

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ.Н.С.КУРНАКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИОНХ РАН)

Рабочая программа дисциплины
КИНЕТИКА ТВЕРДОФАЗНЫХ РЕАКЦИЙ

Направление подготовки
04.06.01 – ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность (профиль) программы
Физическая химия

Квалификация (степень)
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Нормативный срок обучения – 4 года
Форма обучения – очная

Москва
2018 г.

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Основная цель учебного курса «Кинетика твердофазных реакций» дать аспирантам научные представления о термодинамике, кинетике и перспективах развития твердофазных реакций. Задача это не простая, если учесть, что данному разделу науки не уделяется достаточного внимания в общем курсе физической химии. Кинетика твердофазных реакций изучается узким кругом студентов, специализирующихся в области создания конструкционных и функциональных материалов, в частности, на факультете Наук о материалах МГУ.

Основными задачами изучения учебного курса является формирование у аспирантов знаний по наиболее актуальным вопросам химии твердофазных и гетерогенных реакций.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Настоящая дисциплина «Кинетика твердофазных реакций» - модуль основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки по специальности 02.00.04 – Физическая химия. Дисциплина относится к группе дисциплин по выбору.

Обучающийся по данной дисциплине должен иметь фундаментальные представления по физической химии. Для изучения данной дисциплины необходимо высшее образование с освоением курса физическая химия для химических специальностей.

Это дисциплина, является частью основополагающих курсов - «Неорганическая химия», «Физическая химия» и «Химии твердого тела», изучаемых в ВУЗах. В курсе рассматриваются также вопросы, связанные с дефектами в кристаллах, и нестехиометрия.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

Универсальные компетенции:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);

- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3).

Общепрофессиональные компетенции:

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

- готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);

- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

Профессиональные компетенции:

- способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 Физическая химия (ПК-1);

- владение методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-2).

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 часа).

Дисциплина изучается на втором году аспирантуры. Дисциплина состоит из 5 разделов.

4.1 Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц.	Лаб.	Прак	КСР.		
1	Кинетика твердофазных реакций	144	56	16	40	-	-	88	кандидатский экзамен по специальности

4.2 Содержание дисциплины

4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел Дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа
		Лек.	Лаб.	Пр.	КСР	
1.	Термодинамика и механизмы твердофазных реакций.	4	8	-	-	16
2.	Кинетика твердофазных реакций. Активное состояние реагентов и его роль в твердофазных процессах.	3	8	-	-	18
3.	Физико-химические методы исследования твердых неорганических веществ. Общие вопросы кристаллохимии. Точечные и прострапственные группы	3	8	-	-	18

	симметрии.					
4.	Дефекты в кристаллах и нестехиометрия. Фазовые переходы.	3	8	-	-	18
5.	Гетерогенные химические реакции и кинетика разложения твердых тел.	3	8	-	-	18

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1.	Термодинамика и механизмы твердофазных реакций.	Термодинамическая оценка протекания твердофазных реакций. Термодинамические параметры твердофазных реакций и приближенные методы расчета их. Термодинамическое описание фаз переменного состава. Явления разупорядочения в кристаллах. Точечные дефекты. Взаимодействие точечных дефектов, основные типы взаимодействия. Физико-химические факторы, определяющие механизм твердофазных реакций. Теория твердофазного взаимодействия. Механизм важнейших твердофазных реакций. Структурная классификация полиморфных превращений, монотропные, энантиотропные и мартенситные превращения.	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
2.	Кинетика твердофазных реакций. Активное состояние реагентов и его роль в твердофазных процессах.	Методы изучения кинетики твердофазных реакций. Особенности кинетики твердофазных реакций. Кинетические модели изотермической и политермической кинетики. Способы определения основных параметров уравнения кинетики твердофазных реакций. Диффузные модели, модели лимитируемые процессами на границе раздела фаз и модели зародышеобразования. Энергии активации твердофазных реакций. Способы оценки активного состояния твердых фаз. Активирование твердофазных реагентов изменением их химической и термической предистории.	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
3.	Физико-химические методы исследования твердых неорганических веществ. Общие	Структурная характеристизация. Рентгеновская и электронная дифракции. Электронная микроскопия. Рентгеновская абсорбционная спектроскопия (EXAFS, XANES), оже-спектроскопия.	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

	вопросы кристаллохимии. Точечные и пространственные группы симметрии.	Спектроскопия магнитного резонанса (ЯМР, ЭПР) и электронная спектроскопия. Термический анализ. Точечные группы, пространственные группы, кристаллохимия. Точечные группы 222, $mm2$, mmm , 32. Описательная кристаллохимия. Металлы, сплавы, ионные структуры, структуры с ковалентными и молекулярными решетками.	
4.	Дефекты в кристаллах и нестехиометрия. Фазовые переходы.	Точечные дефекты, равновесие точечных дефектов. Дефекты Шоттки, Френкеля Центры окраски. Дислокации, планарные дефекты. Кристаллографический сдвиг, блочные структуры. Нестехиометрия и дефекты. Термодинамическая классификация фазовых переходов. Классификация Бюргера, Уббелоде. Кинетика фазовых переходов, критический размер зародышей и скорость образования зародышей. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов.	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
5.	Гетерогенные химические реакции и кинетика разложения твердых тел.	Кинетика типовых гетерогенных процессов. Реакции в системе газ-твердое тело. Феноменологическая теория топохимических реакций, кинетический анализ топохимических реакций. Реакции газа с поверхностью твердого тела. Физическая модель. Топохимическая природа разложения твердых тел. Формальная теория. Вывод общих кинетических уравнений методами Авраами, Мампеля, Колмагорова. Уравнения Поляни-Вигнера и Праутв-Томпкинса. Эндотермические и экзотермические реакции разложения. Фотолиз твердых тел.	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

5. Образовательные технологии

Основными образовательными технологиями, используемыми при реализации учебной работы, являются лекции, семинары ведущих отечественных и зарубежных ученых и консультации с преподавателями; проведение лабораторных работ в лаборатории, участие обучаемых в научной работе и выполнение исследовательских проектов.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Самостоятельная работа аспирантов предполагает проработку лекционного материала в читальном зале библиотеки, в лабораториях, с доступом к лабораторному оборудованию,

приборам, базам данных, к ресурсам Интернет. Кроме того, аспирантам предлагается конспектирование и проработка материала научных докладов на заседаниях Ученого Совета ИОНХ РАН, его секций, диссертационных советов по специальности, участие в работе научных конференций и школ, работу в библиотеке и на сайтах электронных изданий.

Форма контроля знаний – кандидатский экзамен в конце курса, включающий теоретические вопросы.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины аспиранты используют основную и дополнительную литературу, рекомендованную преподавателем. Кроме того, преподаватель может рекомендовать аспиранту ознакомиться с дополнительными материалами методического характера.

Название электронного или печатного ресурса (основная или дополнительная)	Тип	Кол-во экз.
Основная литература:		
Третьяков Ю.Д. Твердофазные реакции. М.: Химия. 1978.	печ.	3
Третьяков Ю.Д., Кнотько А.В. Химия твердого тела. Уч.пособие-М.:ACADEMIA,2006-302с.	печ.	1
М. Браун, Д. Доллимор, А. Галвей. Реакции твердых тел. М.: Мир. 1983.	печ.	1
А. Вест. Химия твердого тела. Тт. 1-2. М.: Мир. 1988	печ.	2
Болдырев В.В. Влияние дефектов в кристаллах на скорость термического разложения твердых веществ.Томск, изд-во Томского унив-та,1963-246с.	печ.	3
Получение, структура, физико-химические характеристики соединений AlnBS3 (A=Sr, Eu; Ln=La-Lu; B=Cu, Ag) / Андреев О.В. и др., 2014	печ.	1
Неудачина Л.К. Физико-химические основы применения координационных соединений, 2014	печ.	1
Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем, VII, 2012	печ.	1
Дополнительная литература:		
Розовский А.Я. Гетерогенные химические реакции. М.: Наука. 1980.	печ.	1
Д. Янг. Кинетика разложения твердых тел. М.: Москва. 1969.	печ.	3
Драго А. Физические методы в химии. М.: Мир. 1981. тт.1-2.	печ.	3
Третьяков Ю.Д., Путляев В.И. Введение в химию твердофазных материалов. М.: Наука. 2006.	печ.	1
Ф. Крёгер. Химия несовершенных кристаллов. М.: Мир. 1969.	печ.	3
Нестехиометрические соединения (под ред. Л.Манделькорна). М., 1971.	печ.	1
Физические методы исследования неорганических веществ.(под ред. А.Б. Никольского) М.: Изд-во Академия. 2006.	печ.	1
Поверхностно-усиленная рамановская спектроскопия (SERS): аналитические, биофизические и биомедицинские приложения / Шлюкер С. (ред. ориг. изд.) ; Лушникова А.А. (пер. с англ. и ред.) М.: Техносфера, 2017;	печ.	1
Майер Вероника Р. Практическая высокоэффективная жидкостная хроматография / Майер В.Р.; Петухов Иван Алексеевич [и др.] (пер.). — Изд. 5-е. — М.: Техносфера, 2017.	печ.	1
Естественные и технические науки (ВАК), RUS, 2016 (10, 11), Журнал	печ.	1
Гак Е.З. Магнитные поля и водные электролиты — в природе, научных исследованиях, технологиях / Гак Е.З. — СПб.: Элмор, 2013	печ.	1
Современные проблемы физической химии наноматериалов / акад. А.Ю.Цивадзе, 2008	печ.	1

Сандомирский С.Г. Расчет и анализ размагничивающего фактора ферромагнитных тел, 2015	печ.	1
Порошина И.А. Развитие методов структурной рефрактометрии и кристаллооптики для дисперсных минералов и неорганических соединений, 2014	печ.	1

Интернет-ресурсы:

Институт имеет доступ к информационным ресурсам E-library, Web of Science, Scopus, Springer.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

В ИОНХ РАН имеется необходимая материально-техническая база для проведения лекций и лабораторных занятий по дисциплине «Кинетика твердофазных реакций», а именно: учебные аудитории, конференц-залы, презентационное оборудование и т.п. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.

Лаборатории оснащены современными приборами для синтеза неорганических соединений и материалов: стеклянная и пластиковая химическая посуда отечественного и иностранного производства, спектральное и лабораторное оборудование для рутинных измерений, реакционные установки, вакуумные системы, лабораторные печи, хроматографы.

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных документов:

1. Федеральный закон «Об образовании в Российской Федерации» от 29.12.2012 г. № 273-ФЗ;
2. Приказ Минобрнауки России от 30 июля 2014 г. № 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)»;
3. Приказ Министерства образования и науки РФ от 19.11.2013 №1259 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)».

Автор(ы):

д.х.н., проф. А.С.Алиханян