

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана химического факультета
А.С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Термический анализ

по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Химия»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Бакалавр

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений.

– ОПК-2. Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием.

– ПК-1. Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.

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-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе.

– ИОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

– ИПК-1.1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР.

– ИПК-1.2. Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР.

– ИПК-1.3. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР.

– ИПК-1.4. Готовит объекты исследования.

2. Задачи освоения дисциплины

– сформировать у студентов представления о теоретических основах термического анализа; физических принципах работы и особенностях конструкции и программного обеспечения различных термоаналитических приборов; основных областях применения различных видов анализа; стандартных методиках обработки результатов термического анализа;

– научить выбирать и обосновывать условия проведения термического анализа для решения конкретных исследовательских задач;

– научить интерпретировать полученные данные, в том числе с использованием современного программного обеспечения и литературных данных, и делать выводы о составе исходных и промежуточных соединений, конечных продуктов, а также о механизме реакций термической деструкции исследуемых объектов;

– научиться проводить расчет кинетических параметров реакций по результатам термического анализа.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

Дисциплина входит в Модуль Неорганическая химия и химическое материаловедение

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 8, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия» «Химия ВМС», «Физика», «Информатика», «Методы математической статистики в химии», «Физические методы исследования».

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часа, из которых:

– лекции: 12ч.;

– семинарские занятия: 0 ч.;

– практические занятия: 0 ч.;

– лабораторные работы: 20 ч.,

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Термические методы анализа

Терминология в термическом анализе. Классификация термических методов анализа, их достоинства и недостатки. Экспериментальное оборудование, устройство и принцип действия основных современных приборов, используемых в термическом анализе. Комплексные методы.

Тема 2. Термогравиметрия. Устройство и принцип действия приборов

Устройство и принцип работы синхронного термоанализатора. Преимущества и недостатки термогравиметрии. Форма и характеристики термогравиметрической кривой. Факторы, влияющие на характер термогравиметрических кривых. Термогравиметрия по производной.

Тема 3. Дифференциальный термический анализ и дифференциальная сканирующая калориметрия

Графическое представление данных в различных функциональных зависимостях. Теоретические основы дифференциального термического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии. Физико-химическая природа пиков кривых дифференциального термического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии. Расчет тепловых эффектов наблюдаемых физико-химических превращений в дифференциальном термическом анализе. Области применения методов дифференциального термического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии. Методика описания данных дифференциального термического анализа на

примере термического разложения неорганических соединений: комплексных соединений, кристаллогидратов.

Тема 4. Неизотермическая кинетика в термическом анализе

Теоретическое обоснование возможности расчета кинетических параметров по результатам термического анализа. Основное кинетическое уравнение и методы расчета энергии активации, порядка реакции и предэкспоненциального множителя физико-химических процессов по результатам термогравиметрии и дифференциального термического анализа. Расчет кинетических параметров термического разложения неорганических веществ и материалов.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, выполнения лабораторного практикума и написания отчетов по работе, оценки выполнения практических домашних и индивидуальных заданий по обработке термограмм твердых веществ и материалов, полученных на синхронном термоанализаторе STA 449 C Jupiter, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр. К зачету допускаются студенты, выполнившие лабораторный практикум в полном объеме. В ходе выполнения лабораторного практикума и при проведении текущего контроля проверяются знания, получаемые по ОПК-1 (ИОПК-1.1, ИОПК-1.2, ИОПК-1.3), ОПК-2 (ИОПК-2.1, ИОПК-2.3, ИОПК-2.4) и ПК-1 (ИПК-1.2, ИПК-1.3, ИПК-1.4).

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет проводится по результатам выполнения и защиты индивидуального задания, проверяющего знания по ОПК-1 (ИОПК-1.3) и ПК-1 (ИПК-1.1., ИПК-1.3). Продолжительность подготовки студентом ответа – 30 минут, ответ 20 минут.

Примерный перечень индивидуальных заданий:

Задание 1. Описание термограммы термического разложения $\text{MnCl}_2 \times 4\text{H}_2\text{O}$ и расчет кинетических параметров реакции дегидратации.

1. На основании представленных результатов термического анализа соли $\text{MnCl}_2 \times 4\text{H}_2\text{O}$ (термограмма выдается преподавателем), выполненного на синхронном термоанализаторе STA 449 C Jupiter:

- определите условия проведения съемки;
- опишите наблюдаемые на термограмме физико-химические процессы: изменение массы, тепловые эффекты и их энергетику,
- составьте материальный баланс процесса термической деструкции, запишите предполагаемые реакции физико-химических превращений, используя литературные данные и дайте рекомендации по подбору программы дополнительного анализа с целью разделения по температурному диапазону близлежащих последовательных реакций.

2. Проведите расчет кинетических параметров (энергии активации, порядка, предэкспоненциального множителя), обосновав выбор температурного диапазона и стадии термической деструкции, термогравиметрических, термографических данных для обработки:

- рассчитайте степень превращения для выбранного температурного интервала;
- выберите 2 метода расчета кинетических параметров и с помощью стандартных программ проведите расчеты и оцените энергию активации и порядок реакции;

– на основании полученных результатов сделайте выводы о предполагаемом механизме наблюдаемого физико-химического превращения.

Задание 2. Описание термограммы термического разложения $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 5\text{H}_2\text{O}$ и расчет кинетических параметров реакции дегидратации»

1. На основании представленных результатов термического анализа соли $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 5\text{H}_2\text{O}$ (термограмма выдается преподавателем), выполненного на синхронном термоанализаторе STA 449 C Jupiter

– определите условия проведения съемки;
– опишите наблюдаемые на термограмме физико-химические процессы: изменение массы, тепловые эффекты и их энергетику,
– составьте материальный баланс процесса термической деструкции, запишите предполагаемые реакции физико-химических превращений, используя литературные данные и дайте рекомендации по подбору программы дополнительного анализа с целью разделения по температурному диапазону близлежащих последовательных реакций.

2. Проведите расчет кинетических параметров (энергии активации, порядка, предэкспоненциального множителя), обосновав выбор температурного диапазона и стадии термической деструкции, термогравиметрических, термографических данных для обработки;

– рассчитайте степень превращения для выбранного температурного интервала;

– выберите 2 метода расчета кинетических параметров и с помощью стандартных программ проведите расчеты и оцените энергию активации и порядок реакции;

– на основании полученных результатов сделайте выводы о предполагаемом механизме наблюдаемого физико-химического превращения.

Зачет получает студент, который на защите индивидуального задания показывает знание понятийного аппарата дисциплины «Термический анализ»; умение анализировать ход термоаналитических кривых; характеризует этапы термической деструкции вещества, используя справочную, учебную и научно-техническую литературу, владеет методами расчета кинетических параметров процессов. Студент может допускать некоторые неточности в расчетах или описании термограмм, которые он исправляет сразу после наводящих вопросов преподавателя.

Студент, не выполнивший индивидуальное задание, не умеющий провести сопоставительный анализ хода термоаналитических кривых (ТГ-, ДТГ-, ДТА- и ДСК-кривых) для описания процессов термической деструкции веществ и материалов не получает зачета по дисциплине.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=23422>

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

в) План лабораторных занятий по дисциплине.

г) Методические указания по проведению лабораторных работ.

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 учебная литература:

- Шестаков 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);
- программное обеспечение к синхронному термоанализатору STA 449 C Jupiter

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 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

Аудитория для проведения занятий лекционного типа, 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), в которой установлен современный синхронный термоанализатор STA 449 Jupiter сопряженный с

масс-спектрометром QMS 403 Aeolos, позволяющий проводить исследование термического поведения неорганических, органических, высокомолекулярных веществ и материалов в инертной и окислительной атмосфере в диапазоне температур 25–1500 °С.

15. Информация о разработчиках

Селюнина Лидия Александровна, кан. хим. наук, кафедра неорганической химии
Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент