

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины
Методы неизотермической кинетики и термического анализа

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
**Химические и физические методы исследований в экологической и
криминалистической экспертизе**

Квалификация выпускника
Магистр

Форма обучения
Очная

Томск 2016

1. Код и наименование дисциплины

Б1.В.ДВ.2.2 «Методы неизотермической кинетики и термического анализа»

2. Цель изучения дисциплины: изучение теоретических основ термического анализа, использование результатов неизотермических исследований для оценки кинетических параметров термической деструкции веществ.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения: 2 год, 1 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов, из которых 34 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 16 часов – практические занятия), 36 часов для подготовки к экзамену, 38 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
Второй уровень (углубленный) (ОПК-3) – II способность реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях.	З (ОПК-3) –II Знать: содержание основных понятий, норм и техники безопасности в лабораторных и технологических условиях. В (ОПК-3)–II Владеть: навыками и способностью проведения химического эксперимента с соблюдением норм техники безопасности в лабораторных и технологических условиях.
Второй уровень (углублённый) (ПК-1) – II способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты.	В(ПК-1)–II Владеть: навыками и способностью самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты термическими методами анализа химических веществ в различных объектах.
Второй уровень (углубленный) (ПК-2) – II владение навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований.	У(ПК-2) – I Уметь: подобрать режимы и условия проведения анализа на синхронном термоанализаторе, совмещенном с масс-спектрометрией. В(ПК-2) – I Владеть: навыками обработки результатов термического анализа с использованием программного обеспечения.
Второй уровень (углублённый) (ПК-3) – II готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований.	З (ПК-3) – I Знать: устройство и принцип работы современных термоаналитических приборов.
Второй уровень (углубленный) (СПК-3) – II владение основами методологии анализа и исследования объектов различной природы современными химическими и физико-	З (СПК-3) – II Знать: особенности кинетики химических реакций твердых веществ, физико-химические свойства неорганических веществ и материалов. У(СПК-3) – I Уметь: использовать приобретенные знания для

химическими методами анализа, способностью применять статистические методы обработки аналитической информации	проведения экспертизы веществ и материалов. У(СПК-3) – II Уметь: использовать стандартные программы для статистической обработки полученной информации.
---	--

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Практические занятия	
Введение	2	2		
Современные приборы термического анализа. Достоинства, возможности.	2	2	-	
Неизотермическая кинетика твердофазных реакций. Механизмы твердофазных реакций.	12	6	-	6
Обработка результатов термического анализа и расчета кинетических характеристик изучаемого процесса. Интегральные, дифференциальные и аппроксимационные методы расчета энергии активации и порядка реакции	38	6	12	20
Использование компьютерных программ для расчета кинетических параметров твердофазных реакций	18	2	4	12
Подготовка к экзамену	36	-	-	
Итого:	108	18	16	38

6.2. Содержание дисциплины

Модуль 1. Классификация термических методов анализа. Современные термоаналитические приборы: возможности, достоинства, области применения. Факторы, влияющие на форму термоаналитических кривых. Выбор условий и температурной программы проведения термического и термогравиметрического анализа. Основы термогравиметрии, совмещенной с дифференциальным термическим анализом, дифференциальной сканирующей калориметрией.

Модуль 2. Неизотермическая кинетика твердофазных реакций. Механизмы твердофазных реакций. Граница раздела фаз и реакционная способность твердых веществ. Модели случайного зародышеобразования, сжимающейся поверхности, роста сферы, цилиндра, многогранника. Диффузионные модели. Физико-химический смысл кинетического уравнения скорости химического превращения, порядка реакции и предэкспоненциального множителя для реакций с участием твердых веществ. Математические модели кинетических и диффузионных механизмов.

Основы использования результатов неизотермического исследования для расчета кинетических параметров процессов термической деструкции веществ и материалов. Методы динамического термического анализа твердофазных реакций. Обработка термоаналитических результатов с использованием программного обеспечения. Общие требования к виду температурной программы термоаналитических измерений при проведении анализа с целью расчета кинетических параметров наблюдаемых физико-

химических превращений. Обработка результатов термогравиметрии, дифференциального термического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии для расчета кинетических характеристик изучаемого процесса. Интегральные, дифференциальные и аппроксимационные методы поиска порядка, энергии активации и предэкспоненциального множителя твердофазных реакций.

Модуль 3. Термокинетический анализ. Использование компьютерных программ для расчета кинетических параметров твердофазных реакций по результатам дифференциального термического анализа, дифференциальной сканирующей и адиабатической калориметрии, волюмометрии и дилатометрии.

Кинетическая модель одностадийных процессов. Прогнозирование термоаналитического сигнала и степени превращения. Оптимизирование кинетических параметров модели и поиск температурной программы для постоянной скорости реакции. Кинетическая модель сложных процессов. Выбор кинетической модели. Поиск начальных значений параметров для нелинейной регрессии для каждой стадии. Безаприорный анализ в соответствии со стандартом ASTM E698. Анализ по Фридману, по Ozawa-Flynn-Wall.

6.3. Форма промежуточной аттестации: экзамен.

7. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и дополнительной учебной литературы

7.1 Основная учебная литература

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

2. Третьяков А. Ф. Материаловедение и технологии обработки материалов : [учебное пособие для студентов высших учебных заведений / А. Ф. Третьяков, Л. В. Тарасенко. - Москва : Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2014. – 541, [2] с.: рис., табл.

7.2 Дополнительная учебная литература

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

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

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

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

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

7.3. Электронные ресурсы

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

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

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

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

8. Автор: Егорова Лидия Александровна, канд. хим. наук, доцент кафедры неорганической химии ХФ ТГУ.