МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе, качеству образования – первый проректор
_____ Хагуров Т.А.
подпись
«29» мая 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

ФТД.02 СОВРЕМЕННЫЙ КАТАЛИЗ И ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

Направление подготовки 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) Электрохимия

Программа подготовки академическая

Форма обучения очная

Квалификация выпускника магистр

Краснодар 2020

Рабочая программа дисциплины «Современный катализ и химическая кинетика» разработана в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования, утвержденным приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 N 655 по направлению подготовки 04.04.01 Химия (уровень магистратуры) и учебным планом основной образовательной программы по направлению подготовки 04.04.01 Химия, профиль Электрохимия.

Рабочую программу составила:

канд. хим. наук, доцент кафедры
физической химии Фалина И.В.



Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии протокол № 10 от «15» мая 2020 г.
Заведующий кафедрой физической химии
д -р хим. наук, профессор Заболоцкий В.И.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий протокол № 5 от «25» мая 2020 г.

Председатель УМК факультета Беспалов А.В.



Рецензенты:
Коншина Д.Н., канд. хим. наук, доцент кафедры аналитической химии ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет»

Павленко Е.А., инженер-технолог проблемной лаборатории по проведению работ по созданию новой и усовершенствованию производимой продукции на основе литий-ионных аккумуляторов и других источников тока, ПАО «Сатурн»

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель дисциплины

состоит в формирование у слушателей знаний по современном состоянии теоретических исследований в области гетерогенного катализа и практическим областям его применения.

1.2 Задачи дисциплины

- сформировать знания о современных теоретических аспектах гетерогенного катализа;
- формирование представлений о применении гетерогенного катализа для решения прикладных задач, в том числе в химической технологии;
- сформировать навыки расчёта параметров катализатора и навыки расчёта параметров катализатора и прогнозирования кинетических характеристик процесса на основании экспериментальных данных.

1.3 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Современный катализ и химическая кинетика» относится к блоку "Факультативы" учебного плана и является дисциплиной по выбору, не обязательной к освоению.

1.4 Требования к результатам освоения содержания дисциплины

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся профессиональной компетенции: способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии или смежных наук (ПК-1);

.

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знает	**умеет**	**владеет**
1.	ПК-1	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии или смежных наук	- Теоретические основы химической кинетики и катализа, требования к гетерогенным катализаторам; - Основные области практического применения гетерогенного катализа.	Выполнить расчет параметров катализатора и кинетических характеристик реакции на основании экспериментальных данных	Навыками прогнозирования кинетических характеристик процесса на основании экспериментальных данных

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 1 зач. ед. (36 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры (часы)
			2
Контактная работа, в том числе:		**16,2**	**16,2**
Аудиторные занятия (всего):		**16**	**16**
Занятия лекционного типа		16	16
Лабораторные занятия		-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		-	-
Иная контактная работа:		**0,2**	**0,2**
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2	0,2
Самостоятельная работа, в том числе:		**55,8**	**55,8**
Проработка теоретического материала		20	20
Выполнение расчетных заданий		20	20
Подготовка к промежуточной аттестации		15,8	15,8
Контроль:			
Общая трудоемкость	**час.**	**36**	**36**
	в том числе контактная работа	**16,2**	**16,2**
	зач. ед	**2**	**2**

2.2 Структура дисциплины

№	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1	2	3	4	5	6	7
1.	Введение в катализ	12	2	-	-	10
2.	Современные состояние теоретических исследований в области катализа	26	6	-	-	20
3.	Практика гетерогенного катализа	33,8	8	-	-	25,8
	Итого по разделам дисциплинам:	71,8	16			55,8
	Промежуточная аттестация (ИКР)	0,2				
	Общая трудоемкость по дисциплине	72				

2.3 Содержание разделов (тем) дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№	Наименование раздела (темы)	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Введение в катализ	Введение в катализ. Основные понятия	Выполнение расчетных заданий

2.	Современные состояние теоретических исследований в области катализа	Теория скоростей реакций Определение параметров катализаторов Реакционная способность поверхности	Выполнение расчетных заданий
3.	Практика гетерогенного катализа	Требования к эффективным катализаторам. Водород. Конверсия с водяным паром, реакции с синтез-газом. Получение метанола. Кинетика поверхностных реакций Переработка нефти и нефтехимия Каталитическая нейтрализация выхлопных газов	Выполнение расчетных заданий

2.3.2 Занятия семинарского типа

Занятие семинарского типа не предусмотрены учебным планом

2.3.3 Лабораторные занятия

Занятие лабораторного типа не предусмотрены учебным планом

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовые работы (проекты) учебным планом не предусмотрены

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1	Проработка теоретического материала	1. Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с. 2. Сибаров, Д. А. Катализ, каталитические процессы и реакторы [Электронный ресурс]: учебное пособие / Д.А. Сибаров, Д.А. Смирнова. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург: Лань, 2018. - 200 с. - https://e.lanbook.com/book/102250#book_name. 3. Стромберг, Армин Генрихович. Физическая химия [Текст] : учебник для студентов вузов / А. Н. Стромберг, Д. П. Семченко ; под ред. А. Г. Стромберга. - 3-е изд., испр. и доп. - М. : Высшая школа, 1999. - 527 с. - Библиогр.: с. 511 - 515. - ISBN 5060036278 : 40.00.
2	Выполнение расчетных задач	1. Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с.

		2. Сибаров, Д. А. Катализ, каталитические процессы и реакторы [Электронный ресурс]: учебное пособие / Д.А. Сибаров, Д.А. Смирнова. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург: Лань, 2018. - 200 с. - https://e.lanbook.com/book/102250#book_name. 3. Стромберг, Армин Генрихович. Физическая химия [Текст] : учебник для студентов вузов / А. Н. Стромберг, Д. П. Семченко ; под ред. А. Г. Стромберга. - 3-е изд., испр. и доп. - М. : Высшая школа, 1999. - 527 с. - Библиогр.: с. 511 - 515. - ISBN 5060036278 : 40.00.
3	Подготовка к промежуточной аттестации	1. Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с. 2. Сибаров, Д. А. Катализ, каталитические процессы и реакторы [Электронный ресурс]: учебное пособие / Д.А. Сибаров, Д.А. Смирнова. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург: Лань, 2018. - 200 с. - https://e.lanbook.com/book/102250#book_name. 3. Стромберг, Армин Генрихович. Физическая химия [Текст] : учебник для студентов вузов / А. Н. Стромберг, Д. П. Семченко ; под ред. А. Г. Стромберга. - 3-е изд., испр. и доп. - М. : Высшая школа, 1999. - 527 с. - Библиогр.: с. 511 - 515. - ISBN 5060036278 : 40.00.

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

– в печатной форме увеличенным шрифтом,

– в форме электронного документа,

Для лиц с нарушениями слуха:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа,

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии

Для формирования компетенций в процессе освоения курса используется технология профессионально-развивающего обучения, предусматривающая не только передачу теоретического материала, но и стимулирование познавательных действий студентов.

Создание в учебной деятельности проблемных ситуаций и организация активной самостоятельной деятельности обучающихся по их разрешению приводит к творческому овладению знаниями, умениями, навыками, развитию мыслительных способностей. Работа с электронными базами данных, подготовка рефератов и защита в форме доклада на семинаре, включающая ответы на вопросы и/или дискуссию, индивидуальных заданий, дискуссии по обсуждаемым вопросам.

Мультимедийные презентации по теме занятия. Доклады студентов с мультимедийной презентацией по рефератам. Дискуссии по теме занятия. Устный опрос.

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

4. Оценочные и методические материалы

4.1 Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль знаний осуществляется в виде проверки выполнения обучающимися индивидуальных расчетных заданий. Выполнения задания предполагает проработку теоретического материала по данной теме. Задания выдаются студентам поэтапно по мере изучения ими соответствующего раздела на лекционных занятиях. На выполнение задания отводится 2 недели, по прошествии которых студент сдает задание на проверку.

Примеры расчетных заданий по дисциплине:

Стационарное приближение

а) Сформулируйте стационарное приближение для следующей системы взаимосвязанных реакций

$R \rightarrow I_1 \rightarrow \ldots \rightarrow I_i \rightarrow \ldots \rightarrow I_n \rightarrow P$

и кратко обсудите, в каких случаях использование стационарного приближения является оправданным.

б) Кратко обсудите, в какой степени реакции, протекающие стационарно, близки к равновесию. Обсуждение проведите с использованием понятий энтропии и производства энтропии.

в) Реакции дегидрогенизации метилциклогексана $C_6H_{11}CH_3$ до толуола играет важную роль в производстве бензина. Эта реакция хорошо катализируется платиной по следующему механизму

$$C_6H_{11}CH_3 + {}^* \xrightarrow{K_1} C_6H_{11}CH_3{}^*$$

$$C_6H_{11}CH_3{}^* \xrightarrow{K_2} C_6H_5CH_3{}^* + 3H_2$$

$$C_6H_5CH_3{}^* \xrightarrow{K_3} C_6H_5CH_3 + {}^*.$$

Получите выражение для скорости образования толуола, предполагая, что реакция идет только в одном направлении и что степень заполнения поверхности толуолом много больше степени заполнения поверхности метилциклогексаном, а скорость полной реакции определяется скоростью десорбции толуола.

Профили потенциальной энергии

Энергия активации для реакции

$AB + C \rightarrow A + B - 50$ кДж/моль

в газовой фазе составляет большую величину ─ 500 кДж/моль. Использование катализатора позволяет существенно понизить энергию активации. Каталитическая реакция идет через диссоциацию молекул AB, адсорбированных на поверхности катализатора.

а) Нарисуйте профили потенциальной энергии каталитической и газофазной реакций на энергетической диаграмме с точным указанием ключевых значений энергии, используя для этой цели данные из приведенной ниже таблицы.

б) Укажите, какое соединение является наиболее устойчивым интермедиатом.

в) Укажите, какая ступень, скорее всего, является лимитирующей.

Адсорбирующийся атом или молекула	ΔH_{ads}, кДж/моль	Нет перевода	E_{act}, кДж/моль
AB	50	$AB + C \rightarrow A + BC$	500
C	75	$AB^* \rightarrow A^* + B^*$	75
A	200	$CB^* \rightarrow B^* + C^*$	100

B	125	–	–
BC	50	–	–

Изотермы адсорбции Ленгмюра

Получите изотермы адсорбции Ленгмюра для следующих случаев:

а) молекулярная адсорбция CO;

б) диссоциативная адсорбция CO;

в) конкурентная адсорбция молекулярно адсорбирующегося CO и диссоциативно адсорбирующегося H_2 (без возможных реакций);

г) предположим, что каталитическое образование метанола из CO и H_2 идет по механизму, в котором реакция между CO и первым атомом H определяет скорость процесса (обратными реакциями можно пренебречь), а все остальные стадии можно считать быстрыми, за исключением десорбции метанола, которую можно предполагать протекающей в равновесии с газовой фазой:

– предположите механизм реакции;

– получите выражение для скорости реакции;

– определите диапазон изменения порядков реакции по водороду, монооксиду углерода и метанолу в предположении, что водород адсорбируется наиболее легко в сравнении с другими газами.

Синтез метанола

Последние исследования по каталитическому синтезу метанола из CO_2 и H_2 с использованием медного катализатора показали, что эта реакция имеет первый порядок по CO_2, а ее порядок по H_2 равен 3/2

$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$.

Предполагается, что механизм реакции включает диссоциацию молекул водорода, котрый затем реагирует с CO_2 с образованием формилата, который остается адсорбированным на поверхности. Адсорбированный формилат затем гидрируется с образование остающихся адсорбированными диоксометилена, метокси и, наконец, метанола, который затем десорбируется. Синтез идет в условиях, при которых поверхность остается практически свободной, а образующийся в процессе кислород быстро удаляется в форме воды. Рассматривается только скорость прямой реакции, а сам процесс, как полагают, идет по следующим элементарным ступеням:

1. $H_2 + 2^* \leftrightarrow 2H^*$,
2. $CO_2 + {}^* \leftrightarrow CO_2{}^*$,
3. $CO_2{}^* + H \leftrightarrow HCOO^* + {}^*$,
4. $HCOO^* + H^* \leftrightarrow H_2COO^* + {}^*$,
5. $H_2COO^* + H^* \leftrightarrow H_3CO^* + O^*$,
6. $H_3CO^* + H^* \leftrightarrow H_3COH^* + {}^*$,
7. $H_3COH^* \leftrightarrow H_3COH + {}^*$.

1. Допишите последнюю реакцию, по которой удаляется кислород.

2. Определите, какая из ступеней, скорее всего, лимитирует процесс, если это простая модель объясняет наблюдаемые порядки реакций по реагентам.

3. Получите выражение для скорости реакции, приняв, что на лимитирующей стадии идет только прямая реакция, а все остальные реакции находятся в равновесии.

4. При какой мольной доле H_2 скорость реакции имеет максимальное значение?

Реакция гидрообессеривания

Гидрообессеривание – очень важный крупномасштабный процесс, использующийся для удаления серы из продуктов переработки нефти. В действительности это – крупнейший каталитический процесс. В качестве модели этого процесса мы рассмотрим гидрообессеривание тиофена, модельного серусодержащего продукта переработки нефти.

В качестве катализатора возьмем CoMo-сульфид на носителе из оксида алюминия. Полная реакция выглядит так:

$C_4H_4S + 2H_2 \leftrightarrow C_4H_6 + H_2S$,

где продуктами являются бутадиен и сероводород. Наиболее важный интермедиат образуется, когда тиофеновое кольцо разрывается и интермедиат адсорбируется на поверхности в форме

$H_2C = CH - CH = CH - S -^*$.

Измеренная скорость реакции подчиняется уравнению

$$r = \frac{kp_T}{1 + K_1 p_T} \frac{(K_2 p_{H_2})^\alpha}{1 + (K_2 p_{H_2})^\alpha},$$

где p_T – парциальное давление тиофена; p_{H_2} – парциальное давление водорода.

1. Почему, как кажется на первый взгляд, скорость обратной реакции пропущена в предложенной кинетике?

2. Предложите механизм реакции, в котором бы присутствовал указанный интермедиат, и получите выражение для скорости реакции с учетом обратной реакции. Подсказка: примите, что водород и тиофен адсорбируются на разных центрах.

3. Покажите, что полученное вами выражение для скорости реакции сводится к написанному выше, когда процесс идет при избытке водорода.

4. Какой компонент является НИИР для данной реакции?

Скорость реакции имеет характерную зависимость концентрации водорода. Почему из этой зависимости вытекает предположение об адсорбции S^* и H^* на разных центрах?

Катализаторы синтеза аммиака

Катализатор синтеза аммиака был получен восстановлением магнетита (Fe_3O_4), в котором растворено 3 вес. % Al_2O_3. Восстановление проведено в таких условиях, что частицы магнетита свой размер не изменяли. Восстановлению подвергалось только железо до чистого Fe, а с Al_2O_3 ничего не происходило.

1) Объясните это явление.

2) Оцените объем пор в 1 г катализатора (или относительный объем пор в %), образующихся при восстановлении, используя следующие данные: молярный вес M_{WFe}=55,85 г/моль, p_{Fe2O3}= 5,18 г/см^3, p_{Fe} = 7,86 г/см^3, p_{Al2O3} = 3,97 г/см^3.

3) Поверхностные энергии различных граней железа следуют соотношениям $\gamma_{Fe(100)} < \gamma_{Fe(110)} < \gamma_{Fe(111)}$. Обсудите эти соотношения и вытекающие из них следствия для поверхности восстановленного железа. Ниже мы примем, что восстановленное железо имеет в основном грани Fe(100) (оправдано ли это предположение?).

4) Как установлено методом БЭТ по изотермам адсорбции N_2, восстановленный магнетит с добавками оксида алюминия имеет удельную поверхность 29 м^2 на грамм катализатора. Было также найдено, что при диссоциативной адсорбции N_2 на грамм катализатора садится 2,2 мл N_2 (стандартные условия, т.е. температура равна 273 К, давление – 1 бар (=100000 Па)). Определите удельную (на грамм) площадь поверхности катализатора, приняв, что атомарный азот формирует на поверхности Fe(100) структуру с(2×2).

5) Чем различаются эта площадь поверхности и площадь, определенная методом БЭТ?

Коэффициент прилипания метана на поверхности Ni(100)

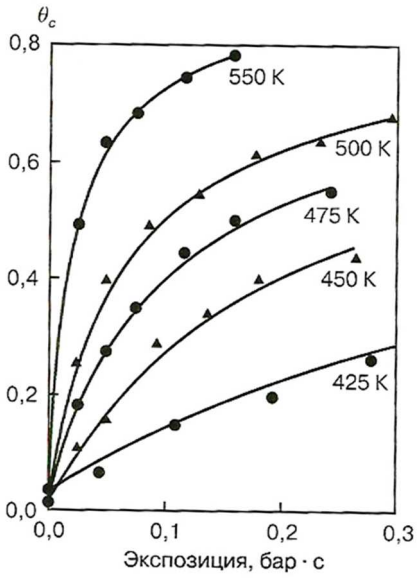
На приведенном рисунке показана степень захвата углерода на поверхности Ni(100) , выдержанной в атмосфере метана при различных температурах. Метан диссоциирует на поверхности, в результате чего водород отделяется и поверхность покрывается слоем углерода. Схема реакции имеет вид:

1. $CH_4 + 2^* \rightarrow CH_3^* + H^*$,

2. $CH_3^* + {}^* \rightarrow CH_2^* + H^*$,

3. и т.д.,

где первая ступень является лимитирующей.



1. Определите число активных центров на поверхности Ni(100), приняв r_{Ni} = 8, 90 г/см^3, молярный вес равным M_W = 58,71 г/см^3 и считая, что каждый атом Ni представляет собой центр; Ni – металл с ГЦК-решеткой.

2. Определите абсолютное значение коэффициента прилипания при различных температурах.

3. Определите кажущуюся энергию активации для процесса аккомодации. В экспериментах для обеспечения экспозиции в 0,2 бар/с необходима выдержка образца в течение 152 с. Определите, каково было давление метана (в Тор) в этих экспериментах.

Окисление водорода на Pt

Синтез воды из H_2 и O_2 на поверхности платины, как полагают, идет со следующими стадиями:

1. $H_2 + 2^* \leftrightarrow 2H^*$,
2. $O_2 + 2^* \leftrightarrow 2O^*$,
3. $O^* + H^* \leftrightarrow HO^* + {}^*$,
4. $HO^* + H^* \leftrightarrow H_2O^* + {}^*$,
5. $H_2O^* \leftrightarrow H_2O + {}^*$.

а) Можете ли вы предложить другие элементарные стадии, которые могли бы быть учтены в синтезе воды?

б) Ниже мы будем рассматривать только пять вышеприведенных стадий и примем, что реакции стадии 1, 2, 4 и 5 идут в условиях квазиравновесия. Напишите выражение для скорости лимитирующей стадии (3), содержащее выражения для скорости прямой и обратной реакций. Это выражение должно содержать только степени покрытия поверхности для соединений, входящих в уравнение (3).

в) Покажите, что эту скорость можно также представить в виде

$$r = k_3 + \sqrt{K_1 K_2 p_{H_2} p_{O_2}}\left(1 - \frac{p_{H_2O}}{K_G p_{H_2} \sqrt{p_{O_2}}}\right)\theta_*^{\ 2}$$

и выразите K_G через константы равновесия.

г) Мы теперь примем, что кислород является наиболее избыточным интермедиатом реакции (НИИР). Найдите Θ_* в этих условиях.

д) Принимая, что кислород является НИИР, определите порядки реакции по H_2, O_2 и H_2O в условиях, далеких от равновесия.

е) Перейдем к другому предельному случаю, когда в условиях реакции степень покрытия поверхности кислородом очень мала. Определите, для какого состава смеси газов H_2 и O_2 скорость реакции будет максимальной в условиях, далеких от равновесия.

Катализатор получен пропиткой Al2O3 раствором соли Pt и последующими сушкой и восстановлением металла. Активность одного грамма катализатора определена в трубчатом реакторе в условиях, когда кислород является НИИР, а активность катализатора очень высока. Установлено, что скорость реакции увеличивается с температурой, но линейной зависимости в аррениусовских координатах между ln (r) и 1/T не наблюдается.

ж) Дайте, по крайней мере, одно качественное объяснение наблюдаемому отклонению от линейной зависимости ln (r) от 1/T.

Каталитическое дожигание выхлопных газов

Ниже мы проанализируем модель каталитической нейтрализации CO и NO в выхлопных газах автомобилей, при которой образуются более безопасные для окружающей среды CO_2 и N_2. Реакцию можно разбить на следующие элементарные стадии, которые все, за исключением второй стадии, являющейся лимитирующей, идут в условиях квазиравновесия:

1. $NO + {}^* \leftrightarrow NO^*$
2. $NO^* + {}^* \rightarrow O^* + N^*$,
3. $CO + {}^* \leftrightarrow CO^*$,
4. $CO^* + O^* \leftrightarrow CO_2{}^* + {}^*$,
5. $CO_2{}^* \leftrightarrow CO_2 + {}^*$,
6. $N^* + N^* \leftrightarrow N_2{}^* + {}^*$,
7. $N_2{}^* \leftrightarrow N_2 + {}^*$.

а) Запишите полную реакцию и выразите константу равновесия K_G через парциальные давления участвующих в реакции газов.

б) Можете ли вы привести еще хотя бы одну элементарную стадию, которая была бы уместна для данного процесса?

в) Покажите, что при использовании вышеприведенных допущений скорость реакции может быть записана в виде:

$$r = k_2{}^+K_1 p_{NO}\theta_*{}^2\left(1-\frac{1}{K_G}\frac{\sqrt{p_{N_1}}}{p_{NO}}\frac{p_{CO_2}}{p_{CO}}\right).$$

г) Выразите K_G через $k_1 - k_7$.

Ниже мы примем, что адсорбированный кислород является наиболее избыточным интермедиатом реакции (НИИР), то есть $\Theta_* \cong 1 - \Theta_O$.

д) Выразите Θ_* только через константы равновесия и парциальные давления.

е) Принимая, что кислород является НИИР, определите порядки реакции для всех участвующих в ней газов, то есть найдите n_{NO}, n_{CO}, n^{N_2} и n^{CO_2}.

Пусть энергия активации была измерена в условиях почти чистой поверхности, то есть

$\Theta_* \cong 1$.

ж) Получите аналитическое выражение для кажущейся энергии активации в этих условиях, выразив ее через энергию активации лимитирующей стадии и изменение энтальпии в квазиравновесных стадиях.

Методические рекомендации определяющие процедуре оценивания самостоятельного решения комплексных расчетных задач

Форма проведения – письменно + собеседование.

Продолжительность – 10 минут.

Комплексная расчетная задача включает теоретические вопросы, вывод формул в общем виде, прогнозирование поведения системы и выявление закономерностей на основании полученных формул и уравнений. Студенты самостоятельно решают комплексную задачу во внеаудиторное время. В срок, обозначенный преподавателем, обучающийся сдает решение задачи в письменном виде и в ходе устной беседы. В ходе устной беседы с преподавателем студент должен продемонстрировать знание теоретических законов, которые лежат в основе описываемых явлений, обосновать использованные для решения методы и сделанные выводы, кроме того преподаватель опрашивает студента на предмет выявления знания основных положений раздели дисциплины.

Критерии оценки:

- оценка «зачтено» решено не менее 70% задачи, студент владеет теоретическими знаниями по данному разделу, может обосновать выбранные методы к решению задачи и сделанные выводы, допускает незначительные ошибки.

- оценка «не зачтено» решено менее 70% задачи студент допускает существенные ошибки по материалу раздела, не владеет терминологией в рамках дисциплины; не может объяснить решение, обосновать выбранные методы и сделанные выводы.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.
– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;
– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;
– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:
Для лиц с нарушениями зрения:
– в печатной форме увеличенным шрифтом,
– в форме электронного документа.
Для лиц с нарушениями слуха:
– в печатной форме,
– в форме электронного документа.
Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
– в печатной форме,
– в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

Структура оценочных средств для текущей и промежуточной аттестации

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины*	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства	
			Текущий контроль	Промежуточная аттестация
1	Введение в катализ	ПК-1	*Выполнение расчетных заданий*	*Вопросы к зачету 1-3*
2	Современные состояние теоретических исследований в области катализа	ПК-1	*Выполнение расчетных заданий*	*Вопросы к зачету 4-7*
3	Практика гетерогенного катализа	ПК-1	*Выполнение расчетных заданий*	*Вопросы к зачету 8-15*

Показатели, критерии и шкала оценки сформированных компетенций

Код и наименование компетенций	Соответствие уровней освоения компетенции планируемым результатам обучения и критериям их оценивания		
	пороговый	**базовый**	**продвинутый**
	Оценка		
	Удовлетворительно / зачтено	Хорошо / зачтено	Отлично / зачтено
	Имеет *обрывочные знания* в области теоретических основ катализа, требований к гетерогенным катализаторам и практических областей применения гетерогенного катализа, а также в области практического применения гетерогенного катализа	*Знает с некоторыми пробелами* теоретические основы катализа, требования к гетерогенным катализаторам и практические области применения гетерогенного катализа, а также в области практического применения гетерогенного катализа	Имеет *полные и глубокие знания* в области теоретических основ катализа, требований к гетерогенным катализаторам и практических областей применения гетерогенного катализа, а также в области практического применения гетерогенного катализа;
	Умеет рассчитывать *основные* параметры катализатора и кинетических характеристик реакции на основании экспериментальных данных, но допускает существенные ошибки;	*Умеет* определять параметры катализатора и кинетических характеристик реакции на основании экспериментальных данных с погрешностями и небольшими ошибками;	*Умеет* определять параметры катализатора и кинетических характеристик реакции на основании экспериментальных данных;
	Владеет основными методами прогнозирования кинетических характеристик процесса на основании экспериментальных данных, но только с указаниями преподавателя по выбору метода и по его реализации	*Владеет* основными методами прогнозирования кинетических характеристик процесса на основании экспериментальных данных, но только с указаниями преподавателя по выбору метода или по его реализации	*Владеет* основными методами прогнозирования кинетических характеристик процесса на основании экспериментальных данных, включая их самостоятельный выбор

Зачтено-экзаменационные материалы для промежуточной аттестации (экзамен/зачет)

Вопросы для подготовки к зачету

1. 1. Поясните общие черты и различия гомогенного и гетерогенного катализа.
2. Объясните понятия атомарной эффективности и дружественной окружающей среде.
3. Зависит ли порядок каталитической реакции от давления и температуры?

4. Дайте вывод изотермы адсорбции Ленгмюра для молекулярной адсорбции CO на поверхности металла с адсорбционными центрами одного типа. Проделайте то же самое для диссоциативной адсорбции H_2.
5. Кинетика каких промышленных процессов может быть описана в стационарном приближении?
6. Сформулируйте основные требования, предъявляемые к твердым катализаторам, используемым в промышленности.
7. Можете ли привести пример, в которых скорость полного каталитического процесса контролируется переносом реагентов вне каталитических частиц?
8. Дайте несколько примеров производств синтез-газа, а также областей его практического применения.
9. Объясните, как электронные промотеры облегчают диссоциацию молекул N_2 типа?
10. Как работают топливные элементы? Объясните роль катализатора в технологии топливных элементов.
11. В зависимости от выбора катализатора, процесс гидрообессеривания сопровождается разной степени гидрированием. В каком из потоков продуктов на нефтеперерабатывающем заводе вы бы осуществляли гидрообессеривание, сопровождаемое гидрированием, а в каком – нет?
12. Дайте краткое описание процесса крекинга в псевдоожиженном каталитическом слое.
13. Почему для нейтрализации выхлопных газов используют металлические катализаторы и какие реакции они катализируют?
14. Как можно уменьшить выбросы оксидов серы от тепловых электростанций?
15. Опишите процесс селективного каталитического восстановления, использующийся для удаления NO_x из дыма стационарных тепловых станций. Какие реагенты обычно используются в процессе селективного каталитического восстановления?

4.2 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Методические рекомендации определяющие процедуры оценивания на зачете

Студенты обязаны сдать зачет в соответствии с расписанием и учебным планом. Зачет является формой контроля усвоения студентом учебной программы по дисциплине или ее части, выполнения практических, контрольных, реферативных работ.

Результат сдачи зачета по прослушанному курсу должны оцениваться как итог деятельности студента в семестре, а именно - по посещаемости лекций, результатам работы на лабораторных занятиях, выполнения самостоятельной работы и положительных результатах текущего контроля. При этом допускается на очной форме обучения пропуск не более 20% занятий, с обязательной отработкой пропущенных лабораторных работ. Студенты, у которых количество пропусков, превышает установленную норму, не выполнившие все виды работ и неудовлетворительно работавшие в течение семестра, проходят собеседование с преподавателем, который опрашивает студента на предмет выявления знания основных положений дисциплины.

Критерии оценки:

- оценка «зачтено»: студент владеет теоретическими знаниями по данному разделу, знает основные физико-химические характеристики материалов и методы их измерения, допускает незначительные ошибки; студент умеет правильно объяснять материал, иллюстрируя его примерами.

- оценка «не зачтено»: материал не усвоен или усвоен частично, студент затрудняется привести примеры, довольно ограниченный объем знаний программного материала.

5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для

освоения дисциплины (модуля)

5.1 Основная литература:

1. Сибаров, Д. А. Катализ, каталитические процессы и реакторы [Электронный ресурс]: учебное пособие / Д.А. Сибаров, Д.А. Смирнова. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург: Лань, 2018. - 200 с. - https://e.lanbook.com/book/102250#book_name.

5.2 Дополнительная литература

1. Стромберг, Армин Генрихович. Физическая химия [Текст] : учебник для студентов вузов / А. Н. Стромберг, Д. П. Семченко ; под ред. А. Г. Стромберга. - 3-е изд., испр. и доп. - М. : Высшая школа, 1999. - 527 с. - Библиогр.: с. 511 - 515. - ISBN 5060036278 : 40.00.

Для освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья имеются издания в электронном виде в электронно-библиотечных системах «Лань» и «Юрайт».

5.3 Периодические издания

1. В мире науки.
2. Журнал прикладной химии.
3. Журнал физической химии.
4. Коллоидный журнал.

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Лекции Успешное освоение дисциплины предполагает активное, творческое участие студента путем планомерной, повседневной работы.

Общие рекомендации

Изучение дисциплины следует начинать с проработки рабочей программы, особое внимание, уделяя целям и задачам, структуре и содержанию курса.

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к лабораторным занятиям;
- работу с Интернет - источниками;
- подготовка к зачету/экзамену.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, полученный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, приведенных в рабочей программе дисциплины.

Работа с конспектом лекций

Просмотрите конспект сразу после занятий, отметьте материал конспекта лекций, который вызывает затруднения для понимания. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции. Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.

Лекции являются одним из основных методов обучения по дисциплине, которые должны решать следующие задачи:

- изложить важнейший материал программы курса, освещающий основные моменты;

– развить у студентов потребность к самостоятельной работе над учебной и научной литературой.

Главной задачей каждой лекции является раскрытие сущности темы и анализ ее главных положений. Рекомендуется на первой лекции довести до внимания студентов структуру курса и его разделы, а в дальнейшем указывать начало каждого раздела, суть и его задачи, а, закончив изложение, подводить итог по этому разделу, чтобы связать его со следующим.

Содержание лекций

Содержание лекций определяется рабочей программой курса. Необходимо, чтобы каждая лекция охватывала и исчерпывала определенную тему курса и представляла собой логически вполне законченную работу. Лучше сократить тему, но не допускать перерыва ее в таком месте, когда основная идея еще полностью не раскрыта.

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

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

7.1 Перечень информационно-телекоммуникационных технологий

-

7.2 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint)

7.3 Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

1. http://elibrary.ru/ Научная электронная библиотека
2. www.scopus.com - Scopus (SciVerse Scopus) мультидисциплинарная библиографическая и реферативная база данных, созданная издательской корпорацией Elsevier.
3. Справочно-правовая система «Консультант Плюс» (http://www.consultant.ru)
4. http://cyberleninka.ru/about – Научная библиотека открытого доступа «КиберЛенинка»
5. http://www.sciencedirect.com – полнотекстовая научная база данных международного издательства Elsevier.
6. http://apps.webofknowledge.com/ - мультидисциплинарная реферативно-библиографическая база данных Института научной информации США (Institute for Scientific Information, ISI), представленная на платформе Web of Knowledge компании Thompson Reuters.

8. Материально-техническое обеспечение по дисциплине (модулю)

№	Вид работ	Наименование учебной аудитории, ее оснащенность оборудованием и техническими средствами обучения
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория, укомплектованная учебной мебелью, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) и соответствующим программным обеспечением (ПО), (ауд. 435С, 332С, 322С, 234С,

		422С, 425С, 416С, 126С)
2.	Групповые (индивидуальные) консультации	Учебная аудитория, укомплектованная учебной мебелью (332С, 334С, 126С, 425С, 422С)
3.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Учебная аудитория, укомплектованная учебной мебелью (332С, 334С, 126С, 425С, 422С)
4.	Самостоятельная работа	Кабинет для самостоятельной работы, укомплектованный учебной мебелью, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета. ауд. 400, 401, 329, корп. С (улица Ставропольская, 149)