

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М.В. Ломоносова
Протокол № ____ от ____ _____ 2015 г.

Рабочая программа дисциплины

1. Код и наименование дисциплины **Кинетика гетерогенных каталитических реакций: теория и методы исследования**
Цель курса – показать слушателям, каковы фундаментальные физико-химические принципы современного катализа, дать представление о кинетике и механизмах каталитических реакций, а также методах исследования их кинетики, знание которых обеспечивает наибольшую производительность и экологическую безопасность современных каталитических технологий.
2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
3. Направление подготовки 04.06.01 Химические науки. Направленность программы 02.00.04 Физическая химия, 02.00.15 Кинетика и катализ.
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП Вариативная часть ООП, тип дисциплины «д» - дисциплина (модуль), которую учащийся может освоить на выбор из списка предложенных (электив) и не обязательно в период обучения, отмеченный в базовом учебном плане, в течение 1 или 2 года обучения, во 2 или 3 семестре (по выбору аспиранта), предпочтительно – 3-й семестр.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-1 способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей про-	З2 (ОПК-1) Знать физические принципы, лежащие в основе современных физико-химических методов исследования веществ

профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	и материалов, а также возможности, достоинства и ограничения этих методов
	<i>У1 (ОПК-1) Уметь</i> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
	<i>У2 (ОПК-1) Уметь</i> модифицировать и разрабатывать методики измерений и интерпретации данных
<i>ПК-4</i> способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	<i>У5 (ПК-1) Уметь</i> выбирать оптимальные методы и методики синтеза для получения веществ с заданными свойствами, модифицировать методы и методики и разрабатывать новые
	<i>З4 (ПК-4) Знать:</i> основные законы и закономерности, определяющие направление и скорость протекания каталитических процессов <i>У16(ПК-4) Уметь:</i> применять основные законы химии для обсуждения свойств и характеристик гетерогенно-каталитических систем. <i>В8(ПК-4) Владеть:</i> навыками обобщения и анализа результатов физико-химических и каталитических исследований
<i>ПК-13</i> способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.15 Кинетика и катализ	<i>З1(ПК-13) Знать:</i> область применения и ограничения применимости физико-химических методов при определении свойств гетерогенных катализаторов <i>У3(ПК-13) Уметь:</i> критически анализировать и обрабатывать экспериментальные результаты каталитических испытаний гетерогенных катализаторов

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) приведены в Приложении.

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Раздел 1. Теоретические основы кинетики гетерогенных каталитических реакций	44	12	-	2	-	2	16			28
Раздел 2. Экспериментальные методы исследования гетерогенных каталитических реакций	48	14	-	2	-	2	18			30
Промежуточная аттестация зачет по курсу	16						4	12		
Итого	108	26		4		4	38			70

Раздел 1.

1. Общие принципы катализа. Катализ и равновесие. Промежуточные соединения в катализе. Каталитический цикл.
2. Основные характеристики катализаторов: активность селективность, стабильность. Активные центры гетерогенных катализаторов. Определение атомной (АКА) и удельной (УКА) активности гетерогенных катализаторов.
3. Стадийный и слитный механизмы гетерогенного катализа. Механизмы Ленгмюра-Хиншельвуда, Ридила-Или, Марса – ванн Кревелена.
4. Стадии химических превращений на поверхности катализаторов. Методы вывода кинетических уравнений: метод маршрутов и метод графов. Проблема дискриминации кинетических механизмов.
5. Основной постулат химической кинетики: закон действующих масс и закон действующих поверхностей. Скорость гетерогенной каталитической реакции.
6. Кинетические уравнения Ленгмюра-Хиншельвуда-Шваба. Частные случаи сильной и слабой адсорбции реагентов и продуктов.
7. Макрокинетика гетерогенного катализа. Молекулярная, кнудсеновская и фольмеровская диффузия в гетерогенном катализе. Внутрикинетическая, внутридиффузионная, внешнедиффузионная и внешнекинетическая области.

Раздел 2.

1. Классификация реакционных систем (типов реакторов) на основе обобщенного уравнения динамики химических реакций. Стационарные и нестационарные, статические и динамические, безградиентные и распределенные системы.
2. Статические реакторы: варьируемые параметры, характер получаемой информации и способы ее обработки; достоинства и недостатки.
3. Импульсный микрокаталитический метод: реактор: варьируемые параметры, характер получаемой информации и способы ее обработки; достоинства и недостатки.
4. Микрокаталитический метод: варьируемые параметры, характер получаемой информации и способы ее обработки; достоинства и недостатки.
5. Проточный метод: микрокаталитический метод: реактор: варьируемые параметры, характер получаемой информации и способы ее обработки; достоинства и недостатки
6. Проточно-циркуляционный реактор: микрокаталитический метод: реактор: варьируемые параметры, характер получаемой информации и способы ее обработки; достоинства и недостатки.
7. Безградиентные методы (реакторы Карберри и Берти, реакторы с виброперемешиванием и с кипящим слоем); микрокаталитический метод: реактор: варьируемые параметры, характер получаемой информации и способы ее обработки; достоинства и недостатки
8. Методы исследования "*in situ*" и "*operando*". Приборное обеспечение

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы аспирантов.

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень тем рефератов. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная литература (базовый учебник выделен курсивом)

1. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ, М.: Наука. 1988
2. Джеймс Б. Гомогенное гидрирование, М.: Мир. 1980.
3. Ерофеев Б.В., Тулупов В.А. Кинетика гомогенного катализа. Минск: Наука и техника. 1977.
4. Крылов О.В. Гетерогенный катализ, М.: Академкнига. 2004
5. Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного и гетерогенного катализа. М.: Мир. 1983
6. Основы биохимии (под ред. Анисимова А.А.). М: Высшая школа. 1986
7. Райдил и Тейлор. Катализ в теории и практике, Л.: Госхимтехиздат. 1933

8. Романовский Б.В. Основы катализа, М: Бином. 2014
9. Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Координация и катализ, М.: Мир. 1980
10. Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Химия каталитического гидрирования, М.: Мир. 1987

Дополнительная литература

1. Бендер М., Бергерон Р., Комияма М. Биоорганическая химия, М.: Мир. 1980
2. Murzin D.Yu. Engineering Catalysis. Turku. De Gruyter. 2013
3. Ридил Э., Развитие представлений в области катализа. М.: Мир. 1971
4. Романовский Б.В. Основы химической кинетики, М.: Экзамен. 2006
5. Ола Дж., Гепперт А., Пракаш С. Метанол и энергетика будущего. М.: Бином. 2009
6. Шмидт Ф.К. Катализ комплексами первого переходного ояда реакций гидрирования и димеризации. Иркутск: изд-во Иркутского ун-та. 1986

Интернет-ресурсы

www.catalystframework.org

<https://databases.library.jhu.edu>

Описание материально-технической базы.

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной проектором для показа демонстрационного материала

12. Язык преподавания - русский

13. Преподаватель (преподаватели).

Профессор, доктор химических наук Романовский Борис Васильевич

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
2. Вопросы для подготовки к текущей и промежуточной аттестации

- примеры тем рефератов:
 1. Проточный реактор
 2. Импульсный реактор
 3. Реактор Тимошенко
 4. Реактор с кипящим слоем
 5. Реактор «operando»
 6. Статический реактор

Основные типы контроля знаний:

- тестирование;
- индивидуальное собеседование,
- письменные ответы на вопросы.

Основной тип контроля умений и владений - практические контрольные задания (ПКЗ), включающих одну или несколько задач (вопросов) в виде краткой формулировки действий (комплекса действий), которые следует выполнить, или описание результата, который нужно получить.

Виды практических контрольных заданий:

- задания на установление правильной последовательности, взаимосвязанности действий, выяснения влияния различных факторов на результаты выполнения задания;
- установление последовательности (описать алгоритм выполнения действия),
- указать возможное влияние факторов на последствия реализации умения и т.д.
- задания на принятие решения в нестандартной ситуации (ситуации выбора, многоальтернативности решений, проблемной ситуации);
- задания на оценку последствий принятых решений;
- задания на оценку эффективности выполнения действия

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам. В ходе сдачи зачета проверяется, в первую очередь, формирование «знаниевой» компоненты компетенций, перечисленных в п.5, а также сформированность перечисленных в п.5 умений. Уровень знаний аспиранта по каждому вопросу оценивается на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае, если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено».

**Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине
Кинетика гетерогенных каталитических реакций: теория и методы исследования
на основе карт компетенций выпускников**

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ и ПОКАЗАТЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) <i>(критерии и показатели берутся из соответствующих карт компетенций, при этом используются либо традиционной системой оценивания, либо БРС)</i>					ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА (*)
	1	2	3	4	5	
<i>В1 (УК-1) Владеть</i> навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач	В целом успешное, но не систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач	В целом успешное, но отдельные пробелы применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач	Успешное и систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	ПКЗ на предмет установления последовательности действий при решении поставленной задачи с учетом знаний и навыков, полученных в курсе

	1	2	3	4	5	
32 (ОПК-1) Знать физические принципы, лежащие в основе современных физико-химических методов исследования веществ и материалов, а также возможности, достоинства и ограничения этих методов	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о физических принципах физико-химических методов исследования, недостаточные для их применения и понимания результатов	Достаточно полные, но неглубокие знания физических принципов, лежащих в основе различных физико-химических методов, не позволяющие делать самостоятельные выводы о их достоинствах и ограничениях	В целом сформированные и достаточно глубокие, но содержащие отдельные пробелы, представления о физических принципах, лежащих в основе физико-химических методов	Сформированное систематическое знание физических принципов, лежащих в основе физико-химических методов, позволяющее понимать их возможности, достоинства и ограничения	Индивидуальное собеседование
У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Фрагментарное умение подбирать методы для конкретных объектов исследования	В целом успешное, но не систематическое умение выбирать подходящие методы	Сформированное умение выбора наиболее информативных методов исследования и методик обработки данных	Сформированное умение выбирать оптимальные методы для изучения строения и свойств объектов исследования	ПКЗ: установление последовательности действий при решении поставленной задачи (описать алгоритм выполнения действия)

1	2	3	4	5	6	7
<i>У2 (ОПК-1) Уметь</i> модифицировать и разрабатывать методики измерений и интерпретации данных	Отсутствие умений	Наличие фрагментарных навыков разработки методик измерения и обработки данных	В целом успешное, но не систематическое умение модифицировать методики измерения методом проб и ошибок	Наличие отдельных затруднений в оптимизации методик измерения и интерпретации данных и разработке новых методик	Сформированное умение совершенствовать экспериментальные методики и создавать новые	ПКЗ: установление последовательности действий при решении поставленной задачи (описать алгоритм выполнения действия)
<i>34 (ПК-4) Знать:</i> основные законы и закономерности, определяющие направление и скорость протекания каталитических процессов	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о законах и закономерностях, определяющие направление и скорость протекания каталитических процессов	В целом успешные, но не систематические представления о законах и закономерностях, определяющие направление и скорость протекания каталитических процессов	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы в знаниях о законах и закономерностях, определяющие направление и скорость протекания каталитических процессов	Сформированные представления о законах и закономерностях, определяющие направление и скорость протекания каталитических процессов	Индивидуальное собеседование (зачет)
<i>У16(ПК-4) Уметь:</i> применять основные законы химии для обсуждения свойств и характеристик гетерогенно-каталитических систем	Отсутствие умений	Наличие фрагментарных навыков применения основных законов химии для обсуждения свойств и характеристик гетерогенно-каталитических систем	В целом успешное, но не систематическое умение основные законы химии для обсуждения свойств и характеристик гетерогенно-каталитических систем	Наличие отдельных затруднений в применении основных законов химии для обсуждения свойств и характеристик гетерогенно-каталитических систем	Сформированное умение применять основные законы химии для обсуждения свойств и характеристик гетерогенно-каталитических систем	Индивидуальное собеседование

<i>В8(ПК-4) Владеть:</i> навыками обобщения и анализа результатов физико-химических и каталитических исследований	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков обобщения и анализа результатов физико-химических и каталитических исследований при решении практических задач	В целом успешное, но не систематическое применение навыков обобщения и анализа результатов физико-химических и каталитических исследований при решении практических задач	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков обобщения и анализа результатов физико-химических и каталитических исследований при решении практических задач	Успешное и систематическое применение навыков обобщения и анализа результатов физико-химических и каталитических исследований при решении практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	ПКЗ на предмет установления последовательности действий при решении поставленной задачи с учетом знаний и навыков, полученных в курсе
<i>З1(ПК-13) Знать:</i> область применения и ограничения применимости физико-химических методов при определении свойств гетерогенных катализаторов	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о сфере применения и ограничениях применимости физико-химических методов при определении свойств гетерогенных катализаторов	В целом успешные, но не систематические представления об области применения и ограничениях применимости физико-химических методов при определении свойств гетерогенных катализаторов	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы знания о сферах применения и ограничениях применимости физико-химических методов при определении свойств гетерогенных катализаторов	Сформированные представления о сферах применения и ограничениях применимости физико-химических методов при определении свойств гетерогенных катализаторов	Индивидуальное собеседование (зачет)
<i>УЗ(ПК-13) Уметь:</i>	Отсутст-	Наличие фраг-	В целом успешное, но	Наличие отдель-	Сформирован-	

критически анализировать и обрабатывать экспериментальные результаты каталитических испытаний гетерогенных катализаторов	вие умений	ментарных навыков анализа и обработки экспериментальных результатов каталитических испытаний	не систематическое умение анализировать и обрабатывать экспериментальные результаты каталитических испытаний	ных затруднений в анализе и обработке экспериментальных результатов каталитических испытаний	ное умение анализировать и обрабатывать экспериментальные результаты каталитических испытаний	
--	------------	--	--	--	---	--