

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины

Методы неизотермической кинетики и термического анализа в гетерогенном катализе

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Квалификация выпускника
Магистр

Форма обучения
очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины Б1.В.ДВ.2.5 Методы неизотермической кинетики и термического анализа в гетерогенном катализе

2. Цель изучения дисциплины

Целями освоения дисциплины являются:

- ознакомление слушателей с теоретическими основами и практическим применением методов нестационарной кинетики в изучении механизма гетерогенных реакций,
- накопление у слушателей теоретических знаний в области нестационарной кинетики и катализа;
- приобретение практических навыков исследования кинетических закономерностей каталитических реакций с использованием методов нестационарной кинетики.

3. Год и семестр обучения: 2 год, 3 семестр

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов, из которых 36 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 18 часов – практические занятия), 36 часов составляет самостоятельная работа обучающегося, и 36 часов – подготовка к экзамену. Для студентов проводятся групповые и индивидуальные консультации.

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

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
СПК-5 – II Способность планировать и решать проблемы термодинамики, кинетики и механизма сложных химических реакций, в том числе на границе раздела фаз	З (СПК-5) II Знать: – особенности строения функциональной поверхности твердых тел, принципы выбора системы и метода постановки кинетических исследований в нестационарных условиях, способы определения каталитической активности гетерогенных катализаторов, констант скорости, энергии активации каталитических реакций. У (СПК-5) – II Уметь: – разрабатывать общую методологию экспериментальных исследований по изучению кинетических закономерностей гетерогенно-каталитических реакций с использованием методов нестационарной кинетики. В (СПК-5) – II Владеть – теоретическими подходами к направленному конструированию активной поверхности катализатора и практическими навыками проведения исследований каталитических процессов в нестационарном режиме.
ОПК-3 – II Способностью реализовать нормы техники безопасности в лаборатории и технологических условий.	З (ОПК-3) – II Знать: – нормы техники безопасности при работе в химической лаборатории и технологических условий. У(ОПК-3) – II Уметь: – спланировать химический эксперимент, в том числе с использованием химических реагентов, газовых смесей и сосудов с повышенным давлением и жидким азотом,

	электрооборудования с учётом норм техники безопасности. В (ОПК-3) – III Владеть – навыками предотвращения опасных ситуаций и предотвращения их при проведении работ в химической лаборатории.
ПК-1 – II Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты.	З (ПК-1) II Знать: – методологию проведения эксперимента методами неизотермической кинетики и термического анализа. У(ПК-1) – II Уметь: – планировать эксперимент по исследованию гетерогенных катализаторов методами неизотермической кинетики и термического анализа. В(ПК-1) – II Владеть – навыками обработки и интерпретации результатов методов неизотермической кинетики и термического анализа при исследовании гетерогенных катализаторов.
ПК-3 – II Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований.	З (ПК-3) – II Знать: – особенности устройства современных приборов для проведения сорбционных исследований и термического анализа. У (ПК-3) – II Уметь: – составлять алгоритм проведения эксперимента на современном газоадсорбционном анализаторе или термическом анализаторе, ориентироваться в основных настройках прибора, окне задания условий эксперимента. В (ПК-3) – II Владеть – подходами извлечения и обработки результатов неизотермических методов или термического анализа.

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

№ п/п	Наименование разделов и тем	Всего часов	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)		
			лекции	Практические занятия	СРС
1	Введение в методы нестационарной кинетики	4	2		2
2	Метод импульса	6	4		2
3	Метод температурно-программированной десорбции. Температурно-программированное окисление/восстановление	10	6		4
4	Температурно-программированная реакция. Аппаратурное оформление методов.	8	6		2

5	Семинар на тему «Аппаратурное оформление методов, планирование и проведение эксперимента, обработка результатов».	14		6	8
6	Лабораторная работа 1. Расчёт кинетических параметров в методе ТПД	14		6	8
7	Лабораторная работа 2. Проведение калибровки в методе ТПВ	14		6	8
8	Консультации, подготовка научного проекта	2			2
	Экзамен	36			
6	Итого	108	18	18	36

6.2. Содержание дисциплины

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 Илея-Ридила, окислительно-восстановительный механизм Марса-Ван-Кревелена.

2. Метод импульса

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. Импульсный хроматографический режим. Исследование каталитических реакций и катализаторов в импульсном режиме: микрокаталитическая установка, порядок работы, определение формы импульса, определение кинетической области протекания реакции.

3. 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. Оформление экспериментальной установки (анализ схем, приводимых в литературе, сопоставление вакуумных и проточных термодесорбционных систем).

4. Температурно-программированное окисление/восстановление

Температурно-программированное окисление и температурно-программированное восстановление. Особенности реализации методов ТПО-ТПВ. Примеры.

5. Температурно-программированная реакция. Экспериментальные особенности метода. Примеры.

6. 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. Масс-спектрометрическое детектирование продуктов превращения в режиме ТПР.

6.3. Перечень практических занятий

№ п/п	Тема занятия
1	Аппаратурное оформление методов, планирование и проведение эксперимента, обработка результатов
2	Лабораторная работа 1. Расчёт кинетических параметров в методе ТПД
3	Лабораторная работа 2. Проведение калибровки в методе ТПВ

6.4. Форма промежуточной аттестации: экзамен

7. Ресурсное обеспечение

7.1. Перечень основной учебной литературы

1. Современный катализ и химическая кинетика /И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт; пер. с англ. В. И. Ролдугина. Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 500 с.
2. Физикохимия поверхности / В. И. Ролдугин. Долгопрудный: Интеллект, 2011. – 565 с.

7.2. Перечень дополнительной учебной литературы

1. Суздаев И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И.П. Суздаев. – Москва: Комкнига, 2006. – 529 с.
2. Кинетика гетерогенных реакций / Б. Дельмон; Пер. с фр. Н. М. Бажина и др. ; Под ред. В. В. Болдырева. М.: Мир , 1972 – 554 с.
3. Механизмы гетерогенно-каталитических реакций окисления / Т. В. Андрушкевич, С. А. Веняминов, А. А. Иванов и др.; Под ред. В. С. Музыкантова; Рос. АН, Сиб. отд-ние, Ин-т катализа им. Г. К. Борескова. Новосибирск, 1993 – 187 с.

7.3. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. Издательство «Лань» [Электронный ресурс]: электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – СПб., 2010- . – URL: <http://e.lanbook.com/>
2. Издательство «Юрайт» [Электронный ресурс]: электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – М., 2013- . URL: <http://www.biblio-online.ru/>
3. Электронно-библиотечная система Znanium.com [Электронный ресурс] / Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012. URL: <http://znanium.com/>
4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000- . – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp?>
5. Электронная Библиотека Диссертаций [Электронный ресурс] / Российская государственная библиотека. – Электрон. дан. – М., 2003. URL: <http://diss.rsl.ru/>
6. Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ [Электронный ресурс] . – Электрон. дан. – Томск, 2011- . URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
7. Научная библиотека Томского государственного университета [Электронный ресурс] / НИ ТГУ, Научная библиотека ТГУ. – Электрон. дан. – Томск, 1997. – URL: <http://www.lib.tsu.ru/ru>
8. SpringerLink [Electronic resource] / Springer International Publishing AG, Part of Springer Science+Business Media. – Electronic data. – Cham, Switzerland, [s. n.]. – URL: <http://link.springer.com/>
9. JSTOR [Electronic resource] : digital library / ITHAKA. – Electronic data. – [S. l.], 2000-. – URL: <http://www.jstor.org/>
10. ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>
11. Oxford University Press [Electronic resource] : journals / Oxford University Press (OUP), University of Oxford. – Electronic data. – Oxford, United Kingdom, 2015-. – URL: <http://www.oxfordjournals.org/en/>
12. Science [Electronic resource]: journals / American Association for the Advancement of Science (AAAS). – Electronic data. – Washington, USA, 2016. – URL: <http://www.sciencemag.org/>
13. Google Scholar [Electronic resource] / Google Inc. – Electronic data. – [S. l.: s. n.]. – URL: <http://scholar.google.com/>

8. Автор: Мамонтов Григорий Владимирович, к.х.н., доцент кафедры физической и коллоидной химии ХФ ТГУ.