

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна»
(СПбГУПТД)

УТВЕРЖДАЮ
Директор ВШТЭ



Рабочая программа дисциплины

Б1.В.ДВ.02.02 Катализ в технологии получения органических веществ

Учебный план: _____ ФГОС3++b180301.12-1234_26-14.plx

Кафедра: Органической химии

Направление подготовки:
(специальность) 18.03.01 Химическая технология

Профиль подготовки:
(специализация) Химическая технология органических веществ

Уровень образования: бакалавриат

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоём- кость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Лекции	Лаб. занятия				
6	УП	17	34	56,75	0,25	3	Зачет
	РПД	17	34	56,75	0,25	3	
Итого	УП	17	34	56,75	0,25	3	
	РПД	17	34	56,75	0,25	3	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология, утверждённым приказом Минобрнауки России от 07.08.2020 г. № 922

Составитель (и):

Кандидат химических наук, доцент

Курзин А.В.

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой органической химии

Тришин Ю.Г.

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Тришин Ю.Г.

Методический отдел:

Фахретдинова А. Р.

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: Сформировать компетенции обучающегося в области каталитических явлений, протекающих в процессах химической технологии продуктов тонкого органического синтеза.

1.2 Задачи дисциплины:

- Сформировать прочные знания о типах и видах катализа, свойствах, строении и применении различных катализаторов, о связи активности и селективности катализатора с его составом и строением.
- Рассмотреть важнейшие концепции катализа в органической химии, классификации катализаторов по принципу их действия на органические субстраты, механизмы основных гомогенно- и гетерогенно-каталитических реакций и процессов.
- Привить студентам практические навыки применения каталитических систем и исследования свойств катализаторов.

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ПК-2: Способен подготавливать данные и составлять обзоры, отчеты, заявки на изобретения и научные публикации по выполненному заданию с учетом защиты объектов интеллектуальной собственности и коммерческой тайны предприятия
Знать: основные виды и типы катализа, механизмы формирования каталитических систем и основных каталитических реакции; современные методы теоретического и экспериментального исследования в различных разделах химии, методами определения состава, структуры вещества, механизма химических процессов, их теоретические основы, возможности и границы применимости; основные технологические процессы с участием катализаторов.
Уметь: описывать активность каталитических систем в терминах квантово-химической концепции; применять полученные знания при выборе катализатора для конкретных химических процессов; выбрать метод исследования для заданной научной и технологической задачи, спланировать и провести экспериментальное исследование, провести интерпретацию результатов исследования.
Владеть: методами и алгоритмами оптимизации, а также соответствующими пакетами прикладных программ для оптимизации задач исследования, проектирования и управления химическими производствами; навыками проведения исследований с помощью современных физических и физико-химических методов.
ПК-10: Способен подготавливать документацию для выбора и обоснования научно-технических и организационных решений по производству и качеству продукции на основе оценки производственных ресурсов и экономического анализа
Знать: основные физические законы, явления и процессы, на которых основаны принципы работы приборов и устройств в области катализа органических соединений; основные направления практического и безопасного использования катализаторов
Уметь: применять полученные знания об использовании катализаторов в практической деятельности в качестве специалиста в области химии и технологии тонкого органического синтеза; использовать для решения прикладных задач соответствующий физико-математический аппарат.
Владеть: методами физико-математического анализа для решения естественнонаучных задач, решения типовых задач.

3 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Лаб. (часы)		
Раздел 1. Феноменология катализа	6				С,КПр,Л
Тема 1. Феноменология каталитических явлений Внешние проявления каталитических эффектов в области стехиометрии и механизма, энергетических эффектов и характеристик, кинетике химических превращений. Условия проявления каталитических эффектов. Ограничения явления катализа.		2		7,75	
Тема 2. Методы описания каталитических реакций Схемы каталитических реакций. Каталитические циклы. Каталитическая активность и способы ее количественного выражения. Методы измерения активности. Методы глобального описания: оператор эволюции и релаксационное уравнение. Спектр релаксации. Элементарные релаксаторы.		1		7	
Тема 3. Теоретические модели катализа 1. Локальный и глобальный подходы. Локальные и глобальные подходы к задаче описания каталитических явлений. Сравнительный анализ их особенностей, преимуществ и недостатков. 2. Химические теории катализа. Химическое взаимодействие "субстрат – катализатор", его особенности. Активные центры катализатора, их типы и строение. Каталитические комплексы, их типы, особенности химических связей в каталитических комплексах. Принципы соответствия: электронного, энергетического и геометрического. 3. Физические теории катализа. Энергетическое взаимодействие "субстрат – катализатор". Деформационный и резонансный типы каталитического действия. Проблема энергетической регенерации катализатора. Рекуперация энергии в каталитических реакциях. 4. Квантово-механическая точка зрения на катализ. Адиабатические и не-адиабатические процессы. Разрешенные и запрещенные элементарные химические акты. Правила отбора в синхронных реакциях (симметрия и законы сохранения). Методы снятия запретов. 5. Катализ как релаксационное явление. Релаксация неравновесных систем. Динамические режимы и переходы между ними: критический характер, влияние внешних и внутренних факторов. 6. Теория катализаторов. Корреляции каталитических свойств веществ с их химическим составом и строением. Методы рационального подбора катализаторов. Лабораторная работа №1. Дегидрирование и гидрирование органических веществ		2	7	7	

Раздел 2. Виды катализа				
Тема 4. Гомогенный катализ 1. Основные особенности гомогенного катализа. Гомогенные каталитические системы. Гомогенные катализаторы, их типы и строение. Молекулярный характер гомогенных катализаторов. 2. Газофазный гомогенный катализ. Газообразные системы и каталитические реакции. Примеры газофазного катализа. Механизм каталитического действия. 3. Жидкофазный гомогенный катализ. а) Кислотно-основный катализ в растворах. Катализаторы, природа каталитического действия. Типы химических реакций. Примеры каталитических процессов. б) Металлокомплексный катализ. Комплексы переходных металлов (КПМ), особенности их состава и строения. Стадии каталитического процесса с участием КПМ, каталитические циклы. Принципы соответствия в металлокомплексном катализе. Примеры реакций: гидрирование, изомеризация, окисление, гидроформилирование. в) Гетерогенный металлокомплексный катализ. Гетерогенизация КПМ на твердых носителях. Способы гетерогенизации. Основные особенности строения и каталитического действия гетерогенизированных КПМ. Лабораторная работа №2. Катализаторы реакции этерификации				
	3	5	7	Л,О

Тема 5. Гетерогенный катализ 1. Основные особенности гетерогенных каталитических систем. Многофазность и наличие межфазных границ. Градиенты концентрации и температуры, процессы переноса вещества и энергии. 2. Типы гетерогенных катализаторов, их особенности. а) Химический состав — металлы и сплавы, бинарные соединения, сложные соединения, смеси и композиции. б) Физическое строение — тип каркаса или решетки, пористость, величина, строение и текстура поверхности, дефекты состава и структуры. в) Геометрия — межатомные расстояния, тип кристаллической ячейки, размеры и форма кристаллитов, зерен, пор, глобул. г) Электронно-энергетические характеристики — проводники, полупроводники и изоляторы, энергия выхода электронов, теплопроводность, поверхностная энергия, наличие неравновесных и метастабильных структур. 3. Методы приготовления гетерогенных катализаторов. Химический синтез, введение добавок (промоторы, сокатализаторы, протекторы), формирование физической структуры, тренировка. Эволюция гетерогенных катализаторов в ходе реакции: явления отравления и разработки, их причины, методы стабилизации и регенерации гетерогенных катализаторов. 4. Основные стадии гетерогенно-каталитической реакции. а) Диффузия. Типы диффузии. Кинетические области и кривая Зельдовича. Переходы между кинетическими и диффузионными областями. б) Адсорбция. Адсорбционно-десорбционное равновесие, его параметры (адсорбционные коэффициенты, теплота адсорбции и др.). Физическая и химическая адсорбция. Конкурентная адсорбция. Адсорбированное состояние вещества и его реакционная способность. в) Химические превращения на поверхности. Латеральная диффузия и столкновения. Типы кинетических механизмов на поверхности. Ударные механизмы. г) Принципы соответствия в гетерогенном катализе. 5. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Статические и проточные установки. Особенности кинетики в статических установках, учет перемешивания. Особенности кинетики в проточных системах. Кинетические режимы. Стационарные и нестационарные режимы, автоколебания. Лабораторная работа №3. Каталитическое окисление Лабораторная работа №4. Катализаторы поликонденсации		3	10	7	
--	--	---	----	---	--

Тема 6. Ферментативный, мицеллярный и межфазный катализ 1. Ферментативный катализ. Строение молекул фермента. Особенности взаимодействия в каталитическом комплексе "субстрат — фермент". Основные особенности кинетики ферментативных реакций. Иммунизация ферментов. 2. Мицеллярный катализ. Поверхностно-активные вещества. Мицеллообразование в водных и органических средах. Распределение реагентов в мицеллярном растворе. Природа каталитического эффекта. Области применения мицеллярного катализа. 3. Межфазный катализ. Особенности химических реакций в многофазных системах. Процессы переноса через поверхности раздела фаз. Катализаторы-переносчики, механизм их действия.		2		7	
Раздел 3. Методы описания и исследования катализаторов					
Тема 7. Методы описания катализаторов Избирательность и специфичность катализаторов, их типы и методы количественного выражения. Селективность каталитических реакций и селективность катализаторов, их типы и методы количественного выражения. Лабораторная работа №5. Получение сиккативов Лабораторная работа №6. Ферментативный катализ		2	12	7	
Тема 8. Методы исследования катализаторов а) Химический анализ молекулярных и каркасных катализаторов. б) Исследование поверхности гетерогенных катализаторов: измерение площади поверхности, измерение поровой структуры, определение кислотно-основных свойств поверхности, определение окислительно-восстановительных свойств поверхности. в) Инструментальные методы исследования гетерогенных катализаторов: ИК- и УФ-спектроскопия, рентгеновская спектроскопия, фотоэлектронная спектроскопия, электронно-микроскопические методы.		2		7	Л,О
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		17	34	56,75	
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)		0,25			
Всего контактная работа и СР по дисциплине		51,25		56,75	

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5 БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ

Использование балльно-рейтинговой системы не предусмотрено.

6. ОПИСАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ, КРИТЕРИЕВ, СИСТЕМЫ И СРЕДСТВ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

6.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения
ПК-2	1. Перечисляет основные виды и типы катализа, имеет представление о механизмах формирования каталитических систем и основных каталитических реакции; современных методах теоретического и экспериментального исследования в различных разделах химии, методах определения состава, структуры вещества, механизма химических процессов, их теоретические основы. 2. Описывает активность каталитических систем; применяет полученные знания при выборе катализатора для конкретных химических процессов, правильно интерпретирует результаты. 3. Демонстрирует способность владения методами и алгоритмами оптимизации, а также соответствующими пакетами прикладных программ для оптимизации задач исследования, проектирования и управления химическими производствами.
ПК-10	1. Имеет представление о основных физических законах, явлениях и процессах, на которых основаны принципы работы приборов и устройств в области катализа органических соединений; знает основные направления практического и безопасного использования катализаторов 2. Успешно применяет полученные знания об использовании катализаторов в практической деятельности при решении задач, касающихся области химии и технологии тонкого органического синтеза; использует для решения прикладных задач соответствующий физико-математические законы 3. Выполняет алгоритм физико-математического анализа для решения естественнонаучных задач, решения типовых задач.

6.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	Обучающийся твердо знает программный материал, грамотно и по существу излагает его, не допускает существенных неточностей в ответе на вопросы, способен правильно применить основные методы и инструменты при решении практических задач, владеет необходимыми навыками и приемами их выполнения.	Письменное задание выполнено правильно и аккуратно, выводы логичны и последовательны.
Не зачтено	Обучающийся не может изложить значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, допускает неточности в формулировках и доказательствах, нарушения в последовательности изложения программного материала; неуверенно, с большими затруднениями выполняет практические задания.	Практическое задание не выполнено либо содержит грубые ошибки.

6.3 Типовые контрольные задания и/или иные материалы, используемые для оценки результатов обучения

6.3.1 Типовые контрольные вопросы

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 6	
1	Феноменология каталитических явлений. Условия проявления каталитических эффектов. Ограничения явления катализа.
2	Локальные и глобальные подходы к задаче описания каталитических явлений. Сравнительный анализ их особенностей, преимуществ и недостатков.
3	Химические теории катализа. Химическое взаимодействие "субстрат – катализатор", его особенности.
4	Активные центры катализатора, их типы и строение.
5	Каталитические комплексы, их типы, особенности химических связей в каталитических комплексах. Принципы соответствия: электронного, энергетического и геометрического.

6	Физические теории катализа. Энергетическое взаимодействие "субстрат – катализатор". Деформационный и резонансный типы каталитического действия.
7	Проблема энергетической регенерации катализатора. Рекуперация энергии в каталитических реакциях
8	Квантово-механическая точка зрения на катализ. Адиабатические и неадиабатические процессы. Разрешенные и запрещенные элементарные химические акты.
9	Правила отбора в синхронных реакциях (симметрия и законы сохранения). Методы снятия запретов.
10	Катализ как релаксационное явление. Релаксация неравновесных систем. Динамические режимы и переходы между ними: критический характер, влияние внешних и внутренних факторов.
11	Теория катализаторов. Корреляции каталитических свойств веществ с их химическим составом и строением.
12	Методы подбора катализаторов.
13	Схемы каталитических реакций. Каталитические циклы.
14	Каталитическая активность, способы ее количественного выражения, методы измерения.
15	Избирательность и специфичность катализаторов, их типы и методы количественного выражения.
16	Селективность каталитических реакций и селективность катализаторов, их типы и методы количественного выражения.
17	Основные особенности гомогенного катализа. Гомогенные каталитические системы.
18	Гомогенные катализаторы, их типы и строение. Молекулярный характер гомогенных катализаторов.
19	Кислотно-основный катализ в растворах. Катализаторы, природа каталитического действия. Типы химических реакций. Примеры каталитических процессов.
20	Металлокомплексный катализ. Комплексы переходных металлов, особенности их состава и строения.
21	Стадии каталитического процесса с участием КПМ, каталитические циклы.
22	Принципы соответствия в металлокомплексном катализе. Примеры реакций: гидрирование, изомеризация, окисление, гидроформилирование
23	Гетерогенный металлокомплексный катализ. Гетерогенизация КПМ на твердых носителях.
24	Способы гетерогенизации. Основные особенности строения и каталитического действия гетерогенизированных КПМ.
25	Основные особенности гетерогенных каталитических систем. Многофазность и наличие межфазных границ. Градиенты концентрации и температуры, процессы переноса вещества и энергии.
26	Типы гетерогенных катализаторов, их особенности: химический состав, физическое строение, геометрия, электронно-энергетические характеристики.
27	Методы приготовления гетерогенных катализаторов. Химический синтез, введение добавок (промоторы, сокатализаторы, протекторы), формирование физической структуры, тренировка.
28	Эволюция гетерогенных катализаторов в ходе реакции: явления отравления и разработки, их причины, методы стабилизации и регенерации гетерогенных катализаторов.
29	Основные стадии гетерогенно-каталитической реакции: диффузия, адсорбция, химические превращения на поверхности.
30	Принципы соответствия в гетерогенном катализе
31	Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Статические и проточные установки.
32	Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Кинетические режимы. Стационарные и нестационарные режимы.
33	Ферментативный катализ. Строение молекул фермента. Особенности взаимодействия в каталитическом комплексе "субстрат — фермент".
34	Основные особенности кинетики ферментативных реакций. Иммобилизация ферментов.
35	Мицеллярный катализ. Поверхностно-активные вещества. Мицеллообразование в водных и органических средах.
36	Мицеллярный катализ. Распределение реагентов в мицеллярном растворе. Природа каталитического эффекта.
37	Области применения мицеллярного катализа.
38	Межфазный катализ. Особенности химических реакций в многофазных системах. Процессы переноса через поверхности раздела фаз. Катализаторы-переносчики, механизм их действия.
39	Методы исследования катализаторов. Химический анализ молекулярных и каркасных катализаторов.
40	Исследование поверхности гетерогенных катализаторов. Инструментальные методы исследования гетерогенных катализаторов: ИК- и УФ-спектроскопия, рентгеновская спектроскопия, фотоэлектронная спектроскопия, электронно-микроскопические методы.

6.3.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрено

6.3.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

1. Реакция первого порядка при температуре 70 °С завершается на 40 % за 60 мин. При какой температуре реакция завершится на 80 % за 120 мин, если энергия активации равна 60 кДж/моль?

2. В системе $A(г) + 2 B(г) = C(г)$ равновесные концентрации равны $[A] = 0,06$ моль/л, $[B] = 0,12$ моль/л, $[C] = 0,216$ моль/л. Найти константу равновесия реакции и исходные концентрации А и В.

3. Гидролиз ацетилхолина катализируется ферментом ацетилхолинэстеразой, число оборотов которой составляет 25000 с-1. Сколько времени потребуется ферменту для расщепления одной молекулы ацетилхолина?

4. Адсорбция некоторого газа на поверхности твердого тела описывается изотермой Ленгмюра и при 25 °С характеризуется константой адсорбционного равновесия $K = 0,85$ кПа-1. Рассчитайте давление газа в системе при степени заполнения поверхности газом 0,15.

6.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения

6.4.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

6.4.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная

+

Письменная

+

Компьютерное тестирование

Иная

6.4.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Возможность пользоваться справочными таблицами, калькулятором. Время на подготовку ответа 40 минут, время ответа не более 10 минут. Письменный конспект подготовки может быть использован при обязательном устном собеседовании

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
7.1.1 Основная учебная литература				
Комаров В.С.	Адсорбенты и носители катализаторов. Научные основы регулирования пористой структуры	Москва: Инфра-М	2016	https://ibooks.ru/reading.php?short=1&productid=355852
Е.Ю. Демьянцева, Р.А. Копнина	Ферментативный катализ в ЦБП [Текст]: учебно-методическое пособие	М-во образования и науки РФ, СПбГТУРП. – СПб.: СПбГТУРП	2014	http://nizrp.narod.ru/metod/kaffizikollchem/1.pdf
Солодова, Н. Л., Терентьева, Н. А.	Каталитический крекинг нефтяного сырья	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2015	http://www.iprbookshop.ru/62177.html
Журавлева, М. В., Климентова, Г. Ю., Зиннурова, О. В., Фирсин, А. А.	Катализ в органической технологии	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2016	http://www.iprbookshop.ru/79299.html
7.1.2 Дополнительная учебная литература				
Журавлева, М. В., Климентова, Г. Ю., Зиннурова, О. В., Гончарова, И. Н., Фирсин, А. А.	Каталитические процессы и нефтехимии и нефтепереработки	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2019	http://www.iprbookshop.ru/100689.html
Ташмухамбетова, Ж. Х., Аубакиров, Е. А.	Основы теории каталитических нефтехимических производств	Алматы: Казахский национальный университет им. аль-Фараби	2013	http://www.iprbookshop.ru/70402.html

Гончаренко Е.Е., Бадаев Ф.З., Голубев А.М.	Химическая кинетика и катализ : метод. указания к выполнению лабораторных работ	Москва: МГТУ им. Н.Э. Баумана	2012	https://ibooks.ru/reading.php?short=1&productid=343859
Самуилов, Я. Д., Самуилов, А. Я.	Катализ в процессах (со) полимеризации и (со) поликонденсации	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2014	http://www.iprbookshop.ru/61975.html

7.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Электронно-библиотечная система IPRbooks [Электронный ресурс]. URL: <http://www.iprbookshop.ru/>

Электронная библиотека ВШТЭ СПб ГУПТД [Электронный ресурс]. URL: <http://nizrp.narod.ru>

Электронно-библиотечная система «Айбукс» [Электронный ресурс]. URL: <https://www.ibooks.ru/>

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН [Электронный ресурс]. URL: <http://www.catalysis.ru>.

Химический портал [Электронный ресурс]. URL: <http://chemport.ru>.

База данных по патентам [Электронный ресурс]. URL: <http://www.ep.espacenet.com>.

Журнал "Катализ в промышленности" [Электронный ресурс]. URL: <http://www.kalvis.ru/katalog-izdanij/zhurnalyi/kataliz-v-promyshlennosti/>

7.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

Microsoft: Windows Professional 10 Russian Upgrade OLPNL AcademicEdition

Microsoft: Office Standard 2016 Russian OLP NL AcademicEdition

AutoCADDesign

PTC Mathcad 15

7.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Аудитория	Оснащение
Б-339	Рефрактометры, весы лабораторные, приборы для определения температуры плавления, сушильный шкаф, плитки электрические, мешалки магнитные, мешалки механические, вакуумный насос, водоструйные насосы, вытяжные шкафы, испаритель роторный LABOROTA-4000, спектрофотометр СФ-2000.
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска