

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

« 16 » августа 20 22 г.

Рабочая программа дисциплины

Методы неизотермической кинетики и термического анализа

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Химические и физические методы исследований в экологической и криминалистической экспертизе»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.В.ДВ.01.07

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

_____ К.А. Дычко

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.

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

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 обязательной части образовательной программы.

Дисциплина входит в модуль Дисциплины (модули) по выбору 1 (ДВ.1).

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Третий семестр, экзамен

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: 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. 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 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

Экзамен в первом семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет содержит 2 теоретических вопроса и 1 практическое задание, проверяющие знания, полученные по ПК-1 (ИПК-1.1., ИПК-1.2.). Подготовка ответа – 40 минут; ответ – 20 минут.

Пример 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 экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Магистрант на экзамене получает оценку:

– «отлично» – студент дает полные, развернутые, логически построенные ответы на теоретические вопросы, применяет понятийный аппарат дисциплины, приводит полное решение практического задания.

– «хорошо» – студент дает развернутые, логически построенные ответы на теоретические вопросы, применяет понятийный аппарат дисциплины, приводит полное решение практического задания, но допускает две-три ошибки, которые исправляет, основываясь на наводящих вопросах преподавателя.

– «удовлетворительно» – студент не может дать ответ на один из теоретических вопросов билета и допускает при выполнении практического задания ошибки, которые может устранить только при помощи наводящих вопросов преподавателя.

«неудовлетворительно» – 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/enrol/index.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 литература:

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

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/>

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.