

Введение в катализ

Учебный курс для магистрантов и аспирантов Научно-образовательного центра
«Энергоэффективный катализ» (НОЦ ЭК)

ПРОГРАММА

Аннотация

Учебный курс «Введение в катализ» направлен на формирование у учащихся представлений о сущности каталитического действия, роли катализа в современной химической промышленности и живой природе, а также о важнейших каталитических реакциях и катализаторах.

В начале курса излагаются основные сведения о феноменологии и истории становления и развития катализа как отдельной научной дисциплины; даются наиболее общие положения катализа и адсорбции; рассматривается классификация катализаторов и каталитических процессов; излагается сущность и основные причины каталитического действия.

Основное содержание дисциплины охватывает вопросы гомогенного катализа в газовой и жидкой фазе, кислотно-основной катализ, основные принципы металлокомплексного катализа и круг реакций органического синтеза, катализируемых комплексами металлов. Вторая часть учебного курса посвящена рассмотрению наиболее важных процессов из области гетерогенного катализа, включая катализ металлами, оксидами, металлоорганическими и сульфидными катализаторами. Рассмотрена роль гетерогенного катализа в химической промышленности, энергетике, и защите окружающей среды.

Преподавание данной дисциплины включает следующие формы организации учебного процесса: лекции, написание и защита реферата, самостоятельную работу студента и итоговый контроль (экзамен). Программа дисциплины рассчитана на 3 зачетных единицы (108 академических часов).

1. Цели и задачи курса

Цель курса: ознакомить магистрантов химического факультета с современным состоянием учения о катализе, механизмами формирования и функционирования катализаторов и основными промышленными каталитическими процессами; сформировать комплекс фундаментальных представлений, составляющих основу катализа.

Задачи курса:

- обучить учащихся магистратуры теоретическим основам катализа;
- сформировать понимание сущности каталитического действия, элементарных стадиях каталитических реакций; каталитическом цикле;
- дать представление о классификации каталитических процессов, катализаторов и основных методах их приготовления;
- дать представление о роли катализа в химической, нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности, энергетике, защите окружающей среды;
- закрепить необходимый понятийный аппарат важнейших разделов катализа.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Введение в катализ» входит в магистерскую программу высшего профессионального образования (МП ВПО) «Энергоэффективный катализ» (020100.68.20), составляющую основу образовательной программы высшего профессионального образования НГУ (ООП НГУ) по направлению подготовки 020100 «химия» (магистр химии). Учебный курс «Введение в катализ» предназначен для лиц, имеющих диплом бакалавра (специалиста) по одному из естественнонаучных направлений, и принятых в магистратуру ФЕН НГУ на конкурсной основе.

Катализ – один из основных способов селективного проведения химических процессов. Около 90% продукции химической, нефтехимической промышленности и нефтеперерабатывающей отрасли производится с использованием катализаторов. Магистранты химических факультетов должны глубоко понимать сущность явления катализа, его теоретические основы, механизмы базовых каталитических реакций, основные промышленные каталитические процессы и актуальные проблемы катализа.

Дисциплина «Введение в катализ» адресована магистрам 1 курса. Изучению курса предшествует ООП бакалавриата. Курс опирается на базовые знания и представления, полученные в результате изучения таких дисциплин как «Физическая химия», «Химическая кинетика», «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Координационная химия», «Химическая термодинамика» и «Строение вещества».

3. Компетенции, формируемые в результате освоения курса

По окончании изучения курса «Введение в катализ» обучающиеся должны обладать следующими компетенциями:

1) профессиональными компетенциями (ПК):

- наличием представления об актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в критических условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие) (ПК-1);
- знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-2);
- умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-7).

2) общекультурными компетенциями (ОК):

- пониманием философских концепций естествознания, роли естественных наук (химии в том числе) в выработке научного мировоззрения (ОК-4).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать: теоретические основы катализа, методы получения катализаторов, роль катализаторов в современной химической технологии, основные направления использования получаемых соединений;

уметь: описывать механизмы каталитических реакций на примере металлокомплексного катализа, кислотно-основного катализа и окислительно-восстановительного катализа;

- применять и использовать полученные знания в профессиональной деятельности.

владеть: понятийным аппаратом и теоретическими представлениями катализа;

- навыками работы с учебной, учебно-методической и научной литературой.

4. Виды учебной работы и образовательные технологии, используемые при их реализации

Учебный процесс по курсу «Введение в катализ» включает в себя аудиторные занятия (лекции), написание курсовой работы (реферата) на предложенную тему, защиту курсовой работы и самостоятельную подготовку. Самостоятельная работа по дисциплине включает в себя работу с лекционным материалом, работу с учебной и научной литературой, написание реферата, подготовку презентации и доклада к защите реферата, подготовку к экзамену.

Для успешной реализации образовательного процесса по дисциплине «Введение в катализ» и повышения его эффективности используются как традиционные педагогические технологии, так и методы активного обучения: лекция-беседа и проблемно ориентированная лекция, дискуссия. Удельный вес занятий, проводимых с использованием активных и интерактивных методов обучения, в целом по дисциплине составляет 20 % аудиторных занятий.

5. Структура и содержание дисциплины

5.1. Структура курса

Курс «Введение в катализ» состоит из следующих основных разделов:

- Раздел 1. Основные понятия катализа
 - Раздел 2. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ
 - Раздел 3. Металлокомплексный катализ
 - Раздел 4. Гетерогенный катализ
 - Раздел 5. Основные промышленные каталитические процессы
-

Общая трудоемкость курса составляет 3 зачетных единицы или 108 часов (из них 48 – аудиторные, остальные 60 часов включают самостоятельную работу, написание реферата, защиту реферата и экзамен). Программой дисциплины предусмотрены лекционные занятия (46 часов), семинары (2 часа), подготовка и защита реферата (24 часа), самостоятельная работа студентов (28 часов) и экзамен (8 часов).

Структура курса представлена ниже в Таблице.

№	Тема, раздел	Всего часов	Аудиторные занятия			Самостоятельная работа студентов
			лекции	семина.	лаб.	
1	Основные понятия катализа.	8	8	-	-	4
2	Гомогенный и кислотно-основной катализ	6	6	-	-	3
3	Металлокомплексный катализ	7	7	-	-	4
4	Гетерогенный катализ	17	16	-	-	10
5	Основные промышленные каталитические процессы	10	9	-	-	7
6	Написание и защита реферата	2	-	2	-	24
	Всего:	100	46	2	-	52
	Экзамен	8				
	ИТОГО по курсу	108				

5.2. Программа лекционного курса

Раздел 1. Основные понятия катализа

Открытие каталитических явлений. Феноменология катализа. Катализ и иницирование. Роль катализа в становлении и развитии современной промышленности. Примеры промышленных каталитических процессов. Роль катализа в живой природе. Основные компоненты катализатора. Понятие об активном компоненте катализатора, активном центре, окружении активного центра и носителе. Каталитическая активность, стабильность, частота оборотов и число оборотов каталитических процессов. Классификация катализаторов на основе химического состава и фазового состояния компонентов. Классификация каталитических процессов.

Факторы, определяющие скорость химического превращения. Степень компенсации энергии разрывающихся и образующихся связей. Новые реакционные пути, открываемые катализатором. Понятие о каталитическом цикле. Основные причины каталитического действия. Формы промежуточного взаимодействия. Способы активации реагентов. Роль энергетического и структурного факторов при взаимодействии реагентов с катализатором.

Раздел 2. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ

Гомогенный катализ в газовой фазе. Влияние катализаторов на возбуждение и протекание цепных реакций. Гомогенный катализ в жидкой фазе. Особенности протекания химических реакций в растворах. Клеточный эффект. Взаимодействие с растворителем. Реакции с участием ионов.

Гомогенный катализ кислотами и основаниями в растворе. Роль протонированных и депротонированных структур в кислотно-основном катализе. Скорость реакций переноса протона в растворе. Специфический и общий катализ. Кинетика кислотно-основных каталитических реакций. Соотношение Бренстеда.

Гетерогенный кислотный катализ. Бренстедовские и льюисовские кислотные центры. Модифицированные кислотные катализаторы. Молекулярно-ситовой катализ.

Раздел 3. Металлокомплексный катализ

Металлокомплексный катализ. Основные реакции промышленного органического синтеза, катализируемые комплексами металлов. Основные типы комплексов металлов. Роль лигандов и растворителя в стабилизации структуры полиядерных комплексов. Элементарные стадии металлокомплексного катализа, диссоциация, присоединение и замещение лигандов, внедрение по связи металл-лиганд, окислительное присоединение, восстановительное элиминирование.

Механизм формирования и природа активных в катализе комплексов на примере реакций гидрирования, изомеризации, ди-, олиго-, полимеризации, карбонилирования, арилирования, окисления и метатезиса алкенов. Полимеризация олефинов, основные интермедиаты. Металлоферменты.

Раздел 4. Гетерогенный катализ

Гетерогенный катализ твердыми катализаторами. Физическая адсорбция и хемосорбция как стадии гетерогенно-каталитических процессов. Изотерма адсорбции на однородной поверхности. Равновесие хемосорбции. Энергетический профиль гетерогенной каталитической реакции.

Катализ металлами. Основные факторы, определяющие активность металлов. Особенности катализа дисперсными металлами. Правило Г.К.Борескова. Классификация реакций по М.Будару. Примеры структурно-чувствительных и структурно-нечувствительных реакций. Нанесенные металлические катализаторы. Взаимодействие дисперсных металлических частиц с поверхностью носителей. Явление сильного взаимодействия металла с носителем. Важнейшие промышленные процессы на металлических катализаторах.

Катализ оксидами. Особенности активации молекулы кислорода твердыми оксидами. Реакции полного и селективного окисления. Классификация механизмов каталитического окисления. Примеры стадийного и слитного механизмов. Катализаторы полного окисления. Связь каталитической активности с энергией связи кислорода в оксидах. Реакции селективного окисления. Примеры промышленно-важных реакций и катализаторов.

Катализаторы Циглера-Натта. Формирование активных центров, их реакционная способность и механизм роста полимерной цепи. Механизмы стереорегулирования. Катализ сульфидами. Основные катализаторы гидрообессеривания. Современные представления о функционировании активных центров в смешанных сульфидных катализаторах.

Раздел 5. Основные промышленные каталитические процессы

Основные промышленные каталитические процессы: получение водорода и синтез-газа; синтез аммиака и метанола, синтез Фишера-Тропше; гидрирование и дегидрирование органических соединений. Каталитические процессы в нефтепереработке: крекинг, гидрокрекинг, гидрообессеривание, риформинг, изомеризация и алкилирование. Важнейшие процессы органического синтеза. Полимеризация. Природоохранные каталитические технологии. Устройство и функционирование автомобильных нейтрализаторов.

6. Система контроля и оценки знаний обучающегося

Проверка выполненных рефератов, защита рефератов в форме презентации, зачет и экзамен в устной форме.

7. Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы

1. Формулировка явления катализ. Классификация катализаторов и каталитических процессов.
2. Причины каталитического действия. Общая схема механизма каталитических реакций. Каталитический цикл.
3. Принципы активации в катализе. Эффекты компенсации в катализе. Стадийный и слитный механизмы катализа.
4. Понятие об активном компоненте катализатора, активном центре, окружении активного центра и носителе. Способы выражения каталитической активности.
5. Формы промежуточного взаимодействия реагентов с катализатором. Способы активации реагентов. Роль энергетического и структурного факторов.
6. Различные варианты классификации катализаторов. Классификация каталитических процессов. Важнейшие промышленные катализаторы.
7. Гомогенный катализ в газовой фазе. Теория соударений.
8. Гомогенный катализ в жидкой фазе. Особенности протекания химических реакций в растворах.
9. Кислотно-основной катализ. Общий и специфический катализ. Кинетика кислотно-основных каталитических реакций. Соотношение Бренстеда.
10. Гетерогенный кислотный катализ. Бренстедовские и льюисовские кислотные центры. Молекулярно-ситовой катализ.
11. Металлокомплексный катализ и его место в современной промышленности. Основные типы комплексов металлов. Роль лигандов и растворителя.
12. Элементарные стадии металлокомплексного катализа.
13. Механизм формирования и природа активных в катализе комплексов на примере реакций гидрирования, изомеризации, ди-, олиго-, полимеризации, карбонилирования, арилирования, окисления и метатезиса алкенов.
14. Связь каталитической активности и дисперсности. Структурно-чувствительные и структурно-нечувствительные реакции.

15. Гетерогенный катализ. Энергетический профиль гетерогенной каталитической реакции.
16. Физическая адсорбция и хемосорбция как стадии гетерогенно-каталитических процессов. Изотерма адсорбции на однородной поверхности.
17. Типы гетерогенных катализаторов: Катализ металлами, оксидами и сульфидами переходных металлов.
18. Гетерогенный катализ металлами. Нанесенные металлические катализаторы. Взаимодействие металл-носитель.
19. Гетерогенный катализ оксидами металлов. Классификация механизмов каталитического окисления. Примеры стадийного и слитного механизмов.
20. Гетерогенные катализаторы полного и селективного окисления. Примеры реакций.
21. Катализаторы Циглера-Натта: активация, функционирование и стереорегулирование.
22. Катализ сульфидами. Принцип действия катализаторов гидрообессеривания.
23. Основные каталитические процессы органического синтеза.
24. Важнейшие каталитические процессы в промышленности. Получение водорода и синтез-газа. Синтез аммиака и метанола, синтез Фишера-Тропше. Гидрирование и дегидрирование органических соединений.
25. Каталитические процессы в нефтепереработке: крекинг, гидрокрекинг, риформинг, изомеризация и алкилирование.
26. Катализ в энергетике и защите окружающей среды.
27. Устройство и функционирование автомобильных каталитических конвертеров.

8. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

Основная литература

1. Боресков Г.К. Катализ. Ч.1, 2. Новосибирск, 1971.
2. Крылов О.В. Гетерогенный катализ. Москва, Академкнига, 2004, С. 679.
3. Кожевников И.В. Катализ кислотами и основаниями. Н.: Изд-во НГУ, 1991.
4. Рогинский С.З. Гетерогенный катализ. Некоторые вопросы теории. М.: Наука, 1979. С. 416.
5. И.И. Иоффе, Б.А. Решетов, А.М. Добротворский. Гетерогенный катализ: физико-химические основы. Л: Химия, 1985 – 472с.

Дополнительная литература

1. Д.В. Сокольский, В.А. Друзь. Введение в теорию гетерогенного катализа. М: Высшая школа, 1981 – 915с.
2. Панченков Г.М., Лебедев В.П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1974. С. 592.
3. В.В. Коробочкин, Е.А. Ханова. Технология катализаторов. Часть I. Методы приготовления катализаторов. Учебное пособие. – Томск, из-во ТПУ, 2008. - 50с.
4. Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного катализа. М.: Мир, 1983.

5. Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Координация и катализ. М.: Мир, 1980.
6. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986. С.303.
7. Мастерс К. Гомогенный катализ переходными металлами. М.: Мир, 1983.

Разработчик программы, к.х.н.

И. В. Мишаков