

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

_____ » августа 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Методы неизотермической кинетики и термического анализа

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.В.ДВ.04.01

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:

– ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.

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

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Приобретает систематические теоретические и практические знания в избранной области химии или смежных наук, анализирует возникающие в процессе научного исследования проблемы с точки зрения современных научных теорий, осмысливает и делает обоснованные выводы из научной и учебной литературы.

ИОПК-1.2. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук.

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.

2. Задачи освоения дисциплины:

– сформировать у студентов представления о теоретических основах неизотермической кинетики в термическом анализе;

– научить выбирать и обосновывать условия проведения и метод термического анализа для решения конкретных научно-исследовательских задач;

– научить составлять модели термической деструкции исследуемых веществ и материалов, проводить расчёты тепловых эффектов и кинетических параметров физико-химических процессов по результатам термоаналитических исследований.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули) по выбору 4 (ДВ.4)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 1, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия» «Высокомолекулярные соединения»,

«Физика», «Информатика», «Методы математической статистики в химии», «Физические методы исследования».

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

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

– лекции: 16 ч.;

– практические занятия: 16 ч.;

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Неизотермическая кинетика в термическом анализе

Особенности физико-химических процессов, идущих с участием твердых веществ. Понятие степени превращения в термическом анализе. Теоретическое обоснование возможности расчета кинетических параметров физико-химических процессов по результатам термического анализа, проведенного в неизотермическом режиме. Математическое описание скорости реакции, протекающей в неизотермическом режиме.

Тема 2. Термические методы анализа

Терминология в термическом анализе. Определения и условные обозначения. Классификация термических методов анализа, их достоинства и недостатки. Современное экспериментальное оборудование, устройства и принцип действия основных приборов, используемых в термическом анализе. Изотермические, неизотермические и квазитермические методы термического анализа. Достоинства и недостатки.

Тема 3. Термогравиметрия

Форма термогравиметрической кривой. Стандартные методы обработки термограмм. Выделение температурных интервалов одностадийных, параллельных и последовательных реакций. Факторы, влияющие на характер термогравиметрических кривых. Источники ошибок в термогравиметрии. Использование термогравиметрических кривых для составления материального баланса процессов термической деструкции веществ и материалов. Статистическая, квазистатическая и динамическая гравиметрия. Термогравиметрия по производной. Достоинства и недостатки термогравиметрии.

Тема 4. Дифференциальный термический анализ и дифференциальная сканирующая калориметрия

Теоретические основы дифференциального термического анализа (ДТА) и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Термограмма. Физико-химическая природа пиков кривых дифференциального термического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии. Факторы, влияющие на ход кривых дифференциального термического анализа. Количественный дифференциальный термический анализ. Стандартизированные методы построения базовых линий и способы определения площадей пиков аналитической кривой. Расчет тепловых эффектов наблюдаемых физико-химических превращений в дифференциальном термическом анализе. Области применения методов дифференциального термического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии

Тема 5. Математические методы расчета кинетических параметров

Использование результатов термогравиметрии и дифференциального термического анализа для определения степени превращения. Методы расчета энергии активации, порядка реакции и предэкспоненциального множителя физико-химических процессов по результатам термогравиметрии и дифференциального термического анализа.

Дифференциальные, интегральные и аппроксимационные методы расчета порядка реакции, энергии активации и предэкспоненциального множителя. Достоинства и недостатки методов. Поиск и выбор оптимального метода для обработки термоаналитических кривых.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости и выполнения домашних заданий и индивидуального задания, проведения деловых игр по темам, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

В ходе прохождения практических занятий и при проведении текущего контроля проверяются знания, полученные по ОПК-1 (ИОПК-1.1., ИОПК-1.2) и ПК-1 (ИПК-1.1, ИПК-1.3).

Текущий контроль влияет на промежуточную аттестацию: к экзамену допускаются магистранты, которые не имеют задолженностей по заданиям текущего контроля, а также выполнившие и защитившие и индивидуальное задание.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в первом семестре проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит 2 теоретических вопроса и 1 практическое задание, проверяющие знания, полученные по ОПК-1 (ИОПК-1.1., ИОПК-1.2) и ПК-1 (ИПК-1.1., ИПК-1.2.). Подготовка ответа – 60 минут.

Примеры билетов:

Билет №1

1. Классификация термических методов анализа, их достоинства и недостатки. Современное экспериментальное оборудование, устройство и принцип действия основных приборов, используемых в термическом анализе.

2. Неизотермическая кинетика. Возможность применения результатов дифференциального термического анализа для расчета кинетических параметров физико-химических превращений.

3. Используя программу Proteus Analysis, обработайте результаты анализа термического разложения кристаллогидрата хлорида марганца (II) $MnCl_2 \cdot 4H_2O$, полученные на синхронном термоанализаторе STA 449 Jupiter. Опишите процессы наблюдаемой термодеструкции, используя справочные данные, оцените состав промежуточных и конечных продуктов термического разложения кристаллогидрата.

Билет №2

1. Факторы, влияющие на форму термоаналитических кривых. Выбор формы и материала тигля для ДТГ- и ДСК-измерений.

2. Аппроксимационные методы расчета кинетических параметров процессов. Метод Метцгера-Горовицы – области применения, достоинства и недостатки.

3. Используя программу Proteus Analysis, обработайте результаты анализа термического разложения кристаллогидрата сульфата магния (II) $MgSO_4 \cdot 7H_2O$, полученные на синхронном термоанализаторе STA 449 Jupiter. Опишите процессы наблюдаемой термодеструкции; используя результаты анализа и справочные данные, оцените состав промежуточных и конечных продуктов термического разложения кристаллогидрата.

Результаты зачета определяются оценками «зачтено», «не зачтено».

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если студент дает развернутые, логически построенные ответы на теоретические вопросы, применяет понятийный аппарат дисциплины, приводит решение практического задания.

Оценка «не зачтено» выставляется, если студент не может дать ответ на один из теоретических вопросов билета или не может выполнить самостоятельно практическое задание.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22076>

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

в) План практических занятий по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Новоженев В. А., Стручева Н. Е. Термический анализ. – Барнаул : Издательство Алтайского государственного университета. 2012.

– Третьяков А. Ф. Материаловедение и технологии обработки материалов: [учебное пособие для студентов высших учебных заведений / А. Ф. Третьяков, Л. В. Тарасенко. – М. : Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2014.

– Емелина А. Л. Дифференциальная сканирующая калориметрия Лаборатория химического факультета МГУ, 2009

– Третьяков Ю. Д., Путляев В. И. Введение в химию Твердофазных материалов. М. : Издательство Московского университета, Издательство «Наука», 2006.

– Пурмаль А.П. А,Б,В. химической кинетики М. : ИКЦ «Академкнига», 2004

б) дополнительная учебная литература:

– Шестаков Я. Теория термического анализа: физико-химические свойства твердых неорганических веществ. – М. : Мир. 1987.

– Уэндландт У. Термические методы анализа – М. : Мир.1978.

– Фиалко М.Б. Неизотермическая кинетика в термическом анализе. – Томск : Издательство Томского университета. 1981.

в) ресурсы сети Интернет:

– Электронно-библиотечная система Znanium.com [Электронный ресурс] / Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012- . URL: <http://znanium.com/>

– ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>

– Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000. – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp?>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – Томск, 2011. –URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

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);

– программное обеспечение к синхронному термоанализатору STA 449 C Jupiter

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 Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации (аудитория № 402 6-го учебного корпуса ТГУ).

Лаборатория термического анализа (№ 408, 6-го учебного корпуса ТГУ), оснащенная современным синхронным термоанализатором STA 449 Jupiter сопряженным с масс-спектрометром QMS 403 Aeolos, который позволяет изучать термическое поведение неорганических, органических, высокомолекулярных веществ и материалов в инертной и окислительной атмосфере в диапазоне температур 25 – 1500 °С.

15. Информация о разработчиках

Егорова Лидия Александровна, кан. хим. наук, ст. науч. сотр., кафедра неорганической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.