

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

Кинетика и термодинамика каталитических реакций Б1.В.ОД.5

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Нефтехимия и катализ

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Седов И.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 759914

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) старший научный сотрудник, к.н. Седов И.А. НИЛ физико-химических методов исследования биомолекул Химический институт им. А.М. Бутлерова, Igor.Sedov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

приобретение фундаментального представления об описании явления катализа методами физической химии

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ОД.5 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к обязательные дисциплины. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

относится к циклу Б1 профессиональных дисциплин, его базовой части Б1.В.ОД.5 и опирается на основные разделы общенаучных дисциплин: физическая химия, физика, высшая математика, органическая химия

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
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
ПК-10 (профессиональные компетенции)	способностью применять в профессиональной деятельности современные языки программирования и языки баз данных, операционные системы, электронные библиотеки и пакеты программ, сетевые технологии
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 законы химической термодинамики и кинетики, механизмы важнейших типов каталитических процессов, закономерности процессов адсорбции, методы вывода уравнений, описывающих закономерности протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических процессов, простейшие виды этих уравнений, законы массо- и теплопереноса, кинетические уравнения каталитических процессов для различных режимов в макроскопических системах

2. должен уметь:

рассчитывать на основе фундаментальных физических законов и простейших модельных представлений параметры каталитических процессов

3. должен владеть:

методами физической химии применительно к каталитическим процессам

4. должен демонстрировать способность и готовность:

вывода уравнений, описывающих закономерности протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических процессов

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

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

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 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. Основные определения. Возможность описания каталитических процессов	2	1-2	2	2	0	устный опрос
2.	Тема 2. Гомогенный катализ	2	3-4	2	2	0	контрольная работа
3.	Тема 3. Адсорбция и гетерогенные каталитические реакции	2	5-6	2	2	0	устный опрос
4.	Тема 4. Кинетика гетерогенного катализа	2	7-9	1	4	0	контрольная работа

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
5.	Тема 5. Ферментативный катализ	2	10-13	1	4	0	контрольная работа
6.	Тема 6. Термодинамика и кинетика в реальных каталитических системах	2	13-16	2	4	0	контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	зачет
	Итого			10	18	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Основные определения. Возможность количественного описания каталитических процессов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Краткий исторический очерк. Основные этапы развития катализа. Феноменология катализа. Роль катализа в современной химической промышленности и в живой природе. Общие принципы катализа. Катализ и равновесие. Промежуточные соединения в катализе, катализатор как астехиометрический реагент. Каталитический цикл. Новый реакционный путь, открываемый катализатором. Факторы, определяющие скорость каталитической реакции. Эффекты компенсации и дополнительного связывания. Взаимодействие реакционной среды и катализатора. Активные формы гомогенных и гетерогенных катализаторов. Стационарное состояние катализатора. Обратная связь и саморегулирование в катализе. Принципы классификации катализаторов и каталитических процессов. Основные характеристики катализаторов: активность, селективность, стабильность.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Энергетические диаграммы. Различные виды катализа, их механизмы и особенности

Тема 2. Гомогенный катализ

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Гомогенный катализ и его основные особенности. Гомогенные каталитические системы. Гомогенные катализаторы, их типы и строение. Молекулярный характер гомогенных катализаторов. Газофазный гомогенный катализ. Газообразные системы и каталитические реакции. Примеры газофазного катализа. Механизм каталитического действия. Жидкофазный гомогенный катализ. Кислотно-основный катализ в растворах. Катализаторы, природа каталитического действия. Типы химических реакций. Примеры каталитических процессов. Металлокомплексный катализ. Комплексы переходных металлов, особенности их состава и строения. Стадии каталитического процесса с участием КПМ, каталитические циклы. Принципы соответствия в металлокомплексном катализе. Примеры реакций: гидрирование, окисление, гидроформилирование, изомеризация. Мицеллярный катализ. Поверхностно-активные вещества. Мицеллообразование в водных и органических средах. Распределение реагентов в мицеллярном растворе. Природа каталитического эффекта. Области применения мицеллярного катализа. Межфазный катализ. Особенности химических реакций в многофазных системах. Процессы переноса через поверхности раздела фаз. Катализаторы-переносчики, механизм их действия.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Квазистационарное и квазиравновесное приближения для гомогенных каталитических реакций. Нестационарная кинетика.

Тема 3. Адсорбция и гетерогенные каталитические реакции

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Адсорбированные молекулы взаимодействуют с молекулами или атомами поверхности и снижают как свободную поверхностную энергию конденсированной фазы, так и суммарную энергию системы. Энергетика и термодинамика адсорбции рассмотрены в следующих лекциях, а сейчас отметим, что адсорбция – процесс самопроизвольный, происходящий с выделением тепла. Процесс, обратный адсорбции, называют десорбцией. адсорбентом называют твердое вещество, на котором происходит адсорбция; адсорбатом называют уже адсорбированное вещество, находящееся на поверхности или в объеме пор адсорбента; адсорбтивом называют вещество, способное адсорбироваться, но еще не адсорбированное. В общем случае адсорбция обусловлена взаимодействием молекул адсорбата с молекулами (атомами), примыкающими к поверхности адсорбента, а также между адсорбированными молекулами или их фрагментами. Все виды адсорбции имеют общую квантово-механическую основу, природа взаимодействия определяется электронной структурой молекул адсорбата и адсорбента. Существует непрерывный спектр форм адсорбции, различающихся по интенсивности взаимодействия, типу сил, характеру образующихся связей адсорбат – адсорбент, изменениям в структуре как адсорбированных молекул, так поверхности адсорбента. Обычно выделяют два предельных случая адсорбции: адсорбцию химическую или хемосорбцию и адсорбцию физическую или физическую адсорбцию. Типичная хемосорбция – это химическая реакция между адсорбатом и поверхностными атомами или группами атомов адсорбента, при которой молекула адсорбата отдает или получает от поверхности электрон. Типичная физическая адсорбция осуществляется за счет сил межмолекулярного взаимодействия, которые не связаны с переносом или обобществлением электронов. Изотерма Генри. Это уравнение, которое для изотермических условий при малых давлениях, когда газ можно рассматривать как идеальный, а число его соударений с поверхностью пропорционально P Изотерма адсорбции Ленгмюра. Уравнение БЭТ. При выводе этого уравнения использованы допущения, Ленгмюра: рассматривается локализованная адсорбция на однородной поверхности без учета взаимодействия между молекулами в плоскости слоя, но дополнительно вводится учет вертикальных межмолекулярных взаимодействий адсорбат – адсорбат. Применение уравнения БЭТ может быть достаточно корректным лишь при гарантированном отсутствии микропор и поверхностных модификаторов.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Скорость гетерогенных каталитических реакций

Тема 4. Кинетика гетерогенного катализа

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Кинетические модели гетерогенных реакции, Ленгмюра-Хиншельвуда и Ридила-Эли. Стадийные и слитные механизмы в гетерогенном катализе, примеры процессов. Степень компенсации и потенциальные профили для этих механизмов. Электронные представления в катализе. Элементы зонной теории полупроводников. Слабые и сильные формы хемосорбционной связи на поверхности полупроводниковых катализаторов, их реакционная способность. Радикальные механизмы реакций в полупроводниковом катализе. Отравление, промотирование, модифицирование катализаторов в рамках электронной теории. Роль уровня Ферми, как регулятора скорости, селективности реакций на поверхности полупроводников.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Различные виды ингибирования.

Тема 5. Ферментативный катализ

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Строение молекул фермента. Особенности взаимодействия в каталитическом комплексе ?субстрат ? фермент?. Основные особенности кинетики ферментативных реакций. Классификация ферментов. Механизмы ферментативного катализа (снижение ферментами энергии активации, принцип индуцированного соответствия). Факторы, влияющие на эффективность ферментативного катализа: концентрация фермента, его активаторов или ингибиторов, субстрата; температура; pH; дисперсность субстрата; аллостерия; наличие мультиферментных комплексов, изоферментов или множественных молекулярных форм ферментов. Имобилизация ферментов. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Кинетические уравнения для ферментативных реакций с различными видами ингибирования.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Диффузионный и кинетический режимы каталитической реакции.

Тема 6. Термодинамика и кинетика в реальных каталитических системах

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Основные процессы нефтепереработки ? пиролиз, крекинг, риформинг. Гидрирование в производстве метанола, альдегидов и кетонов, аминов. Дегидрирование в производстве стирола, бутадиена. Процессы окисления ? производство оксида этилена, формальдегида, малеинового и фталевого ангидридов, акролеина, окислительный аммонолиз. Алкилирование, деалкилирование. Получение этилбензола и кумола, алкилирование парафинов олефинами. Получение синтез-газа. Процесс Фишера?Тропша. Синтез метанола. Карбонилирование спиртов. Получение бензинов и индивидуальных углеводородов на базе метанола. Обзор современных методов формирования сорбентов с определенными свойствами поверхности и пористой структурой. Конструирование материалов с упорядоченной пористой структурой с использованием темплатного (матричного) синтеза за последние два десятилетия распространилось во многих странах. Модифицирование углеродных адсорбентов обработкой химическими реагентами. Электрохимическое модифицирование углеродных материалов. Темплатный синтез каталитически активных образований на поверхности углеродных и неорганических материалов. Направленный синтез функциональных пористых материалов.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Примеры из промышленности, лаборатории и живых систем.

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. Основные определения. Возможность количественного описания каталитических процессов	2	1-2	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
2.	Тема 2. Гомогенный катализ	2	3-4	подготовка к контрольной работе	8	контрольная работа
3.	Тема 3. Адсорбция и гетерогенные каталитические реакции	2	5-6	подготовка к устному опросу	8	устный опрос
4.	Тема 4. Кинетика гетерогенного катализа	2	7-9	подготовка к контрольной работе	8	контрольная работа

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Ферментативный катализ	2	10-13	подготовка к контрольной работе	8	контрольная работа
6.	Тема 6. Термодинамика и кинетика в реальных каталитических системах	2	13-16	подготовка к контрольной работе	8	контрольная работа
	Итого				44	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- демонстрация слайдов с применением мультимедийной техники,
- практические занятия, в том числе с использованием компьютерных программ для решения задач,
- экспериментальные работы

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

Тема 1. Основные определения. Возможность количественного описания каталитических процессов

устный опрос , примерные вопросы:

Сущность явления катализа. Общие закономерности и энергетические диаграммы каталитических процессов.

Тема 2. Гомогенный катализ

контрольная работа , примерные вопросы:

Классификация каталитических процессов. Механизмы различных видов катализа.

Тема 3. Адсорбция и гетерогенные каталитические реакции

устный опрос , примерные вопросы:

Гетерогенные каталитические реакции. Классификация адсорбционных явлений.

Тема 4. Кинетика гетерогенного катализа

контрольная работа , примерные вопросы:

Уравнения для скоростей элементарных стадий каталитических процессов.

Квазистационарное приближение для гомогенных каталитических реакций. Нестационарные процессы.

Тема 5. Ферментативный катализ

контрольная работа , примерные вопросы:

Катализ в макроскопических системах. Локальное термодинамическое равновесие. Законы диффузии и теплопереноса. Диффузионный и кинетический режимы каталитической реакции.

Тема 6. Термодинамика и кинетика в реальных каталитических системах

контрольная работа , примерные вопросы:

Термодинамика адсорбции. Уравнение Ленгмюра. Уравнения для описания гетерогенных каталитических процессов. Ферментативный катализ.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Билеты к зачету

Билет 1

Катализ. Общие определения. Типы катализа и их примеры. Частота и число оборотов катализатора.

Билет 2

Общие закономерности и отличительные особенности гомогенного и гетерогенного катализа на конкретных примерах. Зависимость скорости реакций от концентрации или площади поверхности катализатора.

Билет 3

Природа каталитического действия поверхности твердого тела. Поверхностные активные центры. Различные механизмы гетерогенных каталитических процессов.

Билет 4

Явление адсорбции в гетерогенном катализе. Виды изотерм адсорбции и уравнения для их описания.

Билет 5

Стадии гетерогенных каталитических процессов. Вывод кинетических уравнений для различных механизмов.

Билет 6

Влияние диффузии на скорость гетерогенных каталитических процессов. Внутри- и внешнедиффузионная область.

Билет 7

Законы диффузии и теплопереноса. Диффузионный и кинетический режимы каталитической реакции.

Билет 8

Ферментативный катализ. Вывод уравнения Михаэлиса-Ментен. Виды ингибирования ферментов.

Билет 9

Гомогенный катализ и его разновидности с примерами. Квазистационарное и квазиравновесное приближения для гомогенных каталитических реакций.

Билет 10

Общий и специфический основной и кислотный катализ. Вывод кинетических уравнений. Примеры реакций.

7.1. Основная литература:

1. 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.

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

3. 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

4.Афанасьев, Борис Николаевич. Физическая химия: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям "Химическая технология", "Биотехнология" и "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. - Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2012. - 463 с.

7.2. Дополнительная литература:

1.Афанасьев Б.Н., Акулова Ю.П.Физическая химия . - СПб.: Лань, 2012. - 416 с.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4312

2.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.,-

3.Modern heterogeneous oxidation catalysis: design, reactions and characterization / ed. by Noritaka Mizuno. - [Weinheim]: Wiley-VCH, [cop. 2009]. - XV, 341 с.;

7.3. Интернет-ресурсы:

Вестник МГУ. серия Химия - <http://www.chem.msu.ru/rus/vmgu/welcome.html>

Кинетика и катализ - <http://elibrary.ru/contents.asp?issueid=712147>

кинетика каталитических реакций - <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/1923.html>

Российский химический журнал - <http://www.chem.msu.ru/rus/journals/jvho/welcome.html>

физическая химия. термодинамика и кинетика -

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=47443

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Кинетика и термодинамика каталитических реакций" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "БиблиоРоссика", доступ к которой предоставлен студентам. В ЭБС "БиблиоРоссика" представлены коллекции актуальной научной и учебной литературы по гуманитарным наукам, включающие в себя публикации ведущих российских издательств гуманитарной литературы, издания на английском языке ведущих американских и европейских издательств, а также редкие и малотиражные издания российских региональных вузов. ЭБС "БиблиоРоссика" обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

слайды с применением мультимедийной техники

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Нефтехимия и катализ .

Автор(ы):

Седов И.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Соломонов Б.Н. _____

"__" _____ 201__ г.