

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  
**Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов**

Квалификация (степень) выпускника  
**магистр**

Форма обучения  
**очная**

Томск – 2016

**1. Код и наименование дисциплины**

Б1.В.ДВ.1.1 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:** 1 год, 1 семестр.

**4. Общая трудоемкость дисциплины** составляет 4 зачетных единиц, 144 часа, из которых 42 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 24 часа – практические занятия). 36 часов для подготовки к экзамену, 66 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
ПК-2. Владение навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	З(ПК-2) – I. Знать устройство и принцип работы современных термоаналитических приборов 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
СПК-2. Способность использовать в исследованиях и расчетах приобретенные знания о физических и химических процессах получения неорганических веществ и материалов, их анализе, прогнозировании свойств	З(СПК-2) – I. Знать особенности кинетики химических реакций твердых веществ, физико-химические свойства неорганических веществ и материалов У(СПК-2) – I. Уметь использовать приобретенные знания для составления реакций превращения неорганических веществ и материалов по результатам их термического анализа У(СПК-2) – II. Уметь использовать стандартные программы для расчета кинетических параметров физико-химических превращений

## 6. Содержание дисциплины (модуля) 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	Консультации	Коллоквиумы, защита ИЗ	
Введение	2	2				
Современные приборы термического анализа. Достоинства, возможности.	2	2	-	-	-	
Неизотермическая кинетика твердофазных реакций. Механизмы твердофазных реакций.	16	6	-	-	-	10
Обработка результатов термического анализа и расчета кинетических характеристик изучаемого процесса. Интегральные, дифференциальные и аппроксимационные методы расчета энергии активации и порядка реакции	70	6	16	2	2	44
Использование компьютерных программ для расчета кинетических параметров твердофазных реакций	18	2	4	-	-	12
Подготовка к экзамену	36	-	-	-	-	
<b>Итого:</b>	<b>144</b>	<b>18</b>	<b>20</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>66</b>

## 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:

#### 7.1 Перечень основной и дополнительной учебной литературы

##### а) 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.

##### б) 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.

## **7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет**

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.