# Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» Химический факультет

**УТВЕРЖДАЮ** 

Декан химического факультета, Акад. РАН, профессор

/В.В. Лунин/

Blue

«27» февраля 2017 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Физико-химические основы катализа на молекулярных ситах

#### Уровень высшего образования:

Специалитет

#### Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

#### Направленность (профиль) ОПОП:

Физическая химия

#### Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена Учебно-методической комиссией факультета (протокол №1 от 27.01.2017) Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

\_\_\_\_\_

- 1. Наименование дисциплины (модуля) Физико-химические основы катализа на молекулярных ситах
- 2. Уровень высшего образования специалитет.
- 3. Направление подготовки: 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.
- 4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
- 5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С. Способность решать	Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов,
современные проблемы фундаментальной	применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,
и прикладной химии, используя	Уметь: самостоятельно составлять план исследования
методологию научного подхода и систему	Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной
фундаментальных химических понятий и законов	информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
Sakunub	достижения
СПК-1.С. Способность использовать	Знать: теоретические основы физико-химических методов исследования, применяемых
теоретические основы современных	для описания свойств
физико-химических методов исследования	Знать: особенности и ограничения применения физико-химических методов для
и анализа систем различной природы при	исследования молекулярно-ситовых катализаторов
решении практических задач	Знать: основные закономерности формирования и особенности молекулярно-ситовых
	материалов, структурно-химические и текстурные свойства этих материалов и их
	применение в практически важных процессах нефтехимии, основного и тонкого
	органического синтеза
	Уметь: подбирать методики исследования в зависимости от типа гетерогенно-
	каталитической системы
	Владеть: методиками проведения каталитических испытаний и анализа результатов
СПК-2.С. Способность проводить	Уметь: готовить образцы для каталитических исследований в соответствии с
экспериментальные исследования в	поставленной задачей и с учетом специфики изучаемых объектов
избранной области физической химии	Уметь: грамотно спланировать физико-химический эксперимент
(кинетика и катализ, химическая	Владеть: методами синтеза и исследования физико-химических свойств молекулярно-
термодинамика, молекулярная	ситовых материалов, оценки базовых свойств молекулярно-ситовых материалов –
спектроскопия, химия поверхности)	активности, селективности и стабильности
СПК-3.С. Способность использовать	Владеть: навыками работы на современном научном оборудовании для определения

серийные и оригинальные установки	физико-химических и каталитических свойств веществ
(приборы, комплексы) для определения	
физико-химических свойств веществ	
СПК-4.С. Способность использовать	Владеть: навыками поиска данных в открытых источниках (в том числе, в
физические и математические модели с	информационных базах данных) и применением их для решения практических задач
учетом их возможностей и	каталитической химии на основе молекулярных сит
ограничений при обработке и	
интерпретации экспериментальных	
данных в избранной области физической	
химии	
СПК-5.С. Способность проводить	Знать: ограничения и возможные ошибки при исследовании свойств молекулярно-
квантовохимические, термодинамические	ситовых катализаторов
и кинетические расчеты с использованием	Уметь: формулировать конкретные химические задачи на основе законов и
современных программных комплексов и	закономерностей, освоенных в курсе физической химии, применительно к теоретическим
баз данных	и практическим проблемам молекулярно-ситового катализа.
	Владеть: методиками и способами выбора оптимальной и адекватной модели для
	описания свойств молекулярно-ситовых катализаторов в процессах нефтехимии и
	тонкого органического синтеза

6. Объем дисциплины 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:

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 32 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

**Знать:** основные законы в области неорганической, аналитической, органической и физической химии; фундаментальные основы физико-химических методов исследования.

**Уметь:** обсуждать результаты научного исследования; применять законы химической кинетики для основных типов химических реакций.

**Владеть:** основными химическими теориями, концепциями, законами, описывающими физико-химические явления, применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов.

### 8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое	Bcero									
содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	(часы)	Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленны е на проведение текущего контроля успеваемост и, промежуточ ной аттестации	Bcero	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п	Bcero
Тема 1. Строение и синтез и молекулярных сит. Состав микропористых молекулярных сит –цеолитов. Размеры и геометрия межкристаллических пространств.	8	4	2				6	2		2
Тема 2. Физико-химические свойства молекулярных сит и методы их исследования. Основные свойства молекулярных сит, определяющие их активность, селективность и стабильность.	26	2	10				12	14		14

Тема 3. Активные центры молекулярно-ситовых катализаторов. Пути активации насыщенных и ненасыщенных углеводородов, молекул с гетероатомами, спиртов. Бифункциональные механизмы активации субстратов.	14	4	4			8	6	6
Тема 4. Каталитические реакции на молекулярных ситах. Процессы нефтепереработки: каталитический крекинг, гидрокрекинг, селектоформинг, депарафинизация. Каталитическая химия С <sub>1</sub> с использованием молекулярных сит. Нефтехимический синтез с использование молекулярноситовых катализаторов. Процессы тонкого органического синтеза на молекулярных ситах.	22	8	2	2		12	10	10
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	2				2	2		
Итого	72	18	18	2	2	40	32	32

#### 9. Образовательные технологии:

- -применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- -использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- -преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

#### 10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. 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 вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

#### Основная литература

- 1. Брек Д. Цеолитовые молекулярные сита. М.: Мир, 1976. 782с
- 2. Химия цеолитов и катализ на цеолитах / Под ред. Дж. Рабо, М.: Мир, 1980. Т. 1. 506 с.; Т. 2. 422 с.

#### Дополнительная литература

- 1. Баррер Р. Гидротермальная химия цеолитов. Пер. с англ.М.: Мир, 1985. 424 с.
- 2. Боресков Г.К. Применение цеолитов в катализе. 1977. 192 с.
- 3. Жданов С.П., Хвощев С.С., Самулевич Н.Н. Синтетические цеолиты. М.: Химия, 1981. 261 с.
- 4. Либау Ф. Структурная химия силикатов. Пер. англ. М.: Мир, 1988. 412 с.
- 5. Introduction to Zeolite Science and Practice, (H. van Bekkum, E.M. Flanigen, P.A. Jacobs and J.C. Jansen, Eds.), Elsevier, 2001.

#### 12. Язык преподавания – русский

#### 13. Преподаватели:

- 1. в.н.с., д.х.н. Иванова Ирина Игоревна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, iiivanova@phys.chem.msu.ru, 8-495-939-35-70
- 2. с.н.с., к.х.н. Князева Елена Евгеньевна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, eknyazeva62@mail.ru, 8-495-939-20-54
- 3. м.н.с., к.х.н. Коц Павел Александрович, кафедра физической химии химического факультета МГУ, pavelkots@gmail.com, 8-495-939-20-54
- 4. м.н.с. Коложвари Борис Алексеевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, <u>zelmog@gmail.com</u>, 8-495-939-20-54

#### Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

#### Вопросы для зачета:

- 1. Основные свойства молекулярных сит, определяющие их активность, селективность и стабильность. Размеры и геометрия межкристаллических пространств.
- 2. Синтез цеолитов. Условия образования природных цеолитов. Гидротермальный синтез. Матричный синтез. Темплатный синтез мезопористых материалов. Постсинтетическое модифицирование. Ионный обмен. Изоморфное замещение. Термопаровая, кислотно-основная и хелатная обработка. Деалюминирование и десилилирование.
- 3. Типы активных центров. Бренстедовские и льюисовские центры. Основные центры. Окислительно-восстановительные центры. Катионные центры.
- 4. Пути активации насыщенных и ненасыщенных углеводородов, молекул с гетероатомами, спиртов. Типы интермедиатов при катализе на молекулярных ситах. Карбениевые и карбониевые ионы и алкоксигруппы как интермедиаты. Протолитические механизмы. Радикальные интермедиаты. Электростатическая активация молекул. Бифункциональные механизмы активации субстратов. Синергизм в бифункциональном катализе.
- 5. Процессы нефтепереработки: каталитический крекинг, гидрокрекинг, селектоформинг, депарафинизация. Крекинг тяжелых фракций. Типы катализаторов. Требования к молекулярно-ситовым катализаторам, условия и показатели процессов. Дезактивация и регенерация катализаторов. Механизмы процессов.
- 6. Каталитическая химия C1 углеводородов с использованием молекулярных сит. Конверсия метанола (процессы МТG, МТО). Олигомеризация олефинов (MOGD, SPGK). Изомеризация олефинов (ISOFIN). Ароматизация низкомолекулярных алканов (CYCLAR, AROMAX). Механизм образования C-C связи.
- 7. Нефтехимический синтез с использование молекулярно-ситовых катализаторов. Алкилирование ароматических углеводородов. Изомеризация ксилолов и этилбензола. Диспропорционирование и трансалкилирование толуола. Реакции дегидрирования и окисления. Механизмы процессов.
- 8. Процессы тонкого органического синтеза на молекулярных ситах. Синтез биологически активных и лекарственных препаратов. Хиральные катализаторы на основе молекулярных сит.

#### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)							
Оценка 2 3 4 5							
Результат							
Знания	Отсутствие	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные	Сформированные			

	знаний		знания	систематические знания
Умения	Отсутствие	В целом успешное, но не	В целом успешное, но содержащее	Успешное и систематическое
	умений	систематическое умение	отдельные пробелы умение	умение
			(допускает неточности	
			непринципиального характера)	
Навыки	Отсутствие	Наличие отдельных	В целом, сформированные навыки,	Сформированные навыки,
(владения)	навыков	навыков	но не в активной форме	применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
по дисциплине (модулю)	
<b>Знать:</b> теоретические основы физико-химических методов исследования, применяемых для описания свойств; <b>Знать:</b> особенности и ограничения применения физико-химических методов для исследования	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
молекулярно-ситовых катализаторов;	
Знать: основные закономерности формирования и особенности молекулярно-ситовых	
материалов, структурно-химические и текстурные свойства этих материалов и их применение в практически важных процессах нефтехимии, основного и тонкого органического синтеза;	
<b>Знать:</b> ограничения и возможные ошибки при исследовании свойств молекулярно-ситовых катализаторов.	
Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов,	мероприятия текущего контроля
применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы;	успеваемости, устный опрос на
Уметь: самостоятельно составлять план исследования;	зачете
<b>Уметь:</b> подбирать методики исследования в зависимости от типа гетерогенно-каталитической системы;	
<b>Уметь:</b> готовить образцы для каталитических исследований в соответствии с поставленной задачей и с учетом специфики изучаемых объектов;	
Уметь: грамотно спланировать физико-химический эксперимент;	
Уметь: формулировать конкретные химические задачи на основе законов и закономерностей,	
<b>Уметь:</b> освоенных в курсе физической химии, применительно к теоретическим и практическим проблемам молекулярно-ситового катализа.	
Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной	мероприятия текущего контроля
информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их	успеваемости, устный опрос на
достижения;	зачете

Владеть: методиками проведения каталитических испытаний и анализа результатов;

**Владеть:** методами синтеза и исследования физико-химических свойств молекулярно-ситовых материалов, оценки базовых свойств молекулярно-ситовых материалов – активности, селективности и стабильности;

**Владеть:** навыками работы на современном научном оборудовании для определения фи-зикохимических и каталитических свойств веществ;

**Владеть:** навыками поиска данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применением их для решения практических задач каталитической химии на основе молекулярных сит;

**Владеть:** методиками и способами выбора оптимальной и адекватной модели для описания свойств молекулярно-ситовых катализаторов в процессах нефтехимии и тонкого органического синтеза.