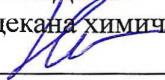


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

_____ А.С. Князев

« 08 » апрель 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Избранные главы неорганической химии и материаловедения

специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Химик. Преподаватель химии

Год приема

2021

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.1.ДВ.01.02.07

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП


_____ В.В. Шелковников

Председатель УМК


_____ В.В. Хасанов

Томск – 2022

Модуль I: Ионообменные методы в неорганической химии

1. Цель и планируемые результаты освоения модуля

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.
- ОПК-2. Способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности.
- ПК-2. Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.
- ПК-5. Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

ИОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности.

ИОПК-2.2. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач профессиональной деятельности.

ИОПК-2.3. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

ИПК-2.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными.

ИПК-2.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов.

ИПК-5.2. Предлагает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР.

2. Задачи освоения модуля

– Расширить знания теоретических основ ионного обмена, необходимые для критического анализа результатов НИР и оценки перспектив их практического применения.

– Научиться проводить экспериментальные исследования свойств ионообменников.

– Научиться анализировать возможности ионообменников и предлагать вариант ионообменного метода при решении конкретной практической задачи очистки и разделения неорганических веществ.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к профессиональному циклу, части, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Неорганическая химия и химия материалов.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 9, зачет, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины студенты предварительно знакомятся с дисциплинами обязательной части профессионального блока (неорганическая, аналитическая, органическая, физическая химия и химия ВМС), а также дисциплинами обязательной части общепрофессионального блока математика. информатика.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 з.е., 216 часов, из которых по данному модулю 2 з.е., 72 часа:

- лекции: 12 ч.;
- практические занятия: 4 ч.;
- лабораторные работы: 16 ч.;

В том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание модуля, структурированное по темам

Тема 1. Области использования ионообменных процессов в неорганической химии

Направление исследований по разработке новых типов сорбентов для разделения и очистки веществ.

Тема 2. Иониты и их свойства

Классификация ионитов. Неорганические и органические иониты. Катиониты и аниониты. Полифункциональные иониты.

Тема 3. Физико-химические свойства ионитов и методы их исследования

Полная обменная емкость, набухаемость, эффективные константы диссоциации функциональных групп ионитов.

Тема 4. Общие закономерности ионного обмена в гетерогенной системе

Термодинамика ионообменных равновесий. Факторы, влияющие на константу равновесия. Кинетика ионного обмена. Модели процессов обмена с различным кинетическим механизмом. Динамика сорбции в неподвижном слое ионита.

Тема 5. Разделение и очистка неорганических веществ с применением ионитов

Водоподготовка: особенности выбора ионообменников. Процессы разделения неорганических ионов. Извлечение ценных неорганических компонентов из природных вод.

9. Текущий контроль по дисциплине (модулю)

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения коллоквиума, теста по лекционному материалу, выполнения домашних заданий, письменного оформления отчетов по лабораторным работам и их защиты, и фиксируется в форме контрольной точки один раз в семестр.

В курсе применяется балльно-рейтинговая система. Каждый вид текущего контроля оценивается в баллах:

– коллоквиум по теоретической части курса (устный ответ на 2 вопроса) – 20 баллов;

– ответы на вопросы теста по лекционному материалу (тест включает 17 вопросов с выбором ответа, продолжительность тестирования 15 минут) – 10 баллов;

- выполнение расчетных домашних заданий (подготовка к ЛР – 2 задания по 7 задач) – 10 баллов;
 - письменные отчеты по лабораторным работам, их защита – 40 баллов (4 ЛР).
- Суммарный рейтинг текущего контроля – 80 баллов.

При проведении текущего контроля и в ходе выполнения лабораторного практикума проверяются знания, полученные по ОПК-1 (ИОПК-1.1, ИОПК-1.2, ИОПК-1.3), ОПК-2 (ИОПК-2.1, ИОПК-2.2).

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета и устного экзамена.

Студент получает зачет при суммарной оценке текущего контроля не менее 40 баллов (50% рейтинга).

Билет для экзамена содержит 1 теоретический вопрос (15 баллов) и 1 расчетное задание компетентностного характера (15 баллов).

Вопросы экзамена проверяют знания, полученные по ПК-2 (ИПК 2.1, ИПК 2.2) и ПК-5 (ИПК-5.2.). Ответ на вопрос второй части дается в развернутой форме. Продолжительность подготовки ответа по билету 1 ч, ответ 20 мин.

Итоговая оценка по модулю дисциплины выставляется по сумме баллов за ответ на экзамене и текущий рейтинг в семестре.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Общая характеристика и классификация ионитов. Неорганические и органические ионообменники. Основные направления разработки сорбентов для разделения и очистки неорганических веществ.

2. Ионообменная ёмкость. Методы определения полной обменной ёмкости. Факторы, влияющие на величину ёмкости ионита. Способы выражения емкости.

3. Константы ионного обмена. Термодинамическая и кажущаяся константы равновесия ионного обмена, их взаимосвязь. Методы расчёта и экспериментального определения констант.

4. Основные кинетические стадии процесса ионного обмена. Внешнедиффузионный (пленочный) механизм кинетики ионного обмена. Изменение концентрации в фазе ионита и раствора при плёночной кинетике. Взаимосвязь скорости процесса с коэффициентом диффузии ионов.

5. Динамика ионного обмена. Особенности формирования сорбционного фронта в колоннах. Основные характеристики динамики ионообменной сорбции.

Критерии оценивания ответа на теоретический вопрос экзаменационного билета:

15-13 баллов. Студент дает правильный ответ на теоретический вопрос: обосновывает применение законов для описания процесса ионного обмена (равновесия, кинетики, динамики). Называет количественные характеристики процесса, поясняет их суть, показывает взаимосвязь со свойствами ионита, ионов, составом раствора называет константы, часто применяемые на практике. Характеризует методы определения количественных характеристик процесса (например, ионообменной емкости, эффективных констант ионизации функциональных групп ионитов, коэффициентов распределения и разделения ионов, коэффициентов диффузии в зерне ионита), отмечает преимущества и недостатки методов.

В ответе на вопрос допускаются небольшие неточности, исправляемые студентом после вопросов преподавателя.

12-10 баллов. Студент дает правильный ответ на теоретический вопрос: обосновывает применение законов для описания процесса ионного обмена (равновесия, кинетики, динамики). Называет количественные характеристики процесса, поясняет их

суть, показывает взаимосвязь со свойствами ионита, ионов, составом раствора называет константы, часто применяемые на практике. Характеризует методы определения количественных характеристик процесса (например, ионообменной емкости, эффективных констант ионизации функциональных групп ионитов, коэффициентов распределения и разделения ионов, коэффициентов диффузии в зерне ионита), отмечает преимущества и недостатки методов.

Студент показывает знание теории, но поясняет различие отдельных количественных характеристик ионообменного процесса, методов их определения после двух наводящих вопросов преподавателя.

9-7 баллов. Студент знает фрагментарно теорию ионного обмена: называет законы, но не может обосновать их применение для описания процесса ионного обмена (равновесия, кинетики, динамики). Называет количественные характеристики процесса, поясняет их суть, но не показывает взаимосвязь со свойствами ионита, ионов, составом раствора. Называет методы определения количественных характеристик процесса (например, ионообменной емкости, эффективных констант ионизации функциональных групп ионитов, коэффициентов распределения и разделения ионов, коэффициентов диффузии в зерне ионита), но допускает ошибки в их характеристике, не отмечает преимущества и недостатки методов.

Студент не может исправить ошибки в ответе после трех наводящих вопросов преподавателя.

Менее 7 баллов. Студент демонстрирует элементарные знания по теории ионообменных процессов, типам сорбентов, их свойствам, не знает принципы разделения веществ методами ионного обмена, не может сформулировать ответ после более трех наводящих вопросов преподавателя.

Примерный перечень расчетных заданий

Задание 1.

Предложите схему ионообменного выделения Cu^{2+} из раствора объемом 2,0 л и pH 1,5, содержащего ионы Fe^{3+} с использованием одного из указанных ниже сорбентов, учитывая рабочий диапазон pH ионитов и свойства целевых ионов:

Ионообменник	Активные группы	ПОЕ, ммоль-экв/г сухого ионита	
		по 0,1 М HCl	по 0,1 М NaOH
Анионит АВ-17-8	$[\text{N}^+(\text{CH}_3)_3]\text{Cl}^-$	3,3	-
Катионит КУ-2-8	$-\text{SO}_3\text{H}$	-	4,9
Катионит КБ-4	$-\text{COOH}$	-	8,5

1. Обоснуйте а) выбор сорбента, б) условия проведения процесса выделения и отделения Cu^{2+} от сопутствующего компонента.

Запишите уравнение ионообменной реакции.

2. Рассчитайте массу выбранного сорбента, необходимую для извлечения целевых ионов из заданного объема раствора (2 л) на 99,9%, если начальная концентрация Cu^{2+} и Fe^{3+} в растворе составляет 0,005 и 0,001 моль/л соответственно.

Задание 2.

Для разработки катализаторов с высокой удельной поверхностью используются композиционные материалы в виде частиц сферической формы. Одной из стадий процесса получения композита, содержащего каталитически активные ионы (например, Fe^{3+} , Cr^{3+} , MoO_4^{2-}) является насыщение зерен ионообменников в растворе данными ионами.

1. Предложите иониты (из указанных в таблице), которые могут быть использованы для получения материала, содержащего ионы MoO_4^{2-} , учитывая рабочий диапазон pH ионитов и свойства целевых ионов:

Ионообменник	Активные группы	ПОЕ, ммоль-экв/г сухого ионита	
		по 0,1 М HCl	по 0,1 М NaOH

Анионит АВ-17-8	$[N^+(CH_3)_3]Cl^-$	3,3	-
Катионит КУ-2-8	$-SO_3H$	-	4,9
Катионит КБ-4	$-COOH$	-	8,5

Обоснуйте а) выбор ионита, б) его ионную форму и в) pH раствора для проведения сорбции. Запишите уравнение ионообменной реакции.

2. Рассчитайте массу композита-прекурсора, которую можно получить из 10 г ионита, если степень заполнения зерен сорбента ионами MoO_4^{2-} составляет 40% сорбционной обменной емкости (СОЕ). Примите, что для каждого ионита значение СОЕ составляет 0,8 ПОЕ. Концентрация ионов MoO_4^{2-} в исходном растворе - 0,01 моль/л. Какой объем этого раствора потребуется для насыщения навески сорбента молибдат-ионами в указанных условиях?

Задание 3

Для выделения ионов кобальта(II) из водно-аммиачного технологического раствора используется ионный обмен.

1. Объясните на основе приведенных в таблице данных, почему для сорбции Co^{2+} используют карбоксильный катионит?

Ионообменник	Активные группы	ПОЕ, ммоль-экв/г сухого ионита	
		по 0,1 М HCl	по 0,1 М NaCl
Анионит АВ-17-8	$[N^+(CH_3)_3]Cl^-$	3,3	-
Катионит КУ-2-8	$-SO_3H$	-	4,9
Катионит КБ-4	$-COOH$	-	8,5

Запишите уравнение ионообменной реакции с учетом рабочего диапазона pH ионита и состояния целевых ионов кобальта(II) в растворе.

2. Рассчитайте массу карбоксильного катионита, которую необходимо взять для того, чтобы в равновесных условиях на 99,9 % извлечь кобальт(II) из 1 м³ его водно-аммиачного раствора, содержащего 0,5 г/л Co^{2+} . Сорбционная емкость катионита по ионам Co^{2+} составляет 5,25 ммоль-экв/г.

Критерии оценивания ответа на расчетное задание:

15-13 баллов. Студент понимает проблему, обозначенную в задании, обосновывает выбор ионита и условий проведения процесса, правильно решает задачу: показывает знание понятий и умение выполнять расчеты емкости сорбента, коэффициентов распределения ионов, степени извлечения, владеет навыками их применения при решении комбинированной задачи. В ответе на задание допускаются небольшие неточности, исправляемые студентом после вопросов преподавателя.

12-10 баллов. Студент понимает проблему, обозначенную в задании, обосновывает выбор ионита и условий проведения процесса, решает задачу: показывает знание понятий и умение выполнять расчеты емкости сорбента, коэффициентов распределения ионов, степени извлечения, владеет навыками их применения при решении комбинированной задачи, но при выполнении расчета допускает две ошибки.

9-7 баллов. Студент понимает проблему, обозначенную в задании, обосновывает выбор ионита, но не может обосновать оптимальные условия проведения процесса, решает задачу: показывает знание понятий и умение выполнять расчеты емкости сорбента, коэффициентов распределения ионов, степени извлечения, но не владеет навыками их применения при решении комбинированной задачи, допускает три существенных ошибки в расчетах.

Менее 7 баллов. Студент слабо понимает проблему, обозначенную в задании, не обосновывает выбор ионита и оптимальные условия проведения процесса, при решении задачи выполняет отдельные действия, допускает грубые ошибки в расчетах.

Для получения оценки необходимо набрать не менее 50 % от общего количества баллов за экзамен (15 – 30 баллов).

Итоговая оценка по модулю дисциплины выставляется после суммирования баллов за экзамен и текущий рейтинг в семестре:

Оценка	Экзамен	Текущий рейтинг в семестре	Общая сумма	% от общей суммы баллов
	баллы			
Отлично	25-30	64-80	89-110	80
Хорошо	20-24	52-63	72-88	65
Удовлетворительно	15-19	40-51	55-71	50
Неудовлетворительно	<15	<40	<55	<50

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=26019>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (вопросы теста, билеты для коллоквиума, экзаменационные билеты).
- в) План практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по проведению лабораторных работ.
- д) Рейтинг курса.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - Вергун А. П. Ионообменная технология разделения и очистки веществ. Курс лекций: Учебное пособие / А. П. Вергун, В. Ф. Мышкин, А. В. Власов. – Томск : ТПУ, 2010. – URL: portal.tpu.ru:7777/SHARED/a/ANATOLI/Teaching/Tab/IT_Lecture.pdf
 - Нестеров Ю. В. Иониты и ионообмен. Сорбционная технология при добыче урана и других металлов методом подземного выщелачивания. – М. : 2007. – 480 с. – URL: http://elib.biblioatom.ru/text/nesterov_ionity-i-ionoobmen_2007/go,0/
 - Вольдман Г. М. Теория гидрометаллургических процессов: Учебное пособие / Г. М. Вольдман, А. Н. Зеликман - М. : Интернет Инжиниринг, 2003. – 464 с.
 - Скворцова Л. Н. Хроматографические методы: Учебно-методическое пособие / Л. Н. Скворцова, Л. Б. Наумова. – Томск : ТГУ, 2010. – 121 с. (Доступ: библиотека ТГУ).
 - Селеменев Г. В. Практикум по ионному обмену: Учебное пособие / Г. В. Селеменев, Г. В. Славинская, В. Ю. Хохлов и др. - Воронеж: ВГУ, 2004. – 160 с. – URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2019/000656947/000656947.pdf> (Доступ: библиотека ТГУ).
 - Мархол М. Ионообменники в аналитической химии: Пер. с англ. М. : Мир, 1985, т. 1 – 264 с., т. 2 – 280 с. (Доступ: библиотека ТГУ).
 - Гельферих Ф. Иониты. – М. : Изд-во ин. лит., 1962. – 490 с. (Доступ: библиотека ТГУ).
- б) дополнительная литература
 - Inamuddin, Ahamed M., Asiri A. (eds) Applications of Ion Exchange Materials in the Environment. (2019) Springer International Publishing. DOI https://doi.org/10.1007/978-3-030-10430-6_4, Publisher Name Springer, Cham Print ISBN 978-3-030-10429-0.
 - Кравченко Т. А., Калиничев А. И., Полянский Л. Н., Конев Д. В. Нанокomпозиты металл-ионообменник. – М. : Наука, 2009. – 392 с. (Доступ: библиотека ТГУ).
 - Сенявин М. М. Ионный обмен в технологии и анализе неорганических веществ. М. : Химия, 1980. – 271 с. (Доступ: библиотека ТГУ).

в) ресурсы сети Интернет:

- открытые онлайн-курсы: <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=26019>;
- ионный обмен - Справочник химика: <https://chem21.info/in>.

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 OneNote, 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/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа (№ 402 6-го учебного корпуса ТГУ).

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (№ 404, № 406 6-го учебного корпуса ТГУ).

Лаборатории (аудитории № 404 и № 406 6-го учебного корпуса ТГУ), оборудованные вытяжными шкафами, стеклянной и фарфоровой лабораторной посудой, измерительным инструментом (весы, термометры, рН-метры, спектрофотометр). В лабораториях имеется нагревательное оборудование (электроплитки, сушильные шкафы), оборудование для фильтрации под вакуумом, встряхиватель, мешалки с магнитным приводом и другое оборудование.

15. Информация о разработчиках

Бобкова Людмила Александровна, канд. хим. наук, ст. науч. сотр., кафедра неорганической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

Модуль II: Планирование эксперимента

1. Цель и планируемые результаты освоения модуля

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.
- ПК-2. Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.
- ПК-5. Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

ИПК-2.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными.

ИПК-2.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов.

ИПК-5.1. Готовит детальные планы отдельных стадий прикладных НИР и НИОКР.

2. Задачи освоения модуля

- формирование начальных общепрофессиональных и профессиональных компетенций в области планирования эксперимента;
- изучение основных понятий и концепций теории математического эксперимента;
- определение направлений в организации химического эксперимента, выбор условий проведения опытов;
- оставление детальных планов экспериментов при выполнении прикладных научно-исследовательских работ.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к профессиональному циклу, части, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Неорганическая химия и химия материалов.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 9, зачет, экзамен

5. Входные требования для освоения модуля

Для успешного освоения дисциплины студенты предварительно знакомятся с дисциплинами обязательной части профессионального блока (неорганическая, аналитическая, органическая, физическая химия и химия ВМС), а также дисциплинами обязательной части общепрофессионального блока: математика, информатика; и вариативной части: методы математической статистики в химии, физические методы исследования.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля 2 «Планирование эксперимента»)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 з.е., 216 часов, из которых по данному модулю 2 з.е., 72 часа:

– лекции: 10 ч.;

– практические занятия: 22 ч.;

в том числе практическая подготовка: 22 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание модуля 2, структурированное по темам

Тема 1. Введение

Значение и использование основ кибернетики в научно-исследовательской работе. Математическое моделирование. Математические методы планирования эксперимента. Цель и задачи методов планирования эксперимента. Общие сведения об эксперименте.

Объект исследования, критерий оптимизации, факторы и факторное пространство.

Тема 2. Концепции теории математического эксперимента

Планирование эксперимента с целью описания исследуемого объекта. Сбор, изучение и анализ имеющихся данных об объекте исследования.

Свойства матриц планирования. Выбор экспериментальной области факторного пространства. Кодирование переменных. Построение матриц планирования в полном факторном эксперименте. Построение математической модели. Вычисление коэффициентов регрессии и проверка их значимости. Проверка адекватности модели. Интерпретация модели, оценка влияния факторов на функцию отклика и принятие решения для дальнейшего продвижения к оптимуму.

Тема 3. Исследование поверхности отклика

Крутое восхождение по поверхности отклика. Движение по градиенту. Реализация плана крутого восхождения. Ортогональное планирование эксперимента второго порядка. Ротатабельное планирование эксперимента второго порядка. Каноническая форма уравнения регрессии.

Тема 4. Симплексный метод планирования эксперимента

Основные положения метода. Алгоритм проведения симплексного анализа. Достоинства, недостатки и области применения метода

9. Текущий контроль по дисциплине (модулю)

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ, тестов по лекционному материалу, выполнения домашних заданий.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Изучение модуля «Планирование эксперимента» в семестре завершается защитой индивидуального задания

Зачет проводится по результатам выполнения и защиты индивидуального задания.

Индивидуальное задание включает:

1. Анализ экспериментальных данных, предоставленных преподавателем или полученных студентом при выполнении НИР; (ИОПК-1.1, ИПК-2.1.).
2. Выбор функции отклика, факторов и факторного пространства; (ИОПК-1.2.).
3. Построение матрицы планирования и расчет математической модели; (ИОПК-1.2.).

4. Сравнение математической модели с априорной информацией и оценка влияния нескольких параметров на критерий оптимизации через анализ коэффициентов математической модели; (ИОПК-1.3.).

5. Оценка адекватности полученной модели; (ИПК-2.1.).

6. Принятие решений после проведения факторного эксперимента при получении адекватной и неадекватной математической модели; (ИПК-2.2.).

7. Расчет «мысленных» опытов для оптимизации условий ведения эксперимента (ИПК-5.1.).

Пример задания. Необходимо оптимизировать условия возгонки германия из продуктов цинкового производства. В качестве функции отклика выбрана величина массовой доли германия в продуктах возгонки. Полученные результаты проведенных опытов приведены в таблице.

Температура, °С	Время выдержки, мин.	Массовая доля восстановителя, %	Содержание германия в продукте, %
1100	30	2.3	5.2
900	30	2.3	4.1
1100	10	2.3	1.3
900	10	2.3	1.5
900	30	2.7	4.7
1100	30	2.7	6.8
900	10	2.7	2.4
1100	10	2.7	4.0

По результатам проведённого эксперимента вычислена дисперсия воспроизводимости, которая составила 0,246.

Задание:

– получите математическую модель и оцените ее адекватность. Проанализируйте влияние входных параметров на выход германия;

– на основании полученной математической модели проведите поиск оптимальных условий ведения технологического процесса.

Критерии оценивания.

Для получения оценки «зачтено» обучающийся демонстрирует:

– знание основных понятий и теорий планирования эксперимента;

– умение применять теоретические и полуэмпирические модели; обрабатывать данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик; интерпретировать математическую модель планового эксперимента;

– владеет приемами построения матриц планирования и расчета коэффициентов математической модели.

Оценку «не зачтено» получает обучающийся, ошибающийся в определениях, в построении и интерпретации математической модели, не умеющий реализовать крутое восхождение для оптимизации условий эксперимента.

На экзамен выносятся теоретические вопросы модуля «Планирование эксперимента». Содержание вопросов позволяет оценить степень сформированности компетенции ОПК-1. Продолжительность подготовки ответа по билету 1 ч, ответ 20 мин.

Примерный перечень вопросов:

1. Математическое моделирование в химии и химической технологии. Основные понятия и определения планирования эксперимента.

2. Принципы выбора факторов и факторного пространства в химическом эксперименте.

3. Факторное пространство. Выражение функции отклика через уравнение регрессии в выбранном факторном пространстве. Кодирование факторов и построение математической модели.

4. Свойства матрицы планирования. Проверка адекватности полученной математической модели.

5. Ортогональное планирование эксперимента второго порядка. Ротатабельное планирование эксперимента второго порядка. Каноническая форма уравнения регрессии.

6. Основные положения симплексного метода планирования эксперимента. Достоинства, недостатки и области применения метода.

Критерии оценивания:

«отлично» – студент дает полные, развернутые, ответы на теоретические вопросы, применяет понятийный аппарат дисциплины,

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

«удовлетворительно» – студент не может дать полного ответ на один из теоретических вопросов билета, ошибается в ответах на дополнительные вопросы преподавателя.

«неудовлетворительно» – студент не может дать ответ на один из теоретических вопросов билета, не ориентируется в теоретическом материале, не дает ответа на дополнительные вопросы.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=26021>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации

в) План практических занятий по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Адлер Ю. П. Введение в планирование эксперимента. – М. : Металлургия, 1969.

– Налимов В. В., Чернова Н. А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. – М. : Наука, 1971.

– Фиалко М. Б., Кумок В. Н. Лекции по планированию эксперимента. – Томск : Изд-во Том. ун-та, 1977.

– Марьянов Б. М., Чащина О. В., Захарова Э. А. Математические методы обработки информации в аналитической химии. – Томск : Изд-во Том. ун-та, 1988.

– Семенов С. А. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. Т.2. 2005. – 29 с.

– Волосухин В. А. Планирование научного эксперимента. – М. : ИНФРА-М. 2014

б) дополнительная литература:

– Голованов А. Н. Планирование эксперимента : учебное пособие : Том. гос. ун-т. - Томск : Томский государственный университет,

URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000427154> 2011

– Яворский В. А. Планирование научного эксперимента и обработка экспериментальных данных : методические указания к лабораторным работам / В. А. Яворский. Москва : МФТИ, 2011.

<http://sun.tsu.ru/limit/2016/000478570/000478570.pdf>

– Сидняев Н. И. Теория планирования эксперимента и анализ статистических данных. – М. : Юрайт, 2015.

- в) перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ [Электронный ресурс] . – Электрон. дан. – Томск, 2011- . URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
 - Электронная библиотека учебных материалов по химии – М. : МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/>
 - Электронно-библиотечная система Znanium.com [Электронный ресурс] / Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012- . URL: <http://znanium.com/>
 - Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000- . – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp?>

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 OneNote, 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

- Обучение осуществляется на базе:
- лекционной аудитории, оснащенной мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации (аудитория № 402 6-го учебного корпуса ТГУ). В аудитории имеется интерактивная доска;
 - лабораторной аудитории (№ 406, 6-го учебного корпуса ТГУ) для проведения практических занятий

15. Информация о разработчиках

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

Модуль III: Синтез веществ и материалов золь-гель методом

1. Цель и планируемые результаты освоения модуля

– ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

– ОПК-2. Способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности.

– ПК-2. Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

– ПК-5. Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

ИОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности.

ИОПК-2.2. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач профессиональной деятельности.

ИОПК-2.3. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

ИПК-2.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными.

ИПК-2.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов.

ИПК-5.1. Готовит детальные планы отдельных стадий прикладных НИР и НИОКР.

ИПК-5.2. Предлагает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР

ИПК-5.3. Проводит испытания инновационной продукции.

2. Задачи освоения модуля

– формирование начальных общепрофессиональных компетенций (ОПК-1, ОПК-2) и профессиональных компетенций (ПК-2, ПК-5) в области неорганической химии и материаловедения по синтезу веществ и материалов золь-гель методом;

– ознакомление с основами золь-гель синтеза веществ и материалов;

– умение планировать и проводить золь-гель синтез, анализировать полученные результаты, делать выводы;

– проводить расчеты и подбирать условия (концентрации, pH, объемы, соотношения компонентов и т.д.) проведения экспериментальной части исследования составов материалов по известным методикам.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к профессиональному циклу, части, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Неорганическая химия и химия материалов.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 9, экзамен

5. Входные требования для освоения модуля

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по дисциплинам, которые входят в обязательную часть профессионального блока: неорганическая, аналитическая, органическая, физическая химия и химия ВМС, а также по дисциплинам обязательной части общепрофессионального блока: физика и строение вещества.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 з.е., 216 часов, из которых по данному модулю 2 з.е., 72 часа:

– лекции: 10 ч.;

– практические занятия: 6 ч.;

– лабораторные работы: 16 ч.;

в том числе практическая подготовка: 22 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание модуля, структурированное по темам

Тема 1. Общие сведения о золь-гель технологии. Основные физико-химические факторы, обуславливающие получения неорганических веществ и материалов золь-гель методом

История развития золь-гель метода. Основные термины и определения. Получение сложных гомогенных оксидных систем и наноструктурных материалов и использованием химического модифицирования (восстановления, сульфирования и т.д.) для формирования наночастиц в матрице материала. Термодинамические и кинетические факторы устойчивости дисперсных систем.

Тема 2. Классификация исходных веществ используемых для получения пленок, порошков и керамики золь-гель методом.

Алкоголяты металлов – предшественники в неорганическом и металлоорганическом синтезе. Кремнийорганические соединения, кремнийорганические смолы, полисилоксановые жидкости, неорганические соли и т.д., используемые в качестве исходных веществ.

Тема 3. Реакции гидролиза, конденсации и комплексообразования как основа золь-гель метода

Строение, координационные полимеры и олигомеры, кластеры, гетерометаллические комплексы. Физико-химические процессы, протекающие в растворах и при формировании веществ и материалов под воздействием температуры. Особенности физико-химического поведения в связи с полиморфными превращениями и химические свойства полученных веществ и материалов. Классификация золь-гель процессов и материалов. Темплатный синтез.

Тема 4. Преимущества, недостатки метода

Условия проведения синтеза для получения веществ и материалов в виде тонких пленок, дисперсных порошков, керамических материалов, наночастиц в матрице материала. Области применения. Стратегия выбора исходных веществ и условий проведения синтеза при создании наноструктурных материалов.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, тестов по лекционному материалу, выполнение заданий на практических занятиях (решение кейса), выполнения лабораторных работ и написания отчетов по лабораторным работам, фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Форма контроля		Оценка в баллах	Максимальное количество баллов	Суммарный рейтинг	
Тестовый контроль на лекциях (интерактивные лекции)	Лекция 2	10	30	110	
	Лекция 3	10			
	Лекция 4	10			
Работа на лабораторных занятиях		4x2	8		
Защита лабораторного отчета		4x5	20		
Практические занятия	Кейсовое задание	1x12	12		
	Выполнение заданий на практических занятиях	2x5	10		
Экзамен	Тест	20	30		
	Письменный развернутый ответ	10			

Текущий контроль позволяет проверить приобретенные знания по ОПК-1 (ИОПК-1.1., ИОПК-1.3), ОПК-2 (ИОПК-2.1., ИОПК-2.2., ИОПК-2.3.).

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Промежуточный контроль знаний – зачет, экзамен. В курсе используется балльно-рейтинговая система оценки знаний. Итоговая оценка за семестр складывается из суммы баллов, полученных на экзамене, и баллов, набранных в семестре по результатам текущего контроля.

Для получения **зачета** и допуска к экзамену необходимо набрать не менее 50 % баллов от текущего контроля, который составляет 40 б. (рейтинг текущего контроля 80 б). Суммарный рейтинг курса (с экзаменом) – 110 б.

Экзамен проводится в тестовой и письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Первая часть представляет собой тест из 20 вопросов, проверяющих ОПК-1, ОПК-2. Ответы на вопросы первой части даются путем выбора из списка предложенных. Правильный ответ на вопрос оценивается в 1 б.

Вторая часть содержит один вопрос, проверяющий ПК-3, ПК-4. Ответ на вопрос второй части дается в развернутой форме.

Примерный перечень вопросов первой части:

1. Силы, которые необходимо учитывать в золь системах, это:
 - а) ван-дер-ваальсовы;
 - б) гравитации;
 - в) притяжения и отталкивания между поверхностными зарядами;
 - г) ван-дер-ваальсовы и притяжения и отталкивания между поверхностными зарядами.

2. Основными в потенциалобразующем слое мицелл, возникших в ходе химической реакции между азотнокислым серебром (AgNO_3) и иодистым натрием (NaI) при избытке AgNO_3 , являются ионы:

а) Na^+ ; б) Ag^+ ; в) I^- ; г) NO_3^- .

3. Агрегативная устойчивость гидрофобного золя с возрастанием температуры:

а) возрастает; б) не изменяется; в) убывает; г) зависит от растворителя.

4. Процессы, при которых, может происходить образование фрактальных кластеров, связанных с агрегационными явлениями, это:

а) осаждение; б) электролиз; в) фильтрация; д) агрегация; г) флокуация; е) все перечисленные.

5. Эффективным методом анализа физико-химических процессов, происходящих в золь-гель системах, является термогравиметрия. Аналитическим откликом, преобладающим на стадии удаления растворителей, летучих продуктов деструкции и химически связанной воды, является процесс:

а) экзотермический с уменьшением массы; б) эндотермический с увеличением массы; в) эндотермический с уменьшением массы; г) экзотермический с увеличением массы.

6. Размеры мицелл при увеличении концентрации ионов в растворе:

а) увеличиваются; б) уменьшаются; в) не изменяются; г) зависят от растворителя.

Примерный перечень вопросов второй части

1. Особенности золь-гель синтеза золей на основе тетраэтоксисилана, содержащих легирующие неорганические соединения (на примере фосфоросиликатных или боросиликатных золей).

2. Опишите синтез тонкопленочного материала на основе TiO_2 по золь-гель технологии. Укажите, какие основные факторы влияют на гелеобразование. Обоснуйте выбор прекурсоров, растворителя, катализатора, температурных режимов для получения тонкой пленки TiO_2 .

Максимальный балл за ответ на вопрос из второй части экзамен – 10.

Критерии оценивания:

10-8. Полный безошибочный ответ с правильным применением понятий и определений, с грамотным использованием необходимых терминов и понятий.

8-6. Правильный и достаточно полный, не содержащий существенных ошибок ответ. Оценка может быть снижена за отдельные несущественные ошибки.

6-4. Недостаточно полный объем ответа, наличие ошибок и некоторых пробелов в знаниях.

Менее 4. Неполный объем ответов, наличие ошибок и пробелов в знаниях, поверхностный ответ.

Итоговая оценка учитывает результаты экзамена и рейтинга семестра: суммарный рейтинг курса – 110 баллов.

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

88–110 «отлично»,

71–87 «хорошо»,

70–56 «удовлетворительно»,

Менее 55 баллов «неудовлетворительно».

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=26020>

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

- в) Методические указания по проведению лабораторных работ.
- г) Методические указания к написанию отчета.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Шабанова Н. А., Саркисов П. Д. Золь-гель технологии. Нанодисперсный кремнезем. // М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 328 с.

<https://e.lanbook.com/reader/book/4356/#2>

– Борило Л. П. Тонкопленочные неорганические наносистемы / Л. П. Борило, [под ред. В. В. Козика]; Томский гос. ун-т. – Томск : Томский государственный университет, 2012. URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000464064>

– Мошников В. А., Таиров Ю. М., Хамова Т. В., Шилова О. А. Золь-гель технология микро- и нанокompозитов. // М. : Лань, 2013. – 304 с.

б) дополнительная литература:

– Рыжонков Д. И., Левина В. В. Нанотехнологии. М. : «БИНОМ. Лаборатория знаний», 2012. – 365 с. <https://e.lanbook.com/reader/book/3134/#1>

– Асланов Л. А., Ищенко А. А., Фетисов Г. В. Нанокремний: свойства, получение, применение, методы исследования и контроля. // М. : Физматлит, 2012. – 647 с. <https://e.lanbook.com/reader/book/5271/#8>

– Salwa A. Synthesis of Zinc Oxide by Sol–Gel Method for Photoelectrochemical Cells. Singapore. // Springer Singapore: Imprint., 2014, 51 p. <https://koha.lib.tsu.ru/cgi-bin/koha/opac-detail.pl?biblionumber=404700>

– Aparicio M., Jitianu A. Sol-Gel Processing for Conventional and Alternative Energy Klein. // Boston, MA: Springer US, 2012. – 397 p. <https://koha.lib.tsu.ru/cgi-bin/koha/opac-detail.pl?biblionumber=355049>

в) ресурсы сети Интернет:

– Образовательная программа «Перспективные неорганические материалы со специальными функциями» МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/education-program/spec-inorg/7.html>

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

Обучение дисциплине осуществляется с использованием следующих площадей и оборудования:

– лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации; интерактивной доской (аудитория № 402 6-го учебного корпуса ТГУ);

– лабораторные аудитории (№ 102 6-го учебного корпуса ТГУ).

Лаборатории оснащены вытяжными и сушильными шкафами, муфелями, электроплитками, дистилляторами, центрифугами, термометрами; стеклянной и фарфоровой посудой; необходимыми для выполнения лабораторных работ реактивами.

15. Информация о разработчиках

Лютова Екатерина Сергеевна, канд. техн. наук, кафедра неорганической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.