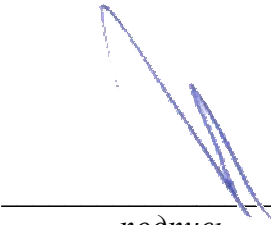


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет» (Новосибирский государственный
университет, НГУ)

Факультет естественных наук

Согласовано
Декан ФЕН
Резников В. А.



подпись
« 5 » октября 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Основы современного катализа

Направление подготовки: 04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность (профиль): Кинетика и катализ

Форма обучения: очная

Разработчики:

к.х.н., доц. Мишаков И.В.

Зав. каф. катализа и адсорбции
академик Бухтияров В.И.

Ответственный за образовательную программу:
профессор, д.х.н. В.А. Резников





Новосибирск, 2020

Содержание

| | |
|---|----|
| <u>1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы</u> | 3 |
| <u>2. Место дисциплины в структуре образовательной программы</u> | 5 |
| <u>3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося</u> | 5 |
| <u>4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий</u> | 5 |
| <u>5. Перечень учебной литературы</u> | 8 |
| <u>6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся</u> | 8 |
| <u>7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины</u> | 9 |
| <u>8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине</u> | 9 |
| <u>9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине</u> | 9 |
| <u>10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине</u> | 10 |
| Приложение 1 Аннотация по дисциплине | |
| Приложение 2 Оценочные средства по дисциплине | |

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

| Индикатор компетенции | Результаты обучения по дисциплине |
|--|--|
| ОПК-1. Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий | |
| ОПК-1.1. Знать основные способы и приемы проведения научных и научно-технических исследований | <ul style="list-style-type: none"> – имеет представление об основных современных тенденциях и направлениях развития каталитической науки; – знает основные подходы к разработке и усовершенствованию промышленных катализаторов, методов их производства и оптимального использования в каталитических процессах; – имеет представление о физико-химических методах анализа, позволяющих устанавливать механизмы действия катализаторов и изучать элементарных стадии каталитических превращений. |
| ПК-1. Способность экспериментально определять и рассчитывать скорости химических превращений в различных системах, изучать механизмы и кинетические закономерности каталитических превращений, исследовать природу каталитического действия и промежуточные соединения реагентов с катализатором | |
| ПК-1.2. Знать ключевые принципы каталитического действия для основных классов каталитических реакций: кислотно-основный катализ, металлокомплексный катализ, катализ металлами, оксидами и сульфидами | <ul style="list-style-type: none"> – понимает сущность явления катализ, причины ускорения и возбуждения химических реакций под влиянием катализаторов; – знает принципы каталитического действия для основных классов каталитических реакций: кислотно-основный катализ, металлокомплексный катализ, ферментативный катализ, катализ металлами, оксидами и сульфидами; |
| ПК-2. Готовность к поиску и разработке новых, а также к усовершенствованию существующих катализаторов и каталитических процессов для проведения новых химических реакций, а также ускорения известных реакций и повышения их селективности | |
| ПК-2.1. Знать основные типы физико-химических процессов, протекающих на различных этапах синтеза носителей и катализаторов; знать, какие из этих процессов в значительной степени определяют субструктурные и текстурные свойства получаемых материалов, состояние (дисперсность, химический и фазовый состав, распределение по зерну катализатора) активного компонента, а также какие существуют механизмы отравления, спекания и | <ul style="list-style-type: none"> – знает, какие типы физико-химических процессов протекают на различных этапах синтеза носителей и катализаторов в рамках тех или иных методов приготовления, - знает, какие из этих процессов в значительной степени определяют субструктурные и текстурные свойства получаемых материалов, состояние (дисперсность, химический и фазовый состав, распределение по зерну катализатора) активного компонента; - на основе знаний о химических свойствах катализаторов прогнозирует механизмы отравления, спекания и механического разрушения катализаторов в ходе их синтеза или эксплуатации; - предлагает способы повышения стабильности катализаторов к действию негативных факторов, |

| | |
|---|--|
| <p>механического разрушения катализаторов в ходе их синтеза или эксплуатации и способы повышения стабильности катализаторов к действию этих негативных факторов</p> | <p>снижающих активность и ухудшающих физико-химические характеристики катализаторов.</p> |
|---|--|

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Основы современного катализа» реализуется в рамках образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 04.06.01 – Химические науки направленность Кинетика и катализ по очной форме обучения на русском языке. Дисциплина «Основы современного катализа» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам общей базовой подготовки в рамках программ бакалавриата и магистратуры, и не требует знаний по другим дисциплинам подготовки для аспирантов. Курс входит в набор вариативных дисциплин, направленных на подготовку к сдаче экзаменов кандидатского минимума и подготовки научно-квалификационной работы (диссертации), для аспирантов, обучающихся по направленности «Кинетика и катализ».

3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Трудоемкость дисциплины – 5 з.е. (180 ч)

Форма промежуточной аттестации: 5 семестр – экзамен

| № | Вид деятельности | Семестр |
|----|---|---------|
| | | 5 |
| 1 | Лекции, ч | 40 |
| 2 | Практические занятия, ч | 36 |
| 3 | Лабораторные занятия, ч | - |
| 4 | Занятия в контактной форме, ч из них | 82 |
| 5 | из них аудиторных занятий, ч | 76 |
| 6 | в электронной форме, ч | - |
| 7 | консультаций, час. | 4 |
| 8 | промежуточная аттестация, ч | 2 |
| 9 | Самостоятельная работа, час. | 98 |
| 10 | Всего, ч | 180 |

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

5 семестр

Лекции (40 ч)

| Наименование темы и их содержание | Объем, час |
|---|------------|
| Раздел 1. Основные особенности и значение явлений катализа | |
| 1. Открытие каталитических явлений. Феноменология явления катализа | 2 |
| 2. Катализ и инициирование. Химическая сущность катализа | 2 |
| 3. Роль катализа в становлении и развитии современной промышленности. Роль катализа в живой природе | 2 |
| 4. Выдающиеся ученые в области катализа. Современные тенденции | 2 |

| | |
|---|---|
| развития катализа | |
| Раздел 2. Классификация катализаторов и каталитических процессов | |
| 1. Состав и классификация катализаторов | 2 |
| 2. Классификация каталитических процессов | 2 |
| 3. Понятие об активном центре, его окружении и носителе | 2 |
| 4. Примеры каталитических процессов в химической промышленности, энергетике, защите окружающей среды. | 2 |
| Раздел 3. Сущность каталитического действия | |
| 1. Факторы, определяющие скорость химического превращения. Степень компенсации. Новые реакционные пути, открываемые катализатором. Понятие о каталитическом цикле. | 2 |
| 2. Основные причины каталитического действия. Формы промежуточного химического взаимодействия при катализе. Активация, сближение реагентов, снятие запрета по симметрии. Роль энергетического и структурного факторов. | 2 |
| 3. Гомогенный катализ в газовой фазе. Промежуточное взаимодействие при равновесном распределении энергии. Влияние катализаторов на возбуждение и протекание цепных реакций. Гомогенный катализ в жидкой фазе. Особенности протекания химических реакций в растворах. Клеточный эффект. Взаимодействие с растворителем. Реакции с участием ионов. | 2 |
| 4. Гетерогенный катализ твердыми катализаторами. Хемосорбция. Равновесие хемосорбции. Зависимость энергии хемосорбции от степени заполнения поверхности. | 2 |
| Раздел 4. Принципы каталитического действия кислот и оснований | |
| 1. Гомогенный катализ кислотами и основаниями в растворе. Роль протонированных и депротонированных структур в кислотно-основном катализе. Скорость реакций переноса протона в растворе. Специфический и общий катализ. Кинетика кислотно-основных каталитических реакций. Соотношение Бренстеда. | 2 |
| 2. Гетерогенный кислотный катализ. Бренстедовские и льюисовские кислотные центры окислов и алюмосиликатов. Модифицированные кислотные катализаторы. Цеолитные катализаторы. Связь кислотных свойств и активности цеолитных катализаторов с природой введенных в цеолит ионов. Молекулярно-ситовой катализ | 2 |
| Раздел 5. Принципы каталитического действия комплексов металлов | |
| 1. Позиция, занимаемая металлокомплексным катализом в современной химической промышленности. Основные реакции промышленного органического синтеза, катализируемые комплексами металлов. Основные типы комплексов металлов.Mono-, поли- и гетероядерные комплексы. Кластеры. Роль лигандов и растворителя в стабилизации структуры полиядерных комплексов. | 2 |
| 2. Центральный ион, лигандное окружение и носитель как основные компоненты металлокомплексного катализатора. Масштабы влияния природы каждого из них на каталитическую активность металлокомплексов. Комплексообразование как основная стадия активации реагирующих молекул. Типы комплексов металлов с органическими молекулами разного строения. | 2 |

| | |
|--|---|
| 3. Ключевые стадии перегруппировок металлоорганических соединений: окислительное присоединение, восстановительное элиминирование, внедрение, реакции сдвига. Каталитический цикл как последовательность ключевых стадий. Правила Хиггинсона, Пирсона и Толмена для цикла. Матричный эффект. | 2 |
| 4. Гидрирование. Природа стадий активации водорода и гидрируемого субстрата. Изомеризация. Позиционная изомеризация. Скелетная изомеризация. Природа стадий активации алкенов. Карбонилирование. Типы реакций карбонилирования. Карбонилирование ацетиленов, олефинов, спиртов и нитросоединений. Различия в механизмах. | 2 |
| 5. Олигомеризация олефинов и ацетиленов. Поли-, со- и теломеризация бутадиена, основные интермедиаты и стадии механизма протекания этих процессов. Полимеризация олефинов, основные интермедиаты. Метатезис олефинов. | 2 |
| 6. Реакции окисления и стадии механизма окисления органических соединений в присутствии металлокомплексных каталитических систем. Природа стадии активации кислорода. Гомо- и гетеролитический механизмы окисления. Окисление толуола в бензойную кислоту. Окисление олефинов в окиси олефинов. Два принципа действия металлокомплексных катализаторов окисления органических веществ. | 2 |
| 7. Современные направления развития катализа металлокомплексами. Фиксация молекулярного азота. Принципы активации молекулы азота и основные металлоорганические азотфиксирующие интермедиаты. Принципы активации метана. Восстановительная олигомеризация оксида углерода. Реакции асимметрического синтеза. | 2 |
| 8. Каталитические свойства кластеров металлов. Правило Уэйда. Координация молекул на кластерах. Гетероядерные кластеры как полифункциональные катализаторы. Металлоферменты как металлокомплексные катализаторы. | 2 |

Практические занятия (36 ч)

| Содержание практического занятия | Объем, час |
|--|---------------|
| Семинар по теме «Теория соударения в газовой фазе» | 6 |
| Решение задач по теме «Теория соударения в газовой фазе» | 6 |
| Семинар по теме «Теория абсолютных скоростей реакций» | 6 |
| Решение задач по теме «Кинетика каталитических реакций в открытых системах» | 9 |
| Решение задач по теме «Кинетические расчеты для процессов окисления в открытых системах» | 9 |

Самостоятельная работа аспирантов (98 ч)

| Перечень занятий на СРС | Объем, час |
|---|---------------|
| Самостоятельная работа во время занятий из них: | 64 |
| - подготовка реферата | 20 |
| - подготовка презентации и доклада | 20 |
| - изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях | 24 |
| Самостоятельная работа во время промежуточной аттестации из них: | 34 |
| подготовка к экзамену | 34 |

5. Перечень учебной литературы

1. Боресков, Георгий Константинович. Катализ : вопросы теории и практики : избранные труды / Г.К. Боресков ; АН СССР, Сиб. отд-ние, Ин-т катализа ; отв. ред. К.И. Замираев, Г.И. Панов. Новосибирск : Наука, 1987. 536 с. : ил., [1] л. портр. ; 25 см.; режим доступа: http://www.catalysis.ru/block/index.php?ID=5&SECTION_ID=201
2. Крылов, Олег Валентинович (1924-2008). Гетерогенный катализ : учеб. пособие [для вузов: в 4 ч.] / О. В. Крылов ; [науч. ред. В. Н. Пармон] ; Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск : НГУ, 2002. ; 20 см. Ч.1. 2002. 221 с. : ил.; 12 экземпляров
3. Крылов, Олег Валентинович (1924-2008). Гетерогенный катализ : учеб. пособие [для вузов: в 4 ч.] / О. В. Крылов ; [науч. ред. В. Н. Пармон] ; Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск : НГУ, 2002. ; 20 см. Ч.2. 2002. 201 с. : ил.; 13 экземпляров
4. Крылов, Олег Валентинович (1924-2008). Гетерогенный катализ : учеб. пособие [для вузов: в 4 ч.] / О. В. Крылов ; [науч. ред. В. Н. Пармон] ; Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск : НГУ, 2002. ; 20 см. Ч.3. 2002. 259, [2] с. : ил.; 14 экземпляров
5. Крылов, Олег Валентинович (1924-2008). Гетерогенный катализ : учеб. пособие [для вузов: в 4 ч.] / О. В. Крылов ; [науч. ред. В. Н. Пармон] ; Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск : НГУ, 2002. ; 20 см. Ч.4. 2002. 166 с. : ил.; 14 экземпляров
6. Чоркендорф, Иб Современный катализ и химическая кинетика : [учебное пособие] / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт ; пер. с англ В. И. Ролдугина2-е изд. Долгопрудный : Интеллект, 2013500, [1] с. : ил., табл., граф. ; 9 экземпляров

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся

7. Кожевников, Иван Васильевич. Катализ кислотами и основаниями / И.В. Кожевников ; Отв. ред. В.А. Лихолобов. Новосибирск : Изд-во Новосиб. ун-та, 1991. 123 с. : ил. ISBN 5761501422; 16 экземпляров
8. Мишаков И.В., Лихолобов В.А. Введение в катализ : учеб. пособие для учащихся ВУЗов. – Новосибирск: Изд-во НГУ, 2015. – 67 с.; режим доступа <https://docplayer.ru/61727347-Vvedenie-v-kataliz-i-v-mishakov-v-a-liholobov-uchebno-metodicheskoe-posobie.html>

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

7.1 Ресурсы сети Интернет

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС и электронную почту.

7.2 Современные профессиональные базы данных:

- [Google ScholarSFX](#) - полнотекстовый поиск в научных источниках – журналах, тезисах, книгах, online-доступ со всех компьютеров ИК СО РАН;
 - SCIRUS -бесплатная поисковая система издательства Elsevier, ориентированная на поиск только научной информации, online-доступ со всех компьютеров ИК СО РАН;
 - SciTopics - бесплатный интернет-ресурс для ученых и исследователей; представлены самая свежая и самая точная веб-информация и информация из периодики; online-доступ со всех компьютеров ИК СО РАН;
 - Библиографические базы данных, к которым существует прямой доступ из внутренней сети Института: "ВИНИТИ", "Current Contents", "Chemical Abstracts", и т.д.;
3. Электронный доступ к периодическим и продолжающимся изданиям (более 100 наименований, включая Applied Catalysis, Catalysis Letters, Catalysis Today, Surface Science, и др.) – <http://www.sciencedirect.com>, <http://www.e-library.ru>

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

8.1 Перечень программного обеспечения

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

8.2 Информационные справочные системы

Не используется

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для реализации дисциплины «Основы современного катализа» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых

и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются комплект лекций-презентаций по всем темам дисциплины «Основы современного катализа».

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Перечень результатов обучения по дисциплине «Основы современного катализа» и индикаторов их достижения представлен в разделе 1.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Основы современного катализа»

Текущий контроль успеваемости:

Текущий контроль успеваемости осуществляется по следующим критериям:

- Посещаемость учащимися лекционных и практических занятий (допуск к экзамену при условии посещения не менее 75% занятий);
- Своевременная сдача лабораторных работ;
- Сдача реферата по катализу на заданную тему (в оговоренный срок);
- Подготовка презентации и успешная защита реферата по катализу.

В случае соответствия всем перечисленным критериям учащийся получает допуск для прохождения промежуточной (итоговой) аттестации по дисциплине.

Промежуточная аттестация:

Промежуточная аттестация по дисциплине «Основы современного катализа» проходит в форме устного экзамена-собеседования с преподавателем. Учащимся на экзамене предлагается выбрать билет, в каждом билете содержится три теоретических вопроса и задача по темам дисциплины.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Основы современного катализа»

Таблица 10.1

| Индикатор компетенции | Результаты обучения по дисциплине | Оценочное средство |
|--|---|--------------------|
| ОПК-1. Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий | | |
| ОПК-1.1. Знать | – имеет представление об основных современных | Экзамен |

| | | |
|--|---|----------------|
| <p>основные способы и приемы проведения научных и научно-технических исследований</p> | <p>тенденциях и направлениях развития каталитической науки; – знает основные подходы к разработке и усовершенствованию промышленных катализаторов, методов их производства и оптимального использования в каталитических процессах; – имеет представление о физико-химических методах анализа, позволяющих устанавливать механизмы действия катализаторов и изучать элементарных стадии каталитических превращений.</p> | |
| <p>ПК-1. Способность экспериментально определять и рассчитывать скорости химических превращений в различных системах, изучать механизмы и кинетические закономерности каталитических превращений, исследовать природу каталитического действия и промежуточные соединения реагентов с катализатором</p> | | |
| <p>ПК-1.2. Знать ключевые принципы каталитического действия для основных классов каталитических реакций: кислотно-основной катализ, металлокомплексный катализ, катализ металлами, оксидами и сульфидами</p> | <p>– понимает сущность явления катализ, причины ускорения и возбуждения химических реакций под влиянием катализаторов; – знает принципы каталитического действия для основных классов каталитических реакций: кислотно-основной катализ, металлокомплексный катализ, ферментативный катализ, катализ металлами, оксидами и сульфидами;</p> | <p>Экзамен</p> |
| <p>ПК-2. Готовность к поиску и разработке новых, а также к усовершенствованию существующих катализаторов и каталитических процессов для проведения новых химических реакций, а также ускорения известных реакций и повышения их селективности</p> | | |
| <p>ПК-2.1. Знать основные типы физико-химических процессов, протекающих на различных этапах синтеза носителей и катализаторов; знать, какие из этих процессов в значительной степени определяют субструктурные и текстурные свойства получаемых материалов, состояние (дисперсность, химический и фазовый состав, распределение по зерну катализатора) активного компонента, а также какие существуют механизмы</p> | <p>– знает, какие типы физико-химических процессов протекают на различных этапах синтеза носителей и катализаторов в рамках тех или иных методов приготовления, - знает, какие из этих процессов в значительной степени определяют субструктурные и текстурные свойства получаемых материалов, состояние (дисперсность, химический и фазовый состав, распределение по зерну катализатора) активного компонента; - на основе знаний о химических свойствах катализаторов прогнозирует механизмы отравления, спекания и механического разрушения катализаторов в ходе их синтеза или эксплуатации; - предлагает способы повышения стабильности катализаторов к действию негативных факторов, снижающих активность и ухудшающих физико-химические характеристики катализаторов.</p> | <p>Экзамен</p> |

| | | |
|---|--|--|
| отравления, спекания и механического разрушения катализаторов в ходе их синтеза или эксплуатации и способы повышения стабильности катализаторов к действию этих негативных факторов | | |
|---|--|--|

Для аттестации по дисциплине «Основы современного катализа» используется балльно-рейтинговая система. Общее количество баллов, которое возможно набрать в семестре, равно 100 (см. Таблицу 10.2). Экзамен в устной форме является обязательным для всех учащихся. Несвоевременная сдача реферата (презентации, лабораторных работ) ведет к потере 50% баллов по данному виду деятельности.

Таблица 10.2 Виды деятельности и их «стоимость» в баллах

| Вид деятельности | Количество баллов |
|---|-------------------|
| | |
| Написание реферата по катализу на заданную тему | 15 |
| Защита реферата по катализу в форме презентации и доклада | 15 |
| Ответ на устном экзамене | 70 |
| ИТОГО | 100 |

По результатам прохождения экзамена суммируется общее количество баллов и выставляется оценка в соответствии с критериями, указанными в Табл. 10.3.

Таблица 10.3 Критерии выставления оценки по результатам промежуточной аттестации

| Оценка | Количество баллов из 100 |
|---------------------|--------------------------|
| | |
| Отлично | 90 и более |
| Хорошо | 75 и более |
| Удовлетворительно | 60 и более |
| неудовлетворительно | менее 60 |

Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Ниже приведены примеры возможных тем рефератов, вопросов к экзамену и типовых задач.

Темы рефератов:

1. Катализаторы, используемые в технологии синтеза аммиака
2. Металлоценовые катализаторы полимеризации олефинов
3. Вакер-процесс: катализатор и технология
4. Процессы гидрирования в катализе

5. Катализ в утилизации CO₂
6. Катализаторы на основе цеолитов в процессах нефтепереработки
7. Каталитическая конверсия солнечной энергии
8. Каталитический процесс получения биотоплива
9. Каталитическая переработка отходов лесной промышленности
10. Каталитический риформинг бензина

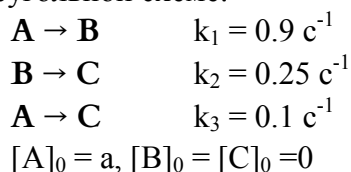
Вопросы к экзамену:

1. Формы воздействия катализатора на реакцию систему. Реализация слитного и стадийного превращения. Осуществление цепного механизма.
2. Металлокомплексный катализ: общее рассмотрение. Причины проявления каталитических свойств у переходных металлов. Основные типы реакций, катализируемых комплексными соединениями металлов.
3. Современное определение катализа. Возбуждение и ускорение каталитических реакций. Катализ и инициирование. Катализ и равновесие. Роль катализа в современной жизни.
4. Принципы активации в катализе. Эффекты компенсации. Стадийный и слитный механизмы катализа.
5. Основные положения катализа. Химическая сущность катализа. Катализ в промышленности и живой природе.
6. Ключевые стадии кислотно-основного катализа. Основные реакции карбониевого иона. Кинетика кислотно-основных каталитических реакций.
7. Карбонилирование: важнейшие виды процессов. Основные этапы механизма карбонилирования. Метатезис олефинов: ключевые интермедиаты.
8. Открытие каталитических явлений. История возникновения катализа как науки. Основные положения катализа. Роль катализа в становлении и развитии современной промышленности.
9. Гомогенный катализ в газовой фазе. Общие сведения. Влияние катализаторов на возбуждение и протекание цепных реакций.
10. Классификация катализаторов на основе их химического состава и фазового состояния компонентов. Классификация каталитических процессов.
11. Гидрирование в металлокомплексном катализе. Типы активации молекулы H₂ и гидрируемого субстрата. Характерные циклы гидрирования. Изомеризация. Механизм позиционной изомеризации двойной связи.
12. Металлокомплексные катализаторы с полифункциональным структурно-организованным активным центром. Ферментативный катализ.
13. Факторы, определяющие скорость химического превращения. Степень компенсации энергии разрывающихся и образующихся связей в радикальных и молекулярных реакциях.
14. Гомогенный катализ в жидкой фазе. Особенности протекания химических реакций в растворах. Степень влияния растворителя на скорость реакции. Энергетический профиль жидкофазного каталитического процесса.
15. Типы металлокомплексных соединений. Металлокомплекс как катализатор. Основные типы реакций, катализируемых металлокомплексными соединениями.
16. Важнейшие промышленные процессы, катализируемые металлами и сплавами. Механизмы реакций
17. Окисление аммиака. Устройство катализаторов и режим работы
18. Катализаторы гетерогенной полимеризации олефинов
19. Лабораторные, ресурсные и стендовые испытания катализаторов нейтрализации автомобильных выхлопов

20. Катализ сплавами. Геометрический и электронный эффект. Структурная чувствительность
21. Синтез Фишера-Тропша. Представление о механизме. Уравнение Шульца-Флори
22. Образование активных центров в катализаторах Циглера-Натты. Роль сокатализатора. Определение числа активных центров
23. Строение металлов. Основные факторы, определяющие каталитическую активность металлов
24. Схема Марса и ван Кревелена. Стадийное и слитное окисление CO и углеводородов
25. Катализ сульфидами. Основные реакции, протекающие при гидродесульфуризации
26. Связь каталитической активности и дисперсности. Структурно-чувствительные и структурно-нечувствительные реакции
27. Активация углеводородов в реакциях селективного окисления. Аллильный механизм окисления пропилена
28. Процессы гидроочистки в нефтепереработке. Соединения серы в нефти
29. Состав и функционирование катализаторов нейтрализации автомобильных выхлопов. Основные причины дезактивации
30. Каталитический риформинг в нефтепереработке. Биметаллические катализаторы
31. Окислительный аммонолиз пропилена. Механизм Грасселли
32. Механизм Арлмана-Коссе. Стереоспецифическая полимеризация пропилена

Примеры задач:

1. В порах носителя происходит реакция $A + B \rightarrow P$, для которой кинетическая константа скорости $k_{кин}$ определяется уравнением Аррениуса: $10^{-10} \cdot \exp[-E_a/RT]$ ($см^3/с$), где $E_a = 20$ ккал/моль. Транспорт реагентов A и B осуществляется по механизму прыжковой диффузии, при этом $D_A = D_B = 4.5 \cdot 10^{-9} \cdot \exp[-E_{пр}/RT]$ ($см^2/с$), где энергия активации прыжка $E_{пр} = 10$ ккал/моль. Радиусы обеих молекул считать равными 2 \AA . В какой области (кинетической или диффузионной) проходит реакция при 423K? При 673K? Определите температуру, при которой происходит смена кинетического и диффузионного режимов.
2. Рассчитайте диффузионную константу (k_D) для метана ($r(CH_4) = 2.2 \text{ \AA}$), находящегося в потоке выхлопных газов, нагретых до $T = 300^\circ C$. Давление газов принять равным 1 атм. $r(N_2) = 1.8 \text{ \AA}$, $r(CO_2) = 2.3 \text{ \AA}$, $r(H_2O) = 1.5 \text{ \AA}$. Как зависит k_D от температуры?
3. Каталитический процесс получения окиси этилена (B) из этилена (A) подчиняется треугольной схеме:



Рассчитайте максимально возможный выход окиси этилена при осуществлении процесса в реакторе идеального смешения. Изобразите зависимость селективности и выхода по целевому продукту от времени контакта τ .

Оценочные материалы по промежуточной аттестации (приложение 2), предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

Аннотация
к рабочей программе дисциплины «Основы современного катализа»

направление подготовки: 04.06.01 Химические науки
направленность (профиль): Кинетика и катализ

Форма обучения: очная

1. Цель изучения дисциплины

Дисциплина «Основы современного катализа» предназначена для того, чтобы, в первую очередь, ознакомить аспирантов с теоретическими основами и накопленными к настоящему времени наиболее значимыми экспериментальными результатами в области катализа и адсорбции во взаимосвязи с другими дисциплинами. Курс построен на основе современной концепции о единстве явлений гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа.

При феноменологическом описании явлений катализа излагаются основные причины возникновения каталитических эффектов, вводятся понятия активного центра катализатора и каталитического цикла. Рассматриваются формы промежуточных химических взаимодействий при катализе, явления химической активации веществ. Даются представления об особенностях каталитической активации веществ с участием газообразных, жидких и твердых катализаторов. Дальнейший курс построен на фактологическом описании принципов каталитического действия катализаторов разной природы: кислот и оснований, цеолитов, комплексов переходных металлов, твердых окислов, металлов, сульфидов металлов, твердых металлоорганических систем, кластеров металлов, металлоферментов. Даются сведения о механизмах протекания на этих катализаторах наиболее важных процессов: гидролиза, изомеризации, полного и частичного окисления, гидрирования, карбонилирования, полимеризации олефинов, восстановительной олигомеризации окиси углерода, синтеза аммиака, гидроочистки и реформинга углеводородного сырья, синтеза метанола, серной кислоты, и ряда других.

Специальный раздел курса посвящен освещению вопросов предвидения каталитического действия, прогнозирования состава активных центров и методов их конструирования. Рассмотрены исторические этапы развития теоретических представлений в катализе, современные тенденции в развитии методов поиска катализаторов. Даются сведения о роли компьютерной техники в реализации этих подходов.

Основной целью освоения этой дисциплины является развитие у аспирантов способности к проведению системных исследований в области катализа по приоритетным направлениям.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Основы современного катализа» реализуется в рамках образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 04.06.01 – Химические науки направленность Кинетика и катализ по очной форме обучения на русском языке. Дисциплина «Основы современного катализа» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам общей базовой подготовки в рамках программ бакалавриата и магистратуры, и не требует знаний по другим дисциплинам подготовки для аспирантов. Курс входит в набор вариативных дисциплин, направленных на подготовку к сдаче экзаменов кандидатского минимума и подготовки научно-квалификационной работы (диссертации), для аспирантов, обучающихся по направленности «Кинетика и катализ».

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

| Индикатор компетенции | Результаты обучения по дисциплине |
|---|--|
| ОПК-1. Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий | |
| ОПК-1.1. Знать основные способы и приемы проведения научных и научно-технических исследований | <ul style="list-style-type: none"> – имеет представление об основных современных тенденциях и направлениях развития каталитической науки; – знает основные подходы к разработке и усовершенствованию промышленных катализаторов, методов их производства и оптимального использования в каталитических процессах; – имеет представление о физико-химических методах анализа, позволяющих устанавливать механизмы действия катализаторов и изучать элементарных стадии каталитических превращений. |
| ПК-1. Способность экспериментально определять и рассчитывать скорости химических превращений в различных системах, изучать механизмы и кинетические закономерности каталитических превращений, исследовать природу каталитического действия и промежуточные соединения реагентов с катализатором | |
| ПК-1.2. Знать ключевые принципы каталитического действия для основных классов каталитических реакций: кислотно-основной катализ, металлокомплексный катализ, катализ металлами, оксидами и сульфидами | <ul style="list-style-type: none"> – понимает сущность явления катализ, причины ускорения и возбуждения химических реакций под влиянием катализаторов; – знает принципы каталитического действия для основных классов каталитических реакций: кислотно-основной катализ, металлокомплексный катализ, ферментативный катализ, катализ металлами, оксидами и сульфидами; |
| ПК-2. Готовность к поиску и разработке новых, а также к усовершенствованию существующих катализаторов и каталитических процессов для проведения новых химических реакций, а также ускорения известных реакций и повышения их селективности | |
| ПК-2.1. Знать основные типы физико-химических процессов, протекающих на различных этапах синтеза носителей и катализаторов; знать, какие из | <ul style="list-style-type: none"> – знает, какие типы физико-химических процессов протекают на различных этапах синтеза носителей и катализаторов в рамках тех или иных методов приготовления, - знает, какие из этих процессов в значительной |

| | |
|---|--|
| <p>этих процессов в значительной степени определяют субструктурные и текстурные свойства получаемых материалов, состояние (дисперсность, химический и фазовый состав, распределение по зерну катализатора) активного компонента, а также какие существуют механизмы отравления, спекания и механического разрушения катализаторов в ходе их синтеза или эксплуатации и способы повышения стабильности катализаторов к действию этих негативных факторов</p> | <p>степени определяют субструктурные и текстурные свойства получаемых материалов, состояние (дисперсность, химический и фазовый состав, распределение по зерну катализатора) активного компонента;</p> <ul style="list-style-type: none"> - на основе знаний о химических свойствах катализаторов прогнозирует механизмы отравления, спекания и механического разрушения катализаторов в ходе их синтеза или эксплуатации; - предлагает способы повышения стабильности катализаторов к действию негативных факторов, снижающих активность и ухудшающих физико-химические характеристики катализаторов. |
|---|--|

4. Трудоемкость дисциплины, вид учебной деятельности и форма промежуточной аттестации

Трудоемкость дисциплины – 5 з.е. (180 ч)

Форма промежуточной аттестации: 5 семестр – экзамен

| № | Вид деятельности | Семестр |
|----|---|---------|
| | | 5 |
| 1 | Лекции, ч | 40 |
| 2 | Практические занятия, ч | 36 |
| 3 | Лабораторные занятия, ч | - |
| 4 | Занятия в контактной форме, ч из них | 82 |
| 5 | из них аудиторных занятий, ч | 76 |
| 6 | в электронной форме, ч | - |
| 7 | консультаций, час. | 4 |
| 8 | промежуточная аттестация, ч | 2 |
| 9 | Самостоятельная работа, час. | 98 |
| 10 | Всего, ч | 180 |

5. Содержание дисциплины

- Раздел 1. Основные особенности и значение явлений катализа
- Раздел 2. Классификация катализаторов и каталитических процессов
- Раздел 3. Сущность каталитического действия
- Раздел 4. Принципы каталитического действия кислот и оснований
- Раздел 5. Принципы каталитического действия комплексов металлов
- Раздел 6. Катализ металлами
- Раздел 7. Катализ оксидами
- Раздел 8. Гетерогенные металлоорганические катализаторы
- Раздел 9. Катализ сульфидами
- Раздел 10. Основы предвидения каталитического действия

**Фонд оценочных средств
промежуточной аттестации
по дисциплине «Основы современного катализа»**

направление подготовки: 04.06.01 Химические науки
направленность (профиль): Кинетика и катализ

Форма обучения: очная

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы и с указанием используемых оценочных средств

| Индикатор компетенции | Результаты обучения по дисциплине | Оценочное средство |
|---|--|--------------------|
| ОПК-1. Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий | | |
| ОПК-1.1. Знать основные способы и приемы проведения научных и научно-технических исследований | <ul style="list-style-type: none"> – имеет представление об основных современных тенденциях и направлениях развития каталитической науки; – знает основные подходы к разработке и усовершенствованию промышленных катализаторов, методов их производства и оптимального использования в каталитических процессах; – имеет представление о физико-химических методах анализа, позволяющих устанавливать механизмы действия катализаторов и изучать элементарных стадии каталитических превращений. | Экзамен |
| ПК-1. Способность экспериментально определять и рассчитывать скорости химических превращений в различных системах, изучать механизмы и кинетические закономерности каталитических превращений, исследовать природу каталитического действия и промежуточные соединения реагентов с катализатором | | |
| ПК-1.2. Знать ключевые принципы каталитического действия для основных классов каталитических реакций: кислотно-основной катализ, металлокомплексный катализ, катализ металлами, оксидами и сульфидами | <ul style="list-style-type: none"> – понимает сущность явления катализ, причины ускорения и возбуждения химических реакций под влиянием катализаторов; – знает принципы каталитического действия для основных классов каталитических реакций: кислотно-основной катализ, металлокомплексный катализ, ферментативный катализ, катализ металлами, оксидами и сульфидами; | Экзамен |
| ПК-2. Готовность к поиску и разработке новых, а также к усовершенствованию существующих катализаторов и каталитических процессов для проведения новых химических реакций, а также ускорения известных реакций и повышения их селективности | | |
| ПК-2.1. Знать основные | – знает, какие типы физико-химических процессов | Экзамен |

| | | |
|--|--|--|
| <p>типы физико-химических процессов, протекающих на различных этапах синтеза носителей и катализаторов; знать, какие из этих процессов в значительной степени определяют субструктурные и текстурные свойства получаемых материалов, состояние (дисперсность, химический и фазовый состав, распределение по зерну катализатора) активного компонента, а также какие существуют механизмы отравления, спекания и механического разрушения катализаторов в ходе их синтеза или эксплуатации и способы повышения стабильности катализаторов к действию этих негативных факторов</p> | <p>протекают на различных этапах синтеза носителей и катализаторов в рамках тех или иных методов приготовления,</p> <ul style="list-style-type: none"> - знает, какие из этих процессов в значительной степени определяют субструктурные и текстурные свойства получаемых материалов, состояние (дисперсность, химический и фазовый состав, распределение по зерну катализатора) активного компонента; - на основе знаний о химических свойствах катализаторов прогнозирует механизмы отравления, спекания и механического разрушения катализаторов в ходе их синтеза или эксплуатации; - предлагает способы повышения стабильности катализаторов к действию негативных факторов, снижающих активность и ухудшающих физико-химические характеристики катализаторов. | |
|--|--|--|

2. Критерии и шкала оценивания результатов обучения по дисциплине «Основы современного катализа»

Промежуточная аттестация по дисциплине «Основы современного катализа» проходит в форме устного экзамена-собеседования с преподавателем. Учащимся на экзамене предлагается выбрать билет, в каждом билете содержится три теоретических вопроса и задача по темам дисциплины.

| Критерии оценивания результатов обучения | Шкала оценивания |
|---|-----------------------|
| <p>Экзамен:</p> <ul style="list-style-type: none"> – демонстрирует глубокие знания принципов действия катализаторов и основ механизмов каталитических превращений, важнейших каталитических процессов в современной химической промышленности, энергетике и защите окружающей среды; – демонстрирует глубокие знания основных типов промышленных катализаторов, методов их приготовления, особенностей строения и функционирования в промышленных условиях; – аргументированно обосновывает причины дезактивации катализаторов; – не допускает неточностей при выполнении расчетных заданий. | <p><i>Отлично</i></p> |

| | |
|--|-----------------------------------|
| <p>Экзамен:</p> <ul style="list-style-type: none"> – демонстрирует знания принципов действия катализаторов и основ механизмов каталитических превращений, важнейших каталитических процессов в современной химической промышленности, энергетике и защите окружающей среды; – демонстрирует знания основных типов промышленных катализаторов, методов их приготовления, особенностей строения и функционирования в промышленных условиях; – допускает неточности при обосновании причин дезактивации катализаторов; – допускает несущественные неточности при выполнении расчетных заданий. | <p><i>Хорошо</i></p> |
| <p>Экзамен:</p> <ul style="list-style-type: none"> – наличие ответов на все вопросы, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками, – демонстрирует общие знания принципов действия катализаторов и основ механизмов каталитических превращений, важнейших каталитических процессов в современной химической промышленности, энергетике и защите окружающей среды; – демонстрирует общие знания основных типов промышленных катализаторов, методов их приготовления, особенностей строения и функционирования в промышленных условиях; – допускает грубые ошибки при выполнении расчетных заданий. | <p><i>Удовлетворительно</i></p> |
| <p>Экзамен:</p> <ul style="list-style-type: none"> – наличие ответов не на все вопросы, часть из которых – неполные и/или с существенными ошибками, – допускает грубые ошибки при описании принципов действия катализаторов и основ механизмов каталитических превращений, важнейших каталитических процессов в современной химической промышленности, энергетике и защите окружающей среды; – допускает грубые ошибки при описании основных типов промышленных катализаторов, методов их приготовления, особенностей строения и функционирования в промышленных условиях; – допускает грубые ошибки при выполнении расчетных заданий или расчетное задание не выполнено. | <p><i>Неудовлетворительно</i></p> |

3. Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Ниже приведены примеры возможных вопросов к экзамену и типовых задач.

Вопросы к экзамену:

33. Формы воздействия катализатора на реакцию на реакцию на реакцию. Реализация слитного и стадийного превращения. Осуществление цепного механизма.
34. Металлокомплексный катализ: общее рассмотрение. Причины проявления каталитических свойств у переходных металлов. Основные типы реакций, катализируемых комплексными соединениями металлов.
35. Современное определение катализа. Возбуждение и ускорение каталитических реакций. Катализ и иницирование. Катализ и равновесие. Роль катализа в современной жизни.
36. Принципы активации в катализе. Эффекты компенсации. Стадийный и слитный механизмы катализа.
37. Основные положения катализа. Химическая сущность катализа. Катализ в промышленности и живой природе.

38. Ключевые стадии кислотно-основного катализа. Основные реакции карбониевого иона. Кинетика кислотно-основных каталитических реакций.
39. Карбонилирование: важнейшие виды процессов. Основные этапы механизма карбонилирования. Метатезис олефинов: ключевые интермедиаты.
40. Открытие каталитических явлений. История возникновения катализа как науки. Основные положения катализа. Роль катализа в становлении и развитии современной промышленности.
41. Гомогенный катализ в газовой фазе. Общие сведения. Влияние катализаторов на возбуждение и протекание цепных реакций.
42. Классификация катализаторов на основе их химического состава и фазового состояния компонентов. Классификация каталитических процессов.
43. Гидрирование в металлокомплексном катализе. Типы активации молекулы H_2 и гидрируемого субстрата. Характерные циклы гидрирования. Изомеризация. Механизм позиционной изомеризации двойной связи.
44. Металлокомплексные катализаторы с полифункциональным структурно-организованным активным центром. Ферментативный катализ.
45. Факторы, определяющие скорость химического превращения. Степень компенсации энергии разрывающихся и образующихся связей в радикальных и молекулярных реакциях.
46. Гомогенный катализ в жидкой фазе. Особенности протекания химических реакций в растворах. Степень влияния растворителя на скорость реакции. Энергетический профиль жидкофазного каталитического процесса.
47. Типы металлокомплексных соединений. Металлокомплекс как катализатор. Основные типы реакций, катализируемых металлокомплексными соединениями.
48. Важнейшие промышленные процессы, катализируемые металлами и сплавами. Механизмы реакций
49. Окисление аммиака. Устройство катализаторов и режим работы
50. Катализаторы гетерогенной полимеризации олефинов
51. Лабораторные, ресурсные и стендовые испытания катализаторов нейтрализации автомобильных выхлопов
52. Катализ сплавами. Геометрический и электронный эффект. Структурная чувствительность
53. Синтез Фишера-Тропша. Представление о механизме. Уравнение Шульца-Флори
54. Образование активных центров в катализаторах Циглера-Натты. Роль сокатализатора. Определение числа активных центров
55. Строение металлов. Основные факторы, определяющие каталитическую активность металлов
56. Схема Марса и ван Кревелена. Стадийное и слитное окисление CO и углеводородов
57. Катализ сульфидами. Основные реакции, протекающие при гидродесульфуризации
58. Связь каталитической активности и дисперсности. Структурно-чувствительные и структурно-нечувствительные реакции
59. Активация углеводородов в реакциях селективного окисления. Аллильный механизм окисления пропилена
60. Процессы гидроочистки в нефтепереработке. Соединения серы в нефти
61. Состав и функционирование катализаторов нейтрализации автомобильных выхлопов. Основные причины дезактивации
62. Каталитический риформинг в нефтепереработке. Биметаллические катализаторы
63. Окислительный аммонолиз пропилена. Механизм Грасселли
64. Механизм Арлмана-Коссе. Стереоспецифическая полимеризация пропилена

Примеры задач:

4. В порах носителя происходит реакция $A + B \rightarrow P$, для которой кинетическая константа скорости $k_{\text{кин}}$ определяется уравнением Аррениуса: $10^{-10} \cdot \exp[-E_a/RT]$ ($\text{см}^3/\text{с}$), где $E_a = 20$ ккал/моль. Транспорт реагентов А и В осуществляется по механизму прыжковой диффузии, при этом $D_A = D_B = 4.5 \cdot 10^{-9} \cdot \exp[-E_{\text{пр}}/RT]$ ($\text{см}^2/\text{с}$), где энергия активации прыжка $E_{\text{пр}} = 10$ ккал/моль. Радиусы обеих молекул считать равными 2 \AA . В какой области (кинетической или диффузионной) проходит реакция при 423К? При 673К? Определите температуру, при которой происходит смена кинетического и диффузионного режимов.
5. Рассчитайте диффузионную константу (k_D) для метана ($r(\text{CH}_4) = 2.2 \text{ \AA}$), находящегося в потоке выхлопных газов, нагретых до $T = 300^\circ\text{C}$. Давление газов принять равным 1 атм. $r(\text{N}_2) = 1.8 \text{ \AA}$, $r(\text{CO}_2) = 2.3 \text{ \AA}$, $r(\text{H}_2\text{O}) = 1.5 \text{ \AA}$. Как зависит k_D от температуры?
6. Каталитический процесс получения окиси этилена (В) из этилена (А) подчиняется треугольной схеме:



$$[A]_0 = a, [B]_0 = [C]_0 = 0$$

Рассчитайте максимально возможный выход окиси этилена при осуществлении процесса в реакторе идеального смешения. Изобразите зависимость селективности и выхода по целевому продукту от времени контакта τ .