ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И МЕХАНОХИМИИ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХТТМ СО РАН)

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИХТТМ СО РАН

д.х.н. _____ А.П. Немудрый
«25» июня 2018 г.

Рабочая программа дисциплины

КИНЕТИКА ГЕТЕРОГЕННЫХ РЕАКЦИЙ

основной образовательной программы высшего образования –
программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) подготовки:
«Химия твердого тела»

Новосибирск 2018

Рабочая программа дисциплины «Кинетика гетерогенных реакций» составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации).
ФГОС ВО введен в действие приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 N 869.

Программа утверждена на заседании Ученого совета ИХТТМ СО РАН, протокол № 6 от 25 июня 2018 г.

Программу разработал:
доцент ИХТТМ СО РАН, канд. хим. наук Чижик С.А.

Ответственный за образовательную программу
д.х.н., профессор О.И. Ломовский

1. Цели и задачи дисциплины.

Цель дисциплины – дать теоретические представления и практические навыки анализа кинетики различных типов гетерогенных твердофазных процессов.

Данный курс знакомит аспирантов с общими принципами кинетики твердофазных реакций. Даются методы описания кинетики топохимических реакций, основанные на геометрических подходах и на представлении о независимости процессов зарождения и роста зародышей новой фазы, границы применимости известных кинетических моделей. Особое внимание уделено проблеме корректного выбора модели и однозначности определения скоростей реакций. Отдельная глава посвящена анализу зависимости скорости реакции от давления и температуры и связанных с этим ошибок в определении энергии активации обратимых реакций. На этом базисе строится физическая модель реакционной зоны и обсуждаются подходы к концентрационному описанию движения реакционной зоны, основанные на нелинейных диффузионно-кинетических уравнениях. Вторая часть курса ориентирована на твердофазные реакции, контролируемые диффузией. В заключительной части курса рассматриваются кинетические подходы к анализу кинетики твердофазных реакций, протекающих в условиях импульсной активации (механохимической, радиационно-термической). Показаны источники методической погрешности, связанные со специфическими условиями эксперимента, которые необходимо учитывать при корректном кинетическом описании.

Задачи дисциплины: ознакомление аспирантов с теорией в рамках программы курса; обучение работе с литературными источниками; обучение аспирантов пользоваться полученными знаниями при решении практических задач.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Кинетика гетерогенных реакций» относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» основной образовательной программы аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки», реализуемой в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН).

Дисциплина «Кинетика гетерогенных реакций» является составной частью модуля «Химия твердого тела»; направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена и обязательна для освоения в 1-й – 2-й годы обучения.

Результаты освоения дисциплины «Кинетика гетерогенных реакций» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- Физико-химическая механика и механохимия;
- Реакционная способность твердых тел;
- Физические методы исследования твердых тел;
- Структура и свойства современных материалов.

Уровень начальной подготовки аспиранта: для успешного освоения дисциплины необходимо знать основные положения общей, неорганической, аналитической химии, физики, высшей математики, иметь представления об использовании компьютерной техники для обработки результатов химического эксперимента. Дисциплина закладывает знания и навыки для подготовки кандидатской диссертации.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине.

Код компе-	Содержание компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине

тенции		
Универсальные компетенции		
УК-1	Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.	**Знать** основные фундаментальные явления и эффекты, современное состояние, теоретические работы и результаты экспериментальных исследований в области кинетики гетерогенных реакций.
Общепрофессиональные компетенции		
ОПК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий.	**Знать** основные базовые методы проведения физико-химических экспериментов в области кинетики гетерогенных реакций.
ОПК-3	Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.	**Знать** обучающий материал по кинетике гетерогенных реакций всесторонне и глубоко, чтобы использовать его в своей преподавательской деятельности.
Профессиональные компетенции		
ПК-1	Владение методологией теоретических и экспериментальных исследований в области химии твердого тела, владение культурой научного исследования в области химии твердого тела, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных технологий.	**Знать** основные направления, проблемы, теории и методы по проблемам кинетических исследований гетерогенных реакций.
ПК-2	Способность к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области химии твердого тела с учетом правил соблюдения авторских прав.	**Уметь** определять экспериментальные методы, необходимые для получения конкретной информации о кинетике гетерогенных реакций.
ПК-4	Владение фундаментальными знаниями в основных разделах химии твердого тела, включая проблемы строения и реакционной способности твердых веществ, методы синтеза различных классов твердофазных соединений, методы исследования свойств	**Знать** общие принципы кинетики твердофазных реакций. **Уметь** формулировать требования к образцам и условиям проведения кинетического эксперимента; выполнять первичную обработку кинетических кривых с целью применимости той или иной кинетической модели.

	твердофазных веществ и материалов; владение техникой экспериментальных исследований; умение использовать информационно-поисковые системы в области химии твердого тела.	**Владеть** техникой экспериментальных исследований при проведении кинетических экспериментов в области химии твердого тела; методами определения энергии активации и параметров зависимости скорости твердофазных реакций от давлений/концентраций.

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, всего 72 академических часа, из которых 40 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (36 часов - занятия лекционного типа, 2 часа - групповые консультации, 2 часа - мероприятия промежуточной аттестации), 32 часа составляет самостоятельная работа аспиранта.

4.1. Объем и структура дисциплины:

Таблица 4.1

Показатель объема дисциплины и вид деятельности		**Семестр**
		2
	Объем дисциплины в зачетных единицах	2
	Объем дисциплины в часах	72
	Всего занятий в контактной форме, час	40
	Лекции, час.	36
	Практические занятия, час.	-
	Лабораторные занятия, час	-
	из них в активной и интерактивной форме, час.	-
	Аттестация, час	2
	Консультации, час.	2
	Самостоятельная работа, час.	32
	Вид аттестации	Зачет

4.2. Содержание дисциплины:

Таблица 4.2

Наименование разделов (тем) дисциплины	Количество часов				Контроль
	Лекции	**Сам. работа**	**Консульт.**	**Зачет**	

Введение. Общие принципы формулирования кинетических уравнений. Особенности процессов на движущихся границах раздела. Растворение твердых тел. Проблемы концентрационных зависимостей скоростей растворения и диффузионного контроля.	6	2			Опрос по ходу лекций
Основные представления о топохимических превращениях. Основное кинетическое уравнение. Представления о реакционной зоне и механизмах ее продвижения. Кинетика топохимических превращений с зародышеобразованием в объеме реагента. Уравнения Аврами и Ерофеева.	6	4			Опрос по ходу лекций
Аффинность кинетических кривых как основа для анализа температурных и концентрационных зависимостей скоростей реакций. Кинетика топохимических реакций, инициируемых с поверхности реагента. Общий анализ кинетики по Дельмону. Кинетика реакций с индуцированным зародышеобразованием. Уравнение Праута-Томпкинса.	6	4			Опрос по ходу лекций
Внешнедиффузионный контроль в гетерогенных реакциях. Метод равнодоступной поверхности (смешанная кинетика). Кинетика в смесях твердых веществ (диффузионный контроль). Возможности оптимизации процессов высокотемпературного синтеза керамических материалов.	6	2			Опрос по ходу лекций
Неизотермические и другие нестационарные методы в кинетике твердофазных реакций. Особенности описания кинетики механохимических реакций.	4	2			Опрос по ходу лекций
Анализ кинетики различных типов гетерогенных твердофазных процессов, решение практических задач.	8	4			Опрос по ходу лекций
		14	2	**2**	**Зачет**
Итого	**36**	**32**	**2**	**2**	**72 часа**

Программа курса лекций:

Введение. Общие принципы формулирования кинетических уравнений. Понятие о границе раздела и зоне реакции.

Кинетика испарения/сублимации. Особенности процессов на движущихся границах раздела.

Растворение твердых тел. Проблемы концентрационных зависимостей скоростей растворения и диффузионного контроля. Учет изменения поверхности (геометрический контроль).

Основные представления о топохимических превращениях. Простейшая модель - уравнение сокращающейся сферы и границы его применимости.

Основное кинетическое уравнение. Представления о реакционной зоне и механизмах

ее продвижения.

Кинетика топохимических превращений с зародышеобразованием в объеме реагента. Уравнения Аврами и Ерофеева.

Аффинность кинетических кривых как основа для анализа температурных и концентрационных зависимостей скоростей реакций.

Кинетика топохимических реакций, инициируемых с поверхности реагента. Общий анализ кинетики по Дельмону.

Кинетика реакций с индуцированным зародышеобразованием. Уравнение Праута-Томпкинса.

Внешнедиффузионный контроль в гетерогенных реакциях. Метод равнодоступной поверхности (смешанная кинетика).

Кинетика в смесях твердых веществ (диффузионный контроль). Покрываемый и покрывающий реагенты и соответствующие кинетические модели. Уравнения Яндера, Гинстлинга-Броунштейна, Картера и др.

Возможности оптимизации процессов высокотемпературного синтеза керамических материалов.

Неизотермические и другие нестационарные методы в кинетике твердофазных реакций.

Особенности описания кинетики механохимических реакций.

Анализ кинетики различных типов гетерогенных твердофазных процессов, решение практических задач. (I) Требования к образцам и условиям проведения кинетического эксперимента.

Анализ кинетики различных типов гетерогенных твердофазных процессов, решение практических задач. (II) Первичная обработка кинетических кривых.

Анализ кинетики различных типов гетерогенных твердофазных процессов, решение практических задач. (III) Определение энергий активации.

Анализ кинетики различных типов гетерогенных твердофазных процессов, решение практических задач. (IV) Определение параметров зависимости скорости от давлений/концентраций.

5. Самостоятельная работа обучающихся.

Таблица 5.1

Виды работ (Темы для самостоятельного изучения)	***Количество часов***
Работа с конспектами лекций, изучение основной и дополнительной литературы; подготовка к текущему и промежуточному контролю знаний.	32

6. Образовательные технологии.

Занятия проводятся в лекционной форме с элементами интерактивного обучения, обучения на основе опыта. В дополнение к традиционным лекционным формам аспирантам предоставляется возможность разобрать научные задачи, находящиеся в рамках тематики курса и представляющие интерес для аспирантов (по выбору аспирантов).

7. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

7.1. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль. Текущий контроль осуществляется в виде опроса по ходу лекций.

Промежуточная аттестация. Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в форме зачета. Шкала оценивания: «зачет – незачет». Вопросы к зачету отражают основные темы курса. Перед зачетом проводится консультация.

7.2. Контролирующие материалы.

***Вопросы для подготовки к зачету*:**

1. Общие принципы формулирования кинетических уравнений. Понятие о границе раздела и зоне реакции.
2. Уравнение сокращающейся сферы и границы его применимости.
3. Кинетика топохимических превращений с зародышеобразованием в объеме реагента. Уравнения Аврами и Ерофеева.
4. Аффинность кинетических кривых как основа для анализа температурных и концентрационных зависимостей скоростей реакций.
5. Кинетика топохимических реакций, инициируемых с поверхности реагента. Общий анализ кинетики по Дельмону.
6. Кинетика реакций с индуцированным зародышеобразованием. Уравнение Праута-Томпкинса.
7. Внешнедиффузионный контроль в гетерогенных реакциях. Метод равнодоступной поверхности (смешанная кинетика).
8. Кинетика в смесях твердых веществ (диффузионный контроль).
9. Низкотермические методы в кинетике твердофазных реакций.
10. Особенности описания кинетики механохимических реакций.

7.3. Критерии оценивания.

Таблица 7.3

Оценка	Критерии оценки
«Зачет»	Аспирант строит ответ логично. Ответ может содержать ряд несущественных неточностей, но основные понятия раскрываются правильно. Аспирант в целом уверенно отвечает на дополнительные вопросы, хотя может наблюдаться некоторая неуверенность или неточность при ответе на дополнительные вопросы. Аспирант при ответе грамотно использует научную лексику.
«Незачет»	Аспирант не может раскрыть содержание основных понятий и теорий. Проявляет стремление подменить научное обоснование проблемы рассуждением бытового плана. Ответ содержит ряд серьезных неточностей. Преобладает бытовая лексика.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

8.1. Основная литература:

1. Франк-Каменецкий Д.А. *Основы макрокинетики. Диффузия и теплопередача в химической кинетике.* 4-е изд. ИД "Интеллект", 2008. https://www.studmed.ru/frank-kameneckiy-da-osnovy-makrokinetiki-diffuziya-i-teploperedacha-v-himicheskoy-kinetike_68c4ccad5a3.html

8.2. Дополнительная литература:

1. Дельмон Б. *Кинетика гетерогенных реакций.* М.: Мир, 1972.
2. Барре П. *Кинетика гетерогенных процессов.* М.: Мир, 1976.
3. Будников П.П., Гинстлинг А.М. *Реакции в смесях твердых веществ.* М.: Стройиздат, 1971.
4. Третьяков Ю.Д. *Твердофазные реакции.* М.: Химия, 1978. (ЭБ ИХТТМ СО РАН).
5. Розовский А.Я. *Кинетика топохимических реакций.* М., 1974.
6. Ляхов Н.З. *Кинетика твердофазных реакций. Вып. 1, Топохимическая кинетика.* Новосибирск: Изд-во НГУ, 1982.

8.3. Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Программное обеспечение

1. MS Windows 7.
2. Офисный пакет LibreOffice.
3. Антивирусная программа Dr.Web.
4. Программа просмотра файлов PDF Acrobat Reader.
5. Интернет–браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome, Opera.

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- Научная электронная библиотека elibrary.ru (http://elibrary.ru);
- Реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных Web of Science http://apps.webofknowledge.com/UA_GeneralSearch_input.do?product=UA&search_mode=GeneralSearch&SID=N1ueGpOv8ndHm2xXVE2&preferencesSaved=
- Реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных Scopus https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic
- Полнотекстовая база данных ScienceDirect – ведущая информационная платформа Elsevier для ученых, преподавателей, студентов (https://www.sciencedirect.com);
- Google Scholar – полнотекстовый поиск в научных источниках – журналах, тезисах, книгах (https://scholar.google.ru);
- DOAJ – Directory of Open Access Journal – каталог журналов открытого доступа (www.doaj.org) - сайт, на котором расположены ссылки на открытые полнотекстовые научные журналы по всем темам и на всех языках;
- Электронные ресурсы удаленного доступа ГПНТБ России http://www.gpntb.ru/elektronnye-resursy-udalennogo-dostupa.html
- Электронные каталоги и базы данных ГПНТБ СО РАН http://webirbis.spsl.nsc.ru/irbis64r_01/cgi/cgiirbis_64.exe?C21COM=F&I21DBN=CAT&P21DBN=CAT
- Электронная библиотека ГПНТБ СО РАН http://www.spsl.nsc.ru/win/nelbib/index-new1.html.
- Электронная библиотека учебных материалов по химии http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

- Ноутбук, медиа-проектор, экран.
- Программное обеспечение для демонстрации слайд-презентаций.

10. Язык преподавания.

Дисциплина преподается на русском языке.