

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
материаловедения и индустрии наносистем
Академик РАН


В.М. Иевлев
подпись, расшифровка подписи

25.06.2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.15 Кинетика синтеза твердофазных материалов

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:** 04.03.02 Химия, физика и механика материалов
- 2. Профиль подготовки/специализация:** материаловедение и индустрия наносистем
- 3. Квалификация выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра материаловедения и индустрии наносистем
- 6. Составители программы:** Кострюков Виктор Федорович, доктор химических наук, доцент
- 7. Рекомендована:** Научно-методический совет химического факультета протокол №5 от 17.06.2021

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2022-2023

Семестр(ы): 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Цель: освоение студентами фундаментальных знаний в области кинетических основ синтеза неорганических веществ и материалов различной кристалличности и размерности с применением как традиционных, так и новейших методов.

Задачи: ознакомить студентов с фундаментальными положениями кинетики гомогенных и гетерогенных реакций; сформировать представления об особенностях протекания твердофазных реакций; выработать у студентов представления о методах изучения кинетики твердофазных реакций. .

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Б1. Часть, формируемая участниками образовательных отношений.

Для успешного освоения данной дисциплины, студент должен предварительно изучить следующие дисциплины: Математика; Физика; Общая и неорганическая химия;. Данная дисциплина является предшествующей для дисциплин: Материаловедение; Наноматериалы; Материалы для электронной техники; Перспективные функциональные материалы.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК-2	Способен использовать знания о методах синтеза и свойствах материалов различного назначения, в том числе наноматериалов, для решения профессиональных задач	ПК-2.1	Способен выбирать методы синтеза материалов различного назначения (в том числе наноматериалов) в соответствии с поставленной задачей	Знать: основные понятия и законы химической кинетики как основу для изучения механизмов химических реакций разных типов, феноменологическое описание реакций разных порядков, экспериментальное определение порядка и константы скорости реакции на основе измерения физических свойств системы, особенности кинетического описания реакций в конденсированной фазе, модели зародышеобразования и диффузионные модели в кинетике топохимических реакций. Уметь: использовать теоретические знания для решения конкретных задач синтеза твердофазных материалов. Владеть: навыками применения знаний и умений для интерпретации и моделирования процессов получения широкого круга материалов, включая объекты, полученные самостоятельно в рамках научно-исследовательской деятельности.
		ПК-2.2	Способен использовать знания о свойствах материалов для решения конкретных профессиональных задач	Знать: основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к решению задач синтеза твердофазных материалов; Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию, посвященную вопросам синтеза твердофазных материалов; Владеть: навыками выбора методов и средств решения задач исследования, применять различные методы в комплексе для

				достижения наилучших результатов.
--	--	--	--	-----------------------------------

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час — 5/144

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость			
		Всего	По семестрам		
			№ семестра	№ семестра 3	...
Контактная работа					
в том числе:	лекции	50		50	
	практические	50		50	
	лабораторные				
	курсовая работа				
Самостоятельная работа		80		80	
Промежуточная аттестация					
Итого:		180		180	

13.1. Содержание дисциплины

№ п / п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
1. Лекции			
1	Основные понятия и законы химической кинетики. Формально - кинетическое описание реакций простых типов.	<p>Общие понятия и определения. Скорость химической реакции. Реакционное пространство. Элементарная стадия и элементарный акт химической реакции. Кинетическое уравнение химического процесса. Порядок и молекулярность реакции. Константа скорости химических реакций. Энергия активации.</p> <p>Механизм химической реакции. Закон действующих масс и принцип независимости протекания элементарных реакций.</p> <p>Прямая и обратная задачи в кинетике простых химических реакций.</p> <p>Экспериментальные методы исследования кинетики реакций. Уравнение кинетической кривой и его отличие от кинетического уравнения процесса.</p> <p>Классификация химических реакций: по типу систем (реакции в закрытых и открытых системах); по типу реакционного пространства (гомогенные, гетерогенные, гомогенно-гетерогенные); по характеру участвующих в реакции фаз (гомофазные, гетерофазные). Кинетические классификации: простые и сложные реакции; реакции простых типов; классификация реакций по порядку и молекулярности.</p> <p>Особенности кинетики реакций в закрытых и открытых</p>	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11315

		<p>системах. Кинетика реакций в реакторах идеального смешения и идеального вытеснения.</p> <p>Активация в бимолекулярных и мономолекулярных реакциях.</p> <p>Схема Линдемана. Сравнительная характеристика теорий активированного комплекса и активных соударений.</p>	
2	<p>Теоретические основы кинетики гомогенных реакций. Элементарные химические реакции.</p>	<p>Теория активных соударений и бимолекулярные реакции. Основные положения теории. Активные соударения. Уравнение для скорости процесса. Константа скорости. Стерический фактор. Смысл предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса согласно теории активных соударений. Основные преимущества и ограниченность теории.</p> <p>Теория активированного комплекса. Поверхность потенциальной энергии реакции. Путь реакции. Координата реакции. Энергетический барьер и переходное состояние. Истинная энергия активации химической реакции. Расчет скоростей элементарных реакций.</p> <p>Основное уравнение теории активированного комплекса. Выражение константы скорости реакции через термодинамические функции реагентов и активированного комплекса. Энтальпия активации и ее связь с энергией активации реакции. Энтропия активации. Физический смысл стерического фактора. Предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса согласно теории активированного комплекса и его оценка по энтропии активации. Основные положения, достоинства и границы применимости теории активированного комплекса.</p>	<p>https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11315</p>
3	<p>Кинетика сложных химических реакций</p>	<p>Понятие о сложных реакциях. Последовательные, параллельные и последовательно-параллельные стадии. Циклический маршрут. Кинетические закономерности последовательных односторонних реакций. График Раковского. Период индукции. Переходное равновесие. Соотношение констант скоростей стадий. Лимитирующая стадия. Параллельные односторонние реакции. Понятие об определяющей стадии.</p> <p>Система кинетических уравнений химического процесса, состоящего из нескольких элементарных стадий. Схема сложного химического процесса (на примере фотохимической реакции присоединения хлора к этилену). Система кинетических уравнений сложного процесса. Прямая и обратная задача в кинетике сложных реакций.</p> <p>Квазиравновесное и квазистационарное приближения в кинетике сложных реакций. Особенности сложных реакций в открытых системах.</p>	<p>https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11315</p>
4	<p>Кинетика гетерогенных реакций</p>	<p>Понятие о гетерогенных реакциях и особенности их кинетического описания. Основные типы гетерогенных реакций. Степень превращения и степень завершенности химической реакции. Специфика исследования кинетики гетерогенных реакций. Скорости реакции и кинетические уравнения. Гетерогенные системы (общий случай). Открытые гетерогенные системы. Случай одной и нескольких реакций. Особенности систем, включающих твердую фазу.</p> <p>Современное состояние теории кинетики топочимических реакций. Модели зародышеобразования. Макрокинетика топочимических реакций. Диффузионные модели.</p> <p>Специфика кинетики и механизма гетерогенных процессов в тонкопленочных структурах. Кинетика пассивного окисления металлов. Особенности окисления элементарных полупроводников и сложных полупроводниковых соединений.</p>	<p>https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11315</p>
2. Практические занятия			
1	<p>Основные понятия и законы химической кинетики. Формально - кинетическое</p>	<p>Односторонние реакции первого порядка. Односторонние реакции второго порядка. Односторонние реакции n-го порядка. Двусторонние реакции первого порядка. Двусторонние реакции второго порядка. Методы определения порядка реакции.</p>	<p>https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11315</p>

	описание реакций простых типов.		
2	Теоретические основы кинетики гомогенных реакций. Элементарные химические реакции.	Основные типы элементарных реакций. Гомолитические, гетеролитические и согласованные реакции. Реакционный центр активированного комплекса. Реакции с двухцентровым активированным комплексом (диссоциация и рекомбинация). Реакции с трехцентровым активированным комплексом (замещение, присоединение по двойной связи, элиминирование). Реакции с четырехцентровым линейным активированным комплексом. Реакции с циклическим активированным комплексом. Правило запрета орбитальной симметрии Р. Вудворда и Р. Хофмана. Запрет на протекание реакций по спине и орбитальному моменту (правило Вигнера-Витмера).	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11315
3	Кинетика сложных химических реакций	Сложные химические реакции. Лимитирующая и определяющая стадии. Хлорирование этилена. Решение прямой и обратной задачи химической кинетики применительно к сложным реакциям. Сложные реакции в открытых системах.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11315
4	Кинетика гетерогенных реакций	Кинетика реакций, лимитируемых процессами на границе раздела фаз. Подход Аврамы-Ерофеева и развитие этих взглядов. Диффузионные модели Таммана, Яндера (анти-Яндера), Гистлинга и Браунштейна, Картера-Валенси, Крегера-Циглера. Природа активного состояния твердых фаз. Активирование твердофазных реагентов. Энергия активации твердофазных реакций. Кинетика и механизм некоторых топохимических реакций. Взаимодействие твердого вещества с жидким реагентом (окисление железа водой). Кинетика реакций с нулевой начальной скоростью (разложение твердых веществ, восстановление оксидов металлов, окисление и сульфидирование металлов). Кинетика реакций с ненулевой начальной скоростью (разложение твердых веществ, восстановление оксидов металлов, окисление солей, металлов и сплавов, сульфидирование металлов и оксидов). Кинетика пассивного окисления металлов. Теория Мотта-Кабреры. Параболическая модель Вагнера. Модель Фромхолда. Кинетика окисления элементарных полупроводников (на примере кремния). Особенности кинетики окисления сложных полупроводниковых соединений. Кинетика хемостимулированного окисления полупроводников (на примерах кремния и соединений $A^{III}B^V$). Методы исследования кинетики реакций в тонкопленочных структурах.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11315

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Основные понятия и законы химической кинетики. Формально - кинетическое описание реакций простых типов.	8	8		14	30
2	Теоретические основы кинетики гомогенных реакций. Элементарные химические реакции.	10	10		16	36
3	Кинетика сложных химических реакций	8	8		14	30
4	Кинетика гетерогенных реакций	24	24		36	84
Итого:		50	50		80	180

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Для успешного освоения дисциплины, необходимо

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- подготовка рефератов с целью более детального изучения вопросов, рассматриваемых на лекциях;
- текущий контроль успеваемости в форме устного опроса.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Стромберг А.Г. <i>Физическая химия : [учебник для студ. вузов, обуч. по хим. специальностям] / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко ; под ред. А.Г. Стромберга .— Изд. 7-е, стер. — Москва : Высшая школа, 2009 .— 526 с</i>
2	Чоркендорф.И. <i>Современный катализ и химическая кинетика : [учебное пособие] / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт ; пер. с англ. В.И. Ролдугина .— 2-е изд. — Долгопрудный : Издательский дом Интеллект, 2013 .— 500 с.</i>
3	Третьяков Ю.Д.. <i>Введение в химию твердофазных материалов : учебное пособие для студ. вузов, обуч. по направлению подгот. "Химия, физика и механика материалов" / Ю.Д. Третьяков, В.И. Путляев ; Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова .— М. : Изд-во Моск. ун-та : Наука, 2006 .— 399 с.</i>

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4	Эмануэль Н. М. <i>Курс химической кинетики / Н.М. Эмануэль, Д.Г. Кнорре. - М. : Высш. шк., 1984. - 463 с.</i>
5	Барре П. <i>Кинетика гетерогенных процессов / П. Барре. - М. : Мир, 1976. - 400 с.</i>
6	Розовский А .Я. <i>Кинетика толохимических реакций / А .Я. Розовский. - М. : Химия, 1974. - 224 с.</i>
7	<i>Физическая химия: в 2-х кн. / К. С. Краснов и др. - М. : Высш. шк., 2001. - Кн.2. - 318 с.</i>
8	Крылов О.В. <i>Гетерогенный катализ / О.В. Крылов. - М. : Академкнига, 2004. - 679 с.</i>
9	Байрамов В.М. <i>Основы химической кинетики и катализа / В.М. Байрамов; под ред. В.В. Лунина. - М. : Academia, 2003. - 251 с.</i>

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Источник
10	http://www.elibrary.ru – научная электронная библиотека.
11	http://www.lib.vsu.ru – Зональная научная библиотека ВГУ.

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

Проведение текущей аттестации и самостоятельной работы по отдельным разделам дисциплины.

Использование ЭУМК <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11315>

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Основные понятия и законы химической кинетики. Формально - кинетическое описание реакций простых типов.	ПК-2	ПК-2.1 ПК-2.2	Контрольная работа 1
2.	Теоретические основы кинетики гомогенных реакций. Элементарные химические реакции.	ПК-2	ПК-2.1 ПК-2.2	Контрольная работа 3
3.	Кинетика сложных химических реакций	ПК-2	ПК-2.1 ПК-2.2	Контрольная работа 3
4.	Кинетика гетерогенных реакций	ПК-2	ПК-2.1 ПК-2.2	Реферат
Промежуточная аттестация форма контроля - экзамен				Перечень вопросов

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Контрольная работа 1.

Вариант задания

Уровень А

1. Как определяется скорость химической реакции в целом? Как эта величина связана со скоростью реакции по данному компоненту?
2. Может ли молекулярность быть больше или меньше порядка реакции? Для каких реакций порядок и молекулярность всегда совпадают?
3. Как зависит (покажите графически) константа скорости реакции от исходной концентрации веществ?

Уровень В

1. При изучении реакции разложения ацетона в газовой фазе были получены следующие экспериментальные данные:

$P_{нач}$, торр	300	500
$T_{1/2}$, мин	23,96	24,0

Определите порядок реакции и константу скорости.

Контрольная работа 2.

Вариант задания

Уровень А

1. Как определяются газокинетические диаметры сталкивающихся молекул? Что такое средний диаметр столкновения?
2. Как может быть отражено развитие элементарного химического акта на поверхности потенциальной энергии?
3. К какому типу элементарных реакций относятся следующие: а) взаимодействие атома водорода с молекулой хлора; б) гидролиз иодистого метила; в) распад бромистого этила на этилен и бромистый водород?

Уровень В

1. Что представляет собой предэкспоненциальный множитель A в уравнении Аррениуса? Дайте ответ в терминах теории активных столкновений. От каких факторов он зависит?

Контрольная работа 3.

Уровень А

1. Изобразите схематично последовательные и параллельные реакции.
2. Как определяется скорость реакции по компоненту?
3. Что такое квазистационарное приближение?

Уровень В

1. Получите уравнение кинетических кривых для последовательности реакций первого порядка.

Вариант задания

Темы рефератов:

1. Кинетика реакций, лимитируемых процессами на границе раздела фаз.
2. Подход Авраами-Ерофеева и развитие этих взглядов.
3. Диффузионные модели Таммана и Яндера (анти-Яндера)
4. Диффузионные модели Гистлинга и Браунштейна
5. Диффузионные модели Картера-Валенси и Крегера-Циглера.
6. Природа активного состояния твердых фаз.
7. Активирование твердофазных реагентов. Энергия активации твердофазных реакций.
8. Кинетика и механизм некоторых топохимических реакций.
9. Взаимодействие твердого вещества с жидким реагентом (окисление железа водой).
10. Кинетика реакций с нулевой начальной скоростью (разложение твердых веществ, восстановление оксидов металлов, окисление и сульфидирование металлов).
11. Кинетика реакций с ненулевой начальной скоростью (разложение твердых веществ, восстановление оксидов металлов, окисление солей, металлов и сплавов, сульфидирование металлов и оксидов).
12. Кинетика пассивного окисления металлов. Теория Мотта-Кабреры.
13. Параболическая модель Вагнера. Модель Фромхолда.
14. Кинетика окисления элементарных полупроводников (на примере кремния).
15. Особенности кинетики окисления сложных полупроводниковых соединений.
16. Кинетика хемостимулированного окисления полупроводников (на примерах кремния и соединений $A^{III}B^V$).
17. Методы исследования кинетики реакций в тонкопленочных структурах.

Описание технологии проведения.

Контрольные работы проходят в письменной форме. В каждой контрольной работе имеется 2 варианта заданий. Время выполнения контрольной работы – 2 часа.

Рефераты оформляются в печатном (или электронном) виде. Основные положения реферата зачитываются на практических занятиях с возможностью конспектирования наиболее существенных моментов. Время, отводимое на устный доклад около 20-30 минут.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания).

Контрольная работа оценивается по количеству выполненных заданий, правильности и полноте выполнения каждого задания.

Реферат оценивается по глубине раскрытия темы.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: собеседование по билетам к экзамену.

Перечень вопросов к зачету и порядок формирования КИМ:

1. Скорость химических реакций. Мгновенная и средняя скорость. Графическая интерпретация.
2. Кинетическое уравнение химического процесса и уравнения кинетических кривых.
3. Порядок и молекулярность реакции.
4. Элементарная стадия и элементарный акт химической реакции. Реакционное пространство.
5. Основной постулат химической кинетики. Константа скорости реакции и ее зависимость от температуры. Уравнение Аррениуса.
6. Механизм реакции и принцип независимости элементарных стадий.
7. Методы исследования кинетики реакций.
8. Принципы и виды классификаций химических реакций.
9. Модельные реакции в закрытых системах.
10. Особенности реакций в открытых системах.
11. Кинетическое описание односторонних реакций 1, 2 и т.д. порядков.
12. Кинетика двусторонних реакций.
13. Методы определения порядка реакций.
14. Теория активных соударений и ее применение для бимолекулярных реакций.
15. Теория активированного комплекса. Основные положения. Энергетическая схема.
16. Вывод основного уравнения теории активированного комплекса. Расчет скоростей элементарных реакций.
17. Предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса согласно теориям активированного комплекса и активных соударений. Сравнительная характеристика теорий.
18. Активация в би- и мономолекулярных реакциях. Схема Линдемана.
19. Реакционный центр активированного комплекса.
20. Сложные реакции с последовательными, параллельными и параллельно-последовательными стадиями.
21. Формальная кинетика последовательных реакций. График Раковского.
22. Кинетическое описание параллельных реакций.
23. Кинетическое описание сложного химического процесса (на примере реакции хлорирования этилена).
24. Прямая и обратная задачи в кинетике простых и сложных реакций.
25. Квазиравновесное и квазистационарное приближения и их роль в кинетике сложных реакций.
26. Особенности кинетического описания гетерогенных реакций. Основные типы гетерогенных реакций.
27. Специфика исследования кинетики гетерогенных реакций. Степень превращения.
28. Кинетическое описание гетерогенных систем. Общий случай. Особенности систем, включающих твердую фазу.
29. Теории кинетики гетерогенных реакций. Модели зародышеобразования.
30. Макрокинетика гетерогенных реакций. Диффузионные модели.

Описание технологии проведения.

После получения студентом билета КИМ и бланка листа ответа, самостоятельно выполняются задания КИМ в письменной форме. Время подготовки 40 минут. При выставлении итоговой оценки по промежуточной аттестации учитывается активность и успешность работы студента на этапах текущего контроля успеваемости.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания.

Оценка “отлично” ставится если студент дает полный и правильный ответ, раскрывая теоретические и практические аспекты вопроса, анализируя литературные источники по данному вопросу, аргументирует собственную позицию по данному вопросу

Оценка “хорошо” ставится если студент допускает несущественные ошибки, испытывает трудности при определении собственной оценочной позиции

Оценка “удовлетворительно” ставится если студент допускает существенные ошибки, нарушена логика изложения материала, требуются наводящие вопросы преподавателя

Оценка “неудовлетворительно” ставится при незнании или непонимании большей или наиболее существенной части содержания учебного материала