.

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.);

– программное обеспечение хемосорбционного анализатора ChemiSoft TPx V1.02.

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных:

– <https://webbook.nist.gov/chemistry/> – справочная база данных NIST;

– https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/direct_frame_top.cgi – спектральная база данных органических соединений

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Лаборатория, оборудованная хемосорбционными анализаторами Chemisorb 2750 и AutoChem HP 2950 (Micromeritics, USA).

15. Информация о разработчиках

Мамонтов Григорий Владимирович, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

Дорофеева Наталия Валерьевна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.