

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Основы конструирования катализаторов М2.В.3

Направление подготовки: 020100.68 - Химия

Профиль подготовки: Нефтехимия и катализ

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Ламберов А.А.

Рецензент(ы):

Соломонов Б.Н.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No ___ от "___" _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ___ от "___" _____ 201__г

Регистрационный No 740014

Казань

2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) заместитель директора по связям с промышленностью и коммерциализации Ламберов А.А. директорат химического института им. А.М. Бутлерова Химический институт им. А.М. Бутлерова , Alexander.Lamberov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

- выработка положений, выдвинувших катализ в число важнейших направлений химии в науке и практике;
- получение теоретических знаний по процессам гомогенного и гетерогенного катализа, адсорбции, ознакомление с основными понятиями и характеристиками катализатора;
- рассмотрение характеристик, природы, свойств, структуры различных типов химических систем с точки зрения возможности их использования в качестве катализаторов;
- получение знаний о современных теоретических и экспериментальных подходах целенаправленного синтеза катализаторов с заданным набором свойств и характеристик, об основных традиционных методах приготовления катализаторов и подходах, положенных в основу каждого конкретного метода приготовления

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М2.В.3 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.68 Химия и относится к вариативной части. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

относится к циклу М2 профессиональных дисциплин, его вариативной части М2.В.3 и опирается на основные разделы общенаучных дисциплин: неорганическая химия, органическая химия, физическая химия, химическая технология, строение вещества, физические методы исследования, современные проблемы катализа, химия твердого тела, каталитические методы в органическом синтезе; естественнонаучных и специальных дисциплин: основы нанотехнологий, химическая термодинамика, физико-химические методы катализа, кинетика химических реакций

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	способностью владеть культурой мышления, умение аргументировано и ясно строить устную и письменную речь
ОК-2 (общекультурные компетенции)	способностью уважительно и бережно относиться к историческому наследию и культурным традициям, толерантность в восприятии социальных и культурных различий
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способностью использовать нормативные правовые документы в своей деятельности, проявлять настойчивость в достижении цели с учетом моральных и правовых норм и обязанностей
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью демонстрации общенаучных базовых знаний естественных наук, математики и информатики, понимание основных фактов, концепций, принципов теорий, связанных с прикладной математикой и информатикой

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью понимать и применять в исследовательской и прикладной деятельности современный математический аппарат
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью в составе научно-исследовательского и производственного коллектива решать задачи профессиональной деятельности
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости вид и характер своей профессиональной деятельности
ПК-7 (профессиональные компетенции)	способностью собирать, обрабатывать и интерпретировать данные современных научных исследований, необходимые для формирования выводов по соответствующим научным, профессиональным, социальным и этическим проблемам

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основные проблемы, решаемые катализом в промышленности;
- сущность явлений гомогенного и гетерогенного катализа, а также физико-химических процессов, происходящих на поверхности и в пористом пространстве катализатора на основных стадиях каталитического процесса, механизмы гомогенных и гетерогенных каталитических процессов;
- основные типы гомогенных и гетерогенных катализаторов, используемых в промышленности;
- основные традиционные методы получения различных типов катализаторов с заданными характеристиками структуры и состава

2. должен уметь:

- применять полученные знания для оценки возможности использования того или иного типа катализатора в том или ином каталитическом процессе, а также при выборе способа его синтеза с требуемыми характеристиками структуры, состава и, как следствие, эксплуатационными характеристиками, для решения конкретных практических задач

3. должен владеть:

- навыками анализа и организации работы каталитических процессов, разработки и применения катализаторов на новых и действующих промышленных объектах,
- навыками экспериментального исследования физико-химических свойств различных каталитических систем, математической обработки результатов измерений и сопоставления их с теоретическими значениями.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

- применять полученные знания для оценки возможности использования того или иного типа катализатора в том или ином каталитическом процессе, а также при выборе способа его синтеза с требуемыми характеристиками структуры, состава и, как следствие, эксплуатационными характеристиками, для решения конкретных практических задач

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 1 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

- 86 баллов и более - "отлично" (отл.);
 71-85 баллов - "хорошо" (хор.);
 55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);
 54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение в конструирование катализаторов	1	1	2	0	0	устный опрос
2.	Тема 2. Явления физической и химической адсорбции в конструировании катализаторов	1	2	2	0	0	коллоквиум
3.	Тема 3. Кислотно-основные характеристики катализаторов и их регулирование при конструировании катализаторов	1	3	2	0	0	контрольная работа
4.	Тема 4. Конструирование оксидных катализаторов	1	4-8	10	0	0	коллоквиум
5.	Тема 5. Конструирование металлических катализаторов.	1	9	2	0	0	контрольная работа
6.	Тема 6. Основы конструирования катализаторов	1	10-14	10	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	1		0	0	0	зачет
	Итого			28	0	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение в конструирование катализаторов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Проблемы в конструировании катализаторов. Определение катализатора. Типы каталитических процессов. Достоинства, недостатки. Роль каталитических процессов в нефтепереработке и нефтехимии. Проблемы конструирования катализаторов. Состав современного катализатора. Активная фаза. Промоторы. Носитель и выполняемые функции. Электронные и структурные факторы катализатора. Стадии каталитического акта.

Тема 2. Явления физической и химической адсорбции в конструировании катализаторов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Физическая и химическая адсорбции в конструировании катализаторов. Критерии физической и химической адсорбции. Потенциальные кривые. Изотермы адсорбции-десорбции. Графическое определение величины монослойной адсорбции. Уравнение БЭТ. Определение величины удельной поверхности. Определение порометрического объема.

Тема 3. Кислотно-основные характеристики катализаторов и их регулирование при конструировании катализаторов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Определение кислотности катализаторов. Индикаторный метод. Метод адсорбции газообразных оснований. Селективная адсорбция оснований Льюиса. ИК спектроскопия валентных колебаний ν_{OH} поверхностных OH-групп для определения силы кислотных центров Бренстеда. Метод ИК-спектроскопии адсорбированных оснований для определения Льюисовской кислотности.

Тема 4. Конструирование оксидных катализаторов

лекционное занятие (10 часа(ов)):

Конструирование оксидных катализаторов. Типы оксидных катализаторов. Важнейшие промышленные оксидные катализаторы. Оксид алюминия. Природа Бренстедовской кислотности оксида алюминия. Природа Льюисовской кислотности оксида алюминия. Влияние кислотных и щелочных добавок на Льюисовскую и Бренстедовскую кислотность поверхности оксида алюминия. Основной катализ. Природа основных центров. Сила основных центров на поверхности оксидов. Важнейшие промышленные основные катализаторы. Оксид кальция. Смешанные оксиды. Мезоструктурные материалы. Структура. Синтез. Кислотность поверхности. Каталитическая активность мезоструктур. Столбчатые глины. Природа и сила кислотных центров. Способы получения. Катализируемые реакции. Фосфатные катализаторы. Природа и сила кислотных центров. Способы получения. Катализируемые реакции. Дегидратация спиртов. Двухстадийный процесс через образование эфира. Активные центры дегидратации на γ - Al_2O_3 . Дегидратация спиртов с участием бренстедовских, льюисовских и основных центров по синхронному механизму. Применение кислотных форм цеолитов для превращения метанола в линейные и циклические углеводороды. Механизм реакции превращения метанола в линейные и циклические углеводороды на кислых формах цеолитов.

Тема 5. Конструирование металлических катализаторов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Конструирование металлических катализаторов. Важнейшие промышленные металлические катализаторы. Каталитические процессы гидрирования. Хемосорбированные молекулы на металлах. Конструирование металлических катализаторов гидрирования жиров. Условия реакции гидрирования жиров.

Тема 6. Основы конструирования катализаторов

лекционное занятие (10 часа(ов)):

Важнейшие показатели катализаторов. Активность катализаторов. Селективность катализаторов. Механическая прочность катализаторов. Оптимальные гидродинамические характеристики катализаторов. Конструирование катализаторов с использованием различных методов: осаждения из растворов, нанесения активной фазы на носитель, механического смешения компонентов, термического разложения исходных веществ, мехнохимической активацией. Приготовление катализаторов по золь-гель технологии. Процесс формирования пористого материала по золь-гель способу. Получение силикагеля. Гидролиз алкоксидов в кислой и щелочной средах. Поликонденсация. Гелеобразование. Возможные варианты получения ксерогелей. Основы получения катализаторов методами нанесения. Требования к носителям катализаторов. Способы нанесения из газовой и жидкой фаз. Капиллярная пропитка. Диффузионная пропитка. Механизмы закрепления предшественника активного компонента на поверхности носителя: адсорбция в молекулярно-дисперсном состоянии, ионный (катионный или анионный) обмен с поверхностными функциональными группами), химическое взаимодействие, электрохимическое восстановление металла на поверхности.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение в конструирование катализаторов	1	1	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
2.	Тема 2. Явления физической и химической адсорбции в конструировании катализаторов	1	2	подготовка к коллоквиуму	10	коллоквиум
3.	Тема 3. Кислотно-основные характеристики катализаторов и их регулирование при конструировании катализаторов	1	3	подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа
4.	Тема 4. Конструирование оксидных катализаторов	1	4-8	подготовка к коллоквиуму	10	коллоквиум
5.	Тема 5. Конструирование металлических катализаторов.	1	9	подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа
	Итого				44	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
- использованием раздаточного материала использованием раздаточного материала с изображением структуры катализаторов, их фотографиями, схемами производств катализаторов и их эксплуатации, конструкции химического оборудования, приборов для синтеза и анализа катализаторов.

- использованием интернет-ресурсов различных поисковых систем, таких как www.rambler.ru, www.yandex.ru, www.wail.ru, www.yahoo.ru; www.rushim.ru, www.chem.msu.ru, www.Scirus.com, а также сайтов государственных ВУЗов: МГУ, СПбГУ, НГУ, ИК СО РАН, Scientopica, ChemWeb, ResearchIndex, ScientificWorld

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

Тема 1. Введение в конструирование катализаторов

устный опрос , примерные вопросы:

Сущность явлений катализа, типы каталитических процессов. Основные стадии каталитического процесса. Формы промежуточного химического взаимодействия при катализе. Роль геометрического и энергетического факторов при взаимодействии реагентов с катализатором. Факторы, определяющие скорость каталитической реакции. Определение катализатора, классификация катализаторов на основе химического и фазового составов. Основные компоненты катализатора, выполняемые функции. Основные характеристики катализаторов: активность, удельная активность, селек-тивность, стабильность, механические свойства. Основные этапы и методы приготовления катализаторов. Влияние способа приго-товления на основные характеристики катализатора.

Тема 2. Явления физической и химической адсорбции в конструировании катализаторов

коллоквиум , примерные вопросы:

Типы изотерм адсорбции. Сравнительный метод анализа изотерм адсорбции. Стандартные изотермы адсорбции. Явление капиллярной конденсации. Обратимая и необратимая капиллярная конденсация. Причины гистерезиса. Уравнение Кельвина. Использование хемосорбции для исследования катализаторов. Классификация пор по размерам. Формы пор.

Тема 3. Кислотно-основные характеристики катализаторов и их регулирование при конструировании катализаторов

контрольная работа , примерные вопросы:

Современный катализ сверхкислотами и сверхоснованиями. Понятие сверхкислоты. Структура. Природа каталитической активности. Катализируемые реакции. Понятие сверхоснования. Структура. Природа каталитической активности. Катализируемые реакции.

Тема 4. Конструирование оксидных катализаторов

коллоквиум , примерные вопросы:

Алюмосиликаты. Бренстедовские и Льюисовские кислотные центры. Основные центры. Формирование. Природа каталитической активности алюмосиликатов и аморфных силикатов. Сульфатные катализаторы. Природа и сила кислотных центров. Способы получения. Катализируемые реакции. Дегидратация α -фенилэтанола. Механизм реакции. Разработка и применение катализатора на примере ОАО ?Нижнекамскнефтехим?. Цеолиты как адсорбенты. Применение в промышленных каталитических технологиях.

Тема 5. Конструирование металлических катализаторов.

контрольная работа , примерные вопросы:

Конструирование металлических катализаторов селективного гидрирования ацетилена в этилен. Конструирование металлических катализаторов гидрирования бензола в циклогексан.

Тема 6. Основы конструирования катализаторов

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

1. Сущность явлений катализа, типы каталитических процессов.

2. Основные стадии каталитического процесса. Формы промежуточного химического взаимодействия при катализе. Роль геометрического и энергетического факторов при взаимодействии реагентов с катализатором.
3. Факторы, определяющие скорость каталитической реакции.
4. Определение катализатора, классификация катализаторов на основе химического и фазового составов. Основные компоненты катализатора, выполняемые функции.
5. Основные характеристики катализаторов: активность, удельная активность, селективность, стабильность, механические свойства.
6. Основные этапы и методы приготовления катализаторов. Влияние способа приготовления на основные характеристики катализатора.
7. Основные различия физической и химической адсорбции. Критерии, потенциальные кривые.
8. Изотермы мономолекулярной адсорбции Ленгмюра, Генри. Типы изотерм.
9. Методы определения величины монослойной адсорбции.
10. Модель Брунауэра-Эммета-Теллера (БЭТ), расчет удельной поверхности по БЭТ. Сравнительный метод анализа изотерм адсорбции, основанный на использовании стандартных изотерм адсорбции.
11. t-графики, отклонения от идеальности. Применение метода для определения объема микро- и мезопор.
12. Особенности обратимой и необратимой капиллярной конденсации в различных пористых телах. Классические уравнения теории капиллярности: уравнение Лапласа-Юнга, Кельвина и т.д.
13. Явление гистерезиса, причины. Типы гистерезисных петель.
14. Хемосорбция. Использование явления хемосорбции для исследования состояния (дисперсность, степень окисления) активного компонента катализатора.
15. Механизмы гомогенных каталитических реакций.
16. Механизмы гетерогенных каталитических реакций. Модель Ленгмюра-Хиншелвуда, Ридила-Эли, их применение и ограничения.
17. Гомогенный кислотно-основной катализ. Определение кислоты и основания по Бренстеду и Льюису.
18. Уравнение Гамета, функция кислотности Гамета. "Жесткие" и "мягкие" кислоты и основания.
19. Сверхкислоты и сверхоснования как катализаторы. Механизмы возникновения кислотности у сверхкислот.
20. Гетерогенный кислотно-основной катализ. Катализ оксидами. Оксиды алюминия, классификация, структура. Способы получения, регулирование структурных и текстурных характеристик.
21. Кислотно-основные свойства оксидов алюминия, способы модифицирования кислотно-основных свойств.
22. Кислотно-основные свойства других индивидуальных оксидов. Кислотно-основные свойства смешанных оксидов.
23. Катализ цеолитами. Цеолиты, типы, классификация, структура, молекулярно-ситовые свойства. Основные способы получения цеолитов.
24. Кислотно-основные свойства цеолитов, модифицирование кислотно-основных свойств. Ионный обмен.
25. Мезоструктурные материалы (MCM), строение, состав, способы получения, кислотно-основные свойства.
26. Гетерополикислоты, строение, состав, способы получения, кислотно-основные свойства.
27. Методы определения кислотности: индикаторный, титриметрический, метод адсорбции газообразных оснований, метод зондовой ИК-спектроскопии.
28. Окислительно-восстановительный катализ. Активные формы кислорода как окислителя, участие структурного кислорода.

29. Парциальное и полное окисление.
30. Катализ металлами. Модели активных центров. Структурно-чувствительные и структурно-нечувствительные каталитические реакции.
31. Основные факторы, определяющие каталитическую активность металлов.
32. Каталитическое действие металлокомплексных катализаторов. Основные стадии каталитического процесса.
33. Комплексообразование как основная стадия процесса активации молекул реагирующих веществ.
34. Основные стадии перегруппировок металлоорганических соединений.
35. Катализ кластерами. Закрепленные металлокомплексы как катализаторы.

7.1. Основная литература:

1. Миначев, Хабиб Минаевич. Избранные труды: гетерогенный катализ. Нефтехимия. Каталитический органический синтез / Х. М. Миначев; Рос. акад. наук, Ин-т орган. химии им. Н. Д. Зелинского; ред.-сост. д.х.н., проф. Н. Я. Усачев; предисл. чл.-кор. РАН А. Л. Лapidуса и д.х.н., проф. Н. Я. Усачева. ?Москва: URSS: [ЛИБРОКОМ, 2011]. ?844 с.,
2. Боруцкий, Павел Николаевич. Каталитические процессы получения углеводородов разветвленного строения, Изомерия и катализ синтеза углеводородов разветвленного строения / П. Н. Боруцкий. ?Санкт-Петербург: Професионал, 2010. ?745 с.:
3. Чоркендорф, Иб (1955-) . Современный катализ и химическая кинетика / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт ; пер. с англ. В. И. Ролдугина .? 2-е изд. ? Долгопрудный : Интеллект, 2013 .? 500, [1] с.
4. Бокштейн Б.С., Менделев М.И. Физическая химия: термодинамика и кинетика. - М.:МИСИС, 2012.- 258 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=47443

7.2. Дополнительная литература:

1. Modern heterogeneous oxidation catalysis: design, reactions and characterization / ed. by Noritaka Mizuno.?[Weinheim]: Wiley-VCH, [cop. 2009].?XV, 341 с.;
2. Буданов В.В., Ломова Т.Н. Химическая кинетика: учебное пособие. - Санкт-Петербург: Лань, 2014. - 288 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=42196

7.3. Интернет-ресурсы:

- Катализ в промышленности, периодический журнал - <http://elibrary.ru/contents.asp?issueid=1140752>
- Кинетика и катализ, периодический журнал - <http://elibrary.ru/contents.asp?issueid=712147>
- Неорганические материалы, периодический журнал - <http://elibrary.ru/issues.asp?id=7918>
- Нефтехимия, периодический журнал - <http://elibrary.ru/issues.asp?id=7920>
- рекомендации по разработке катализатора - <http://e.lanbook.com/view/book/32826/page249/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Основы конструирования катализаторов" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

- слайды с применением мультимедийной техники;

- раздаточный материал с изображением структуры катализаторов, их фотографиями, схемами производств катализаторов и их эксплуатации, конструкции химического оборудования, приборов для синтеза и анализа катализаторов

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.68 "Химия" и магистерской программе Нефтехимия и катализ .

Автор(ы):

Ламберов А.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Соломонов Б.Н. _____

"__" _____ 201__ г.