

МИНОБРНАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины

Гетерогенный катализ

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Квалификация (степень) выпускника

Бакалавр

Форма обучения

очная

Томск – 2015

1. Код и наименование дисциплины

Б1.В.ДВ.4.5.2. Гетерогенный катализ

2. Цель изучения дисциплины

Целями изучения дисциплины «Гетерогенный катализ» являются получение студентами теоретических знаний по катализу на современном уровне и во взаимосвязи с другими науками, а также развитие у студентов способности к проведению систематических исследований в области катализа.

Для достижения поставленной цели выделяются следующие задачи курса:

- ознакомить студентов с основными причинами возникновения каталитических эффектов, понятиями активного центра катализатора и каталитического цикла; формами промежуточных химических взаимодействий при катализе;
- ознакомить студентов с принципами каталитического действия катализаторов разной природы: кислот и оснований, цеолитов, твердых оксидов, металлов, сульфидов металлов, твердых металлоорганических систем, кластеров металлов;
- ознакомить студентов с основами формальной кинетики гетерогенных каталитических реакций; экспериментальными методами изучения кинетики;
- ознакомить студентов с основными направлениями развития теоретических представлений о предвидении каталитического действия, прогнозирования состава активных центров и методов их конструирования;
- ознакомить студентов с каталитическими реакциями важнейших типов, а также составом и свойствами важнейших катализаторов химической, нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности;
- ознакомить студентов с возможностями современных физических методов исследования свойств катализаторов, изучения их каталитической активности и механизмов протекающих на них реакций; современными тенденциями в развитии методов поиска и исследования катализаторов; применением методов теоретической химии в катализе.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения

Программа рассчитана на изучение дисциплины «Гетерогенный катализ» на 4-ом курсе в течение одного (7-го) семестра.

4. Общая трудоемкость дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа, из которых 68 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (36 часов – занятия лекционного типа, 32 часа – занятия семинарского типа), 76 часов составляет самостоятельная работа обучающегося, в том числе 36 часов – подготовка к экзамену. Для студентов проводятся групповые и индивидуальные консультации.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
СК-4, II уровень: - способность применять основные закономерности физической химии при решении конкретных задач химии и химической технологии, в том числе, синтеза и изучения функциональных свойств адсорбентов, катализаторов и других твердых тел, с применением современных методов исследования. Уметь проводить термодинамические расчеты химических процессов (включая методы квантовой механики), исследовать кинетику и механизм химических реакций с целью их научного и	У (СК-4) – II Уметь - ориентироваться в вопросах гетерогенного катализа, закономерностях каталитических превращений различных веществ; - разбираться в основных видах каталитических систем, имеющих промышленно-важное значение; - выполнять кинетические расчеты для гетерогенных каталитических реакций; - проводить системные исследования в области катализа по приоритетным направлениям, использовать приобретенные знания при решении профессиональных задач.

практического применения.

З (СК-4) – II Знать

- сущность, закономерности катализа и особенности гетерогенного катализа;
- основы и особенности кинетики гетерогенных каталитических реакций;
- принципы каталитического действия для основных классов каталитических реакций: кислотно-основный катализ, катализ металлами, оксидами;
- основные направления развития теоретических представлений о предвидении каталитического действия;
- возможности современных физических методов исследования свойств катализаторов и изучения их каталитической активности.

В (СК-4) – II Владеть

- необходимыми знаниями в области исследования и применения гетерогенных катализаторов и каталитических процессов на границах раздела фаз газ-твердое тело и жидкость-твердое тело и навыками их использования для решения фундаментальных и прикладных задач.

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, всего 144 часа.

№ п/п	Наименование разделов и тем	Всего часов	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)		
				лекции	семинары	СРС
1	Основные особенности катализа. Значение явления катализа. История развития науки о катализе.	4	1	2	-	2
2	Природа каталитического действия.	6	2	2	-	4
3	Гетерогенный катализ твердыми катализаторами.	6	2	2	-	4
4	Основные понятия катализа: активность, селективность. Методы исследования каталитических свойств гетерогенных катализаторов.	13	3-4	2	6	5
5	Кинетика гетерогенных каталитических реакций.	13	5-6	6	2	5
6	Кислотно-основной катализ.	17	7-9	6	6	5
7	Катализ оксидами: каталитическое окисление.	19	10-13	8	6	5
8	Катализ металлами.	17	13-16	6	6	5
9	Основы предвидения каталитического действия.	13	16-18	2	6	5
	Экзамен	36	36			36
	Итого	144		36	32	76

*Примечание. Формы контроля предусматривают: письменный экзамен в виде теста; контрольные работы в виде теста или заданий, выполняемые студентами после завершения изучения материала тематического раздела на лекциях и семинарах; выполнение и защита индивидуальных теоретических заданий (рефератов); выполнение индивидуального расчетного задания

6.2. Содержание дисциплины

Программа курса включает рассмотрение следующих тем:

1. Основные особенности катализа. История развития науки. Значение явления катализа.

2. Природа каталитического действия.

Энтальпийный и энтропийный факторы. Снижение энергии активации как основная причина ускорения каталитических реакций. Стадийный и ассоциативный (слитный) механизмы катализа. Влияние отклонения от равновесного состояния на скорость реакции.

3. Гетерогенный катализ твердыми катализаторами.

Механизм действия. Специфика гетерогенного катализа. Активный центр. Правило Борескова. Поверхностное взаимодействие реагирующих веществ с катализатором. Химическая адсорбция. Потенциальная кривая для гетерогенной каталитической реакции. Сравнение скоростей реакций гомогенного и гетерогенного катализа.

4. Основные понятия катализа: активность, селективность. Методы исследования каталитических свойств гетерогенных катализаторов.

Каталитическая активность, конверсия. Удельная каталитическая активность, число оборотов. Селективность. Исследования каталитических свойств. Влияние процессов переноса. Проточные и статические методы. Реактор идеального вытеснения. Реактор идеального смешения. Дифференциальный и интегральный реактора.

5. Кинетика каталитических реакций.

Стадии гетерогенно-каталитической реакции (диффузия, адсорбция, химическая реакция, десорбция). Влияние процессов переноса на скорость гетерогенно-каталитической реакции. Собственная химическая кинетика. Ленгмюровская кинетика каталитических реакций. Механизм Ленгмюра-Хиншельвуда. Механизм Или-Ридиела.

Кинетика сложных каталитических реакций. Лимитирующая стадия. Стационарный и квазистационарный режимы. Принцип стационарности Боденштейна.

Кинетика каталитических реакций на неоднородной поверхности.

6. Кислотно-основной катализ.

Определение кислот и оснований в рамках различных теорий (Бренстеда, Льюиса, Усановича, Танабе). Определение силы кислотных центров (рН, функция Гаммета H_0). Кислотные и основные центры в гетерогенном катализе. Методы определения кислотных и основных центров на поверхности.

Корреляционные соотношения в кислотно-основном катализе. Уравнение Бренстеда. Корреляции активности с кислотностью в гетерогенном катализе.

Природа и структура кислотных центров на поверхности оксидов. Модель Моделунга. Оксид алюминия. Алумосиликаты. Цеолиты.

Механизмы кислотно-основного катализа. Дегидратация спиртов. Каталитический крекинг углеводородов.

7. Катализ оксидами.

Каталитическое окисление. Формы кислорода на поверхности. Классификация процессов окисления (глубокое и селективное окисление). Теория кристаллического поля. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Теория поля лигандов. Энергия стабилизации полем лиганда. Применение теории кристаллического поля и теории поля лигандов к явлениям адсорбции и катализа. Двухпиковая картина изменения каталитических свойств оксидов.

Классификация механизмов каталитического окисления. Стадийный и слитный механизмы. Механизм Марса-Ван Кревелена.

Связь каталитической активности с энергией связи кислорода. Соотношение Бренстеда-Поляни-Семенова.

Реакции селективного окисления. Связь селективности с энергией связи кислорода с поверхностью оксида.

8. Катализ металлами.

Основные реакции, катализируемые металлами. Промышленные процессы, проводимые на металлических катализаторах (гидрирование жиров, селективное гидрирование ацетилена, гидрирование бензола в циклогексан, синтез аммиака, паровая конверсия метана).

Структура объема и поверхности металлов. Кристаллография поверхности металлов. Реакционная способность поверхности. Плотность атомов на поверхности. Адсорбционные центры.

Зонная теория строения твердого тела. Зонная структура переходных металлов. Модели s-d- обмена. Подходы к трактовке взаимодействия реагирующих веществ с металлическими катализаторами (локальное и коллективное взаимодействие). Коллективные свойства металлов в катализе. Валентная теория Полинга. d-характер металлической связи.

Катализ сплавами. Структуры сплавов. Значение локальных и коллективных свойств сплавов в катализе. Структурно-чувствительные и структурно-нечувствительные реакции.

Нанесенные металлы. Размеры и форма малых металлических частиц. Электронная структура нанесенных кластеров металлов. Структурно-чувствительные и структурно-нечувствительные реакции на нанесенных металлах. Влияние взаимодействия металл-носитель. Спилловер водорода.

9. Основы предвидения каталитического действия.

Исторические этапы развития теоретических представлений о катализе. Физические и химические теории. Объединение химических и физических теорий катализа. Работы Тейлора, Баландина, Кобозева, Рогинского, Волькенштейна, Борескова в области теорий активированной адсорбции и активных центров. Главные положения и предсказательная способность некоторых основных физико-химических теорий катализа.

Современные тенденции в развитии методов поиска катализаторов с заданными свойствами. Подходы и роль ЭВМ в реализации этих подходов.

6.3. Перечень семинарских занятий

№ п/п	Тема занятия
1	Методы исследования каталитических свойств гетерогенных катализаторов.
2	Кинетика гетерогенных каталитических реакций.
3	Кислотно-основной катализ.
4	Катализ оксидами: каталитическое окисление.
5	Катализ металлами.
6	Проблемы предвидения каталитического действия.

7. Ресурсное обеспечение

7.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

1. Чоркендорф И., Наймантсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2010. 504 с.
2. Ролдугин В.И. Физикохимия поверхности. Долгопрудный: ИД "Интеллект", 2011. 564 с.
3. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986. 304 с.
4. Крылов О.В. Гетерогенный катализ. М.: ИКЦ «Академкнига», 2004. 679 с.
5. Боресков Г.К. Катализ. Ч.1, 2. Новосибирск, 1971. 267 с.
6. Сетерфилд Ч. Практический курс гетерогенного катализа. М.: Мир, 1984. 520 с.
7. Рогинский С.З. Гетерогенный катализ. Некоторые вопросы теории. - М.: Наука, 1979. С. 416.
8. Мухленов И.П. Технология катализаторов. Л.: Химия, 1979. 324 с.
9. Киперман С.Л. Введение в кинетику гетерогенных каталитических реакций. М.: Наука, 1964. 608 с.
10. Бобров, Н. Н. Экспериментальные методы изучения свойств катализаторов и сорбентов / Промышленный катализ в лекциях. Вып. 3. М.: Калвис, 2006. С.41-76.
11. Панченков Г.М., Лебедев В.П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1974. 592 с.
12. Паукшпис Е.А. Инфракрасная спектроскопия в гетерогенном кислотном катализе. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1992. 255 с.

7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека СО РАН [Электронный ресурс] / ГПНТБ СО РАН. – Электрон. дан. – ГПНТБ СО РАН, 2013. – URL: <http://www.spsl.nsc.ru/>
2. ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>
3. Электронно-библиотечная система Znanium.com [Электронный ресурс] /

Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012. – URL:
<http://znanium.com/>

8. Преподаватель

Автор: Харламова Тамара Сергеевна, к.х.н., доцент кафедры физической и коллоидной химии