

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и  
аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук  
(ГЕОХИ РАН)

ПРИНЯТО

Ученым советом ГЕОХИ РАН

Протокол № 8 от 22 октября 2014 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**«Современные проблемы катализа»**

**Направления подготовки:** 04.06.01 - Химические науки

*(указывается код и наименование направления подготовки)*

**Направленности (профили) подготовки:** 02.00.04 «Физическая химия»

*(наименование направленности подготовки)*

**Квалификация:** Исследователь. Преподаватель-исследователь

**Форма обучения:** очная

**Вид итогового контроля:** Зачет

*(Зачет/Дифференцированный зачет/Экзамен)*

**Москва 2014**

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень кадров высшей квалификации). Приказ Минобрнауки РФ №869 от 30 июля 2014г. (зарегистрирован в Минюсте России 20 августа 2014г., регистрационный № 33718).

## 1. Цели и задачи освоения дисциплины

Целью изучения дисциплины является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской, инновационной и образовательной деятельности в области современных проблем катализа (раздела физической химии) и возможности их использования на практике полученных знаний.

Задачи дисциплины:

- раскрыть смысл современных проблем катализа, научить аспирантов видеть области решения этих проблем,
- научить четко понимать принципиальные возможности каталитических процессов при решении конкретных задач.

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП

Дисциплина «Современные проблемы катализа» входит в часть ООП и относится к дисциплинам по выбору обучающихся, которые направлены на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по специальности.

## 3. Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Знать: основные методы научно-исследовательской работы.

Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научных публикациях; критически оценивать информацию вне зависимости от источника.

Владеть: навыками поиска, анализа и систематизации информации по теме исследования; навыками выбора методов и средств решения задач исследования.

Для освоения дисциплины «Избранные разделы термодинамики» требуются знания и умения, приобретенные обучающимися в результате освоения ряда дисциплин (разделов дисциплин), таких как:

Для освоения дисциплины «Современные проблемы катализа» требуются знания и умения, приобретенные обучающимися в результате освоения ряда дисциплин (разделов дисциплин), таких как:

- Физическая химия.
- Неорганическая химия.
- Органическая химия
- Аналитической химии.
- Химии высокомолекулярных соединений

## 4. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Код компетенции	Содержание компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
УК-1	способность к критическому	<b>Знать:</b> методы критического анализа и

	анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях. <b>Уметь:</b> анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. <b>Владеть:</b> навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.
<b>ОПК-1</b>	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	<b>Знать:</b> современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности <b>Уметь:</b> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования.
<b>ОПК-2</b>	готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук	<b>Знать:</b> основные принципы организации работы в коллективе и способы разрешения конфликтных ситуаций/ <b>Уметь:</b> планировать научную работу, формировать состав рабочей группы и оптимизировать распределение обязанностей между членами исследовательского коллектива.
<b>ПК-4</b>	способность и готовность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов в области физической химии	<b>Знать:</b> современное состояние науки в области физической химии. <b>Владеть:</b> методами планирования, подготовки, проведения научно-исследовательской работы по направленности (02.00.04 Физическая химия).

## 5. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачётных единицы, 108 часов, из которых 18 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 90 час. составляет самостоятельная работа обучающегося).

Вид работы	Всего
<b>Общая трудоёмкость</b>	108
<b>Аудиторная работа:</b>	18

лекции	18
семинары	-
<b>Лабораторные работы (ЛР)</b>	-
<b>Самостоятельная работа</b>	90
<b>Вид итогового контроля</b>	зачет

### Содержание дисциплины, виды учебных занятий и формы их проведения

№ раздела	Наименование раздела	Кол. часов
		<b>Лекции</b>
1	Теоретические основы катализа	4
2	Катализаторы в действии	8
3	Основы предвидения каталитического действия..	6
	Самостоятельная работа	90
	<b>ИТОГО</b>	<b>108</b>

### Лекции

№ раздела	Наименование раздела	Содержание лекций
1	Теоретические основы катализа	<p>Общие принципы катализа. Катализ и равновесие. Промежуточные соединения в катализе. Каталитический цикл.</p> <p>Новый реакционный путь, открываемый катализатором. Факторы, определяющие скорость каталитической реакции. Эффекты компенсации и дополнительного связывания.</p> <p>Взаимодействие реакционной среды и катализатора. Активные формы гомогенных и гетерогенных катализаторов. Стационарное состояние катализатора. Обратная связь и саморегулирование в катализе.</p>
2	Катализаторы в действии	<p>Принципы классификации катализаторов и каталитических процессов. Основные характеристики катализаторов: активность селективность, стабильность. Субстратная селективность, региоселективность, стереоселективность, энантиоселективность.</p> <p>Стадийный и слитный механизмы катализа. Ионные, радикальные и молекулярные механизмы, формы промежуточного взаимодействия реагента и катализатора. Механизмы</p>

		<p>Ленгмюра-Хиншельвуда, Ридила-Или, Марсаван Кревелена.</p> <p>Кисотно-основной катализ. Гомогенный общий и специфический кислотный катализ. Катализ концентрированными растворами кислот, уравнение Гаммета. "Жесткие" и "мягкие" кислоты и основания. Сверхкислоты как катализаторы. Гетерогенный кислотный катализ. Бренстедовские и льюисовские центры индивидуальных и смешанных оксидов. Катализ цеолитами, молекулярно-ситовой катализ. Катализ основаниями.</p> <p>Окислительно-восстановительный гомогенный и гетерогенный катализ. Активные формы кислорода как окислителя. Участие структурного кислорода, парциальное и полное окисление. Катализ металлами. Модели активных центров. Структурно-чувствительные и структурно-нечувствительные каталитические реакции. Нанесенные металлические катализаторы, размерные эффекты. Каталитические наноматериалы Бифункциональные катализаторы.</p> <p>Катализ комплексами переходных металлов. Стадии процесса. Правила Хиггинсона и Толмена. Модель Басоло-Пирсона. Правило Чатта. Катализ реакций, запрещенных по симметрии. Многоэлектронные процессы и катализ кластерами. Закрепленные металлокомплексы как катализаторы. Асимметрический каталитический синтез.</p> <p>Катализ ферментами. Структурная организация ферментов. Адсорбционные и каталитические центры, ингибиторы. Простетические группы и специфические субстраты ферментов. Механизмы ферментативных реакций. Конформационные эффекты, рН-зависимость активности ферментов термоинактивация ферментов. Имобилизованные ферменты, биотехнология.</p>
3	<p>Основы предвидения каталитического действия..</p>	<p>Основы предвидения каталитического действия. Корреляционные методы в кинетике и катализе. Уравнение Бренстеда-Поляньи. Линейное соотношение свободных энергий. Проблема оптимального катализатора,</p>

		принцип геометрического и энергетического соответствия.
--	--	---

## 6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций. Основные виды самостоятельной работы: в читальном зале библиотеки, на рабочем месте с доступом к ресурсам Интернет по IP-адресам .

Основной контроль знаний осуществляется в процессе участия в обсуждениях, ответов на вопросы и др.).

## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### *Основная литература*

- Боресков Г.К., Гетерогенный катализ, М., Наука, 1988.  
 Джеймс Б., Гомогенное гидрирование. М. Мир, 1980.  
 Ерофеев Б.В., Тулупов В.А. Кинетика гомогенного катализа, Минск, Наука и техника, 1977.  
 Крылов О.В., Гетерогенный катализ, М., Академкнига, 2004.  
 Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного и гетерогенного катализа. М., Мир, 1983.  
 Основы биохимии (под ред. А.А.Анисимова), М., Высшая школа, 1986.  
 Райдил и Тэйлор, Катализ в теории и практике, Л., Госхимтехиздат, 1933.  
 Романовский Б.В. Основы катализа, М., БИНОМ, 2014. (Базовый учебник).  
 Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Координация и катализ, М., Мир, 1980.  
 Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Химия каталитического гидрирования СО. М., Мир, 1987.

### Дополнительная литература.

- Бендер М., Бергерон Р., Комияма М., Биоорганическая химия, М. Мир, 1980.  
 Murzin D.Yu., Engineering Catalysis, Turku, De Gruyter, 2013.  
 Ридил Э., Развитие представлений в области катализа, М., Мир, 1971.  
 Романовский Б.В. Основы химической кинетики, М., ЭКЗАМЕН, 2006.  
 Ола Дж., Гепперт А., Пракаш С. Метанол и энергетика будущего, М., БИНОМ, 2009.  
 Шмидт Ф.К., Катализ комплексами первого переходного ряда реакций гидрирования и димеризации, Иркутск, Изд. Иркутского ун-та, 1986.

### **Интернет-ресурсы:**

Доступ к электронным научным информационным ресурсам осуществляется как в читальном зале библиотеки ГЕОХИ РАН, так и на рабочем месте по IP-адресам ГЕОХИ РАН:

1. <http://apps.webofknowledge.com/> -База данных Web of Science
2. <http://www.scopus.com/> - База данных SCOPUS
3. <http://www.sciencedirect.com/> - Журналы издательства Elsevier - Freedom Collection
4. <http://link.springer.com/>- Журналы издательства Springer
5. <http://www.springerprotocols.com/> - Журналы издательства Springer Journals и SpringerProtocols
6. <http://e-library.ru> Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU
7. <http://www.benran.ru/> с компьютеров библиотеки ГЕОХИ РАН открыт доступ к электронным ресурсам Библиотеки по естественным наукам РАН.
8. Физические методы исследования в химии.  
<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/education-program/spec-phys/29.html>
9. Википедия. Свободная энциклопедия:  
[https://ru.wikipedia.org/wiki/Физическая\\_химия](https://ru.wikipedia.org/wiki/Физическая_химия)
10. <http://www.physchem.chimfak.rsu.ru/Source/PCC/index.html> - Левченков С. И., Физическая и коллоидная химия: Конспект лекций.
11. <http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html> - Портал с лекциями, учебно-методическими материалами МГУ им. М.В.Ломоносова.

## 7. Образовательные технологии

Кроме очных лекций предусмотрена самостоятельная работа и выполнение расчетных заданий. При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используется персональный компьютер (или ноутбук) с необходимым программным обеспечением для работы устройства, а также для демонстрации презентаций MS PowerPoint и для решения задач.

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

8.1. Для освоения программы обучения и для выполнения научно-исследовательских работ по теме диссертации каждому аспиранту предоставлено индивидуальное рабочее место, оборудованное приточно-вытяжной вентиляцией, водопроводом, водоотведением, воздуховодом. Аспиранты имеют возможность использовать материально-технические средства лабораторий, в которых выполняют квалификационные и диссертационные работы (оргтехника, включая персональный компьютер, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование).

Основу материально-технической базы института составляет приборный парк. список дорогостоящего оборудования. составляет около 80 единиц (спектрометры эмиссионные с индуктивно-связанной плазмой, спектрометры эмиссионные с индуктивно-связанной плазмой, масс-спектрометры с ионной ловушкой, атомно-абсорбционные спектрометры, хроматографы жидкостные, хроматографы газовые и газо-жидкостные, микроскопы световые и оптические, микроанализаторы, видеокамеры, сканирующий электронный микроскоп, анализаторы размеров частиц, изотопный масс-спектрометр,

микроанализатор рентгеноспектральной Cameca SX 100, , рентгенофлуоресцентный спектрометр Axios Advanced, , масс-спектрометры Triton, DELTA Plus XP, Element XR и многие др.)

8.2. Лекционная аудитория, оборудованная проекционным оборудованием и доступом в сеть «Интернет».

## **9. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины**

9.1. Форма контроля знаний:

9.1.1. Текущий контроль знаний в течение всего курса осуществляется с помощью контрольных вопросов.

9.1.2. Зачет по дисциплине в конце курса обучения.

### **9.2. Оценочные средства (в виде устных вопросов, тем реферата)**

#### **9.2.1. Перечень примерных вопросов для текущего контроля знаний:**

1. Гомогенные катализаторы. Приведите примеры.
2. Ферментативный катализ и его особенности.
3. Приведите примеры известных каталитических процессов.
4. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.
5. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.
6. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.
7. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа.
8. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Нуклеофильный и электрофильный катализ.
9. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.
10. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.
11. Основные промышленные каталитические процессы.

#### **9.2.2. Примерные темы докладов для зачета:**

1. Экология и катализ
2. Хиральные катализаторы
3. Водородная энергетика и катализ
4. Размерные эффекты в катализе
5. Молекулярный дизайн в катализе
6. Закрепленные комплексы
7. Имобилизованные ферменты
8. Мембранный катализ
9. Межфазный катализ
10. Бифазный катализ

## 11. Мицеллярный катализ

## ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

№ листа изменений или наименования элемента приложения	№ протокола Ученого Совета (секции Уч. Совета)	Дата заседания Ученого Совета (секции Уч. Совета)	Всего листов в документе	Подпись зам. директора по научной работе
	Рабочая программа обсуждена и принята на заседании Ученого совета ГЕОХИ РАН, протокол № 8	22 октября 2014 года	10	
--	Обновленный текст программы принят на заседании Ученого совета РАН, Протокол №11(8)	28 декабря 2016 года	10	