

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

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,



/С.Н.Калмыков/

«31» мая 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Методы приготовления и физико-химического анализа
гетерогенных катализаторов**

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 №2 от 14.05.2021)

Москва 2021

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 29 декабря 2018 года № 1770.

Год (годы) приема на обучение 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Индикаторы достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-1.С. Способен использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	СПК-1.С.1. При изучении систем различной природы выбирает физико-химические методы исследования, адекватные поставленной задаче	Знать: теоретические основы экспериментальных методов исследования текстурных характеристик и свойств поверхности гетерогенных катализаторов. Знать: основные методики приготовления катализаторов и область их применимости. Знать: особенности и ограничения применения физико-химических методов для исследования катализаторов с малым содержанием металла Уметь: оценить возможности физико-химических методов исследования для анализа свойств катализаторов. Уметь: сравнить возможности методов исследования поверхности и объемных методов исследования применительно к гетерогенным катализаторам. Уметь: поставить задачу для использования физико-химических методов исследования на стадиях приготовления.
СПК-2.С. Способен проводить экспериментальные исследования в избранной области физической химии (кинетика и катализ, химическая термодинамика, молекулярная спектроскопия, химия поверхности)	СПК-2.С.2 Планирует эксперимент в избранной области физической химии и проводит необходимые измерения	Знать: Типичную конструкцию приборов для исследования гетерогенных катализаторов и требования к образцам. Уметь: грамотно планировать эксперимент по исследованию физико-химических свойств гетерогенных катализаторов Уметь: анализировать и планировать выбор физико-химических методов Владеть: методами обработки экспериментальных результатов Владеть: навыками выбора методики приготовления гетерогенных катализаторов различного типа
СПК-3.С. Способен использовать серийные и оригинальные установки (приборы, комплексы) для определения физико-химических свойств веществ	СПК-3.С.1 Грамотно выбирает инструментальный метод изучения физико-химических свойств веществ	Знать: основные подходы к методикам синтеза гетерогенных катализаторов Уметь: применять знания для оценки экспериментальных возможностей современных экспериментальных методов

	СПК-3.С.2 Проводит экспериментальные исследования с использованием современных научных приборов	Владеть: навыками обработки экспериментальных результатов, полученных на современном научном оборудовании
СПК-4.С. Способен использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии	СПК-4.С.1. Выбирает адекватные физические и математические модели для описания физико-химических систем, проводит их параметризацию	Знать: возможности и ограничения математических моделей при обработке результатов Владеть: навыками использования программных средств для обработки массива экспериментальных данных
СПК-5.С. Способен проводить квантовохимические, термодинамические и кинетические расчеты с использованием современных программных комплексов и баз данных	СПК-5.С.1. Оценивает возможности и качество программных продуктов для выполнения квантовохимических, термодинамических и кинетических расчетов	Уметь: использовать программные продукты приборов для обработки данных и выполнения расчетов Владеть: навыками расчета кинетики гетерогенной каталитической реакции Владеть: навыками обработки массива экспериментальных данных

3. 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 3 зачетных единицы, всего 108 часа, из которых 38 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 70 часов составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

Знать: основные законы в области неорганической, аналитической и физической химии

Знать: основные теоретические представления о катализе

Уметь: применять основные законы химии для обсуждения результатов научного исследования;

Владеть: основными химическими теориями, концепциями, законами, описывающими физико-химические явления

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		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, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1.		4	6				10	10		
Тема 2.		2	2				4	4		
Тема 3.		4	2				6	12		
Тема 4.		2	2				4	8		
Тема 5.		2	2				4	10		
Тема 6.		2	2				4	8		
Тема 7.		2	2				4	12		
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			6
Итого	108	18	18			2	38	64		70

Содержание тем:

Тема 1.

Методы приготовления гетерогенных катализаторов. Общие подходы и принципы приготовления катализаторов. Планирование методики и выбор критериев для оптимизации. Методы синтеза гетерогенных катализаторов. Особенности экспериментального проведения синтеза в каждом методе. Гидротермальный метод для синтеза цеолитов и других гетерогенных катализаторов. Влияние условий приготовления на физико-химические свойства получаемых катализаторов.

Тема 2.

Способы синтеза дисперсных частиц на поверхности носителя. Влияние условий приготовления на форму и размер частиц. Способы формирования различного распределения активного компонента по объему гранулы носителя.

Способы формирования атомного-распределения металла (single atom catalysts)

Тема 3.

Определение текстурных характеристик гетерогенных катализаторов. Метод низкотемпературной адсорбции/десорбции газов. Влияние размера и формы пор на вид изотермы адсорбции/десорбции. Особенности анализа микро- и мезопористых материалов.

Адсорбция жидкостей для исследования макропористых материалов. Определение теплоты адсорбции.

Тема 4.

Рентгенофазовый анализ для исследования структуры гетерогенных катализаторов. Особенности применения метода для анализа образцов гетерогенных катализаторов. Пробоподготовка образцов, ограничения метода для образцов с малым содержанием активного компонента.

Тема 5.

Растровая (сканирующая) электронная микроскопия для исследования текстуры и морфологии поверхности гетерогенных катализаторов. Применение различных режимов для получения сведений о структуре, химическом составе образца и распределении активного компонента. Локальный микроанализ методом энерго-дисперсионной спектроскопии.

Тема 6.

Просвечивающая электронная микроскопия для исследования гетерогенных катализаторов. Режимы светлого и темного поля (ADF, HAADF), микродифракция, 3D TEM. Способы визуализации компонентов (Z-контраст и др.). Возможности ПЭМ и ПЭМ ВР для определения состава, структуры и распределения компонентов в образце.

Тема 7.

Способы анализа размера частиц. Методы определения и способы расчета среднего размера частиц, анализ распределения частиц по размерам. Особенности различных физико-химических методов для определения среднего размера частиц.

Использование программы ImageJ для обработки микрофотографий и определения размера частиц.

6. 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.

Преподавание курса проводится в форме лекционных и семинарских занятий с использованием мультимедийных презентаций. Часть материала подается в форме задач и примеров. Занятия проводятся с привлечением результатов исследований, полученных непосредственно авторами программы. Примеры, демонстрации и задания составлены на основе реальных экспериментальных данных, способствующих глубокому пониманию и усвоению материала курса.

7. 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.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

Основная литература

Чокендорф И., Наймантсведрайт Х. «Современный катализ и химическая кинетика», ISBN: 978-5-91559-044-0. Издательство: Интеллект, 2010 г., 501 стр.

Грег С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность, пористость. Пер. с англ. , 2-е изд. - М.: Мир, 1984. - 306 с.

Электронная микроскопия : учеб. пособие / А. И. Власов, К. А. Елсуков, И. А. Косолапов. – М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. – 168 с

Теоретические основы растровой электронной микроскопии и энергодисперсионного анализа наноматериалов : учеб. пособие / [Д. А. Полонянкин и др.] ; Минобрнауки России, ОмГТУ. – Омск : Изд-во ОмГТУ, 2019. – 116 с

Дополнительная литература

Handbook of Heterogeneous Catalysis, (G.Ertl, H.Knozinger and J.Weitkamp, Eds.), VCH Publ., 1997.

Thomas J.M., Thomas W. J. Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis» Wiley-VCH, 1996

Thommes, Matthias, Kaneko, Katsumi, Neimark, Alexander V., Olivier, James P., Rodriguez-Reinoso, Francisco, Rouquerol, Jean and Sing, Kenneth S.W.. "Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report)" Pure and Applied Chemistry, vol. 87, no. 9-10, 2015, pp. 1051-1069. <https://doi.org/10.1515/pac-2014-1117>

Фенелонов В.Б. Введение в физическую химию формирования супрамолекулярной структуры адсорбентов и катализаторов", Новосибирск, Изд-во УрО РАН, 2004.

Материально-техническое обеспечение: для проведения занятий необходима аудитория, оснащенная техникой для показа презентаций.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

г.н.с., д.х.н. Иванова Ирина Игоревна
доцент, к.х.н. Голубина Елена Владимировна
доцент, к.х.н. Касьянов Иван Алексеевич
с.н.с., к.ф-м.н. Маслаков Константин Игоревич
с.н.с., к.х.н. Егоров Александр Владимирович
м.н.с. Коложвари Борис Алексеевич

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Текущий контроль знаний студента осуществляется в виде контрольных работ, небольших заданий и собеседований в ходе занятий.

Промежуточная аттестация по курсу проходит в виде устного зачета, на котором проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации.

Примеры домашнего задания:

Пример №1.

Проанализируйте микрофотографии просвечивающей электронной микроскопии, постройте распределение частиц по размерам. Рассчитайте средний размер частиц.

Пример №2.

Вам необходимо приготовить катализатор, содержащий 2% Ni на носителе. Рассчитайте, сколько носителя и соли никеля (конкретный носитель и состав соли задается преподавателем отдельно каждому студенту) необходимо взять для приготовления катализатора.

Пример №3.

Предложите схему приготовления катализатора, в котором активный компонент распределен внутри гранулы носителя по типу «яичный желток».

Пример №4.

Проанализируйте представленную изотерму адсорбции/десорбции азота, какую информацию о текстуре образца можно извлечь из этих данных?

Вопросы для зачета:

Общие принципы приготовления гетерогенных катализаторов. Основные стадии и этапы приготовления и их особенности.

В чем особенность методов приготовления нанесенных гетерогенных катализаторов?

Методы синтеза массивных катализаторов (сплавление, осаждение, соосаждение, золь-гель, выщелачивание, гидролиз в пламени и др.).

Способы синтеза дисперсных частиц на поверхности носителя (методы пропитки, осаждения, ионный обмен и др.).

Влияние носителя и условий приготовления на форму нанесенных частиц.

Как проявляется различная пористая структура на виде изотермы адсорбции/десорбции?

Возможные сложности при определении распределения пор по размерам: эффекты кавитации и блокировки пор. Способы построения распределения пор по размерам для микро- и мезопористых материалов.

Использование физико-химических методов для определения пористой структуры гетерогенных катализаторов.

Применимость методов БЭТ, ВЖИ DFT для пор различного размера.

Использование физико-химических методов для определения элементного состава гетерогенных катализаторов. Сравнение применимости и ограничений различных методов.

Возможные ошибки при определении параметров гетерогенных катализаторов при исследовании физико-химическими методами. Приведите примеры.

Какие физико-химические методы эффективны при исследовании нанесённых наноразмерных частиц металлов?

Применение физико-химических методов исследования для оптимизации методик приготовления гетерогенных катализаторов и определения параметров получаемых систем.

Использование физико-химических методов исследования для определения размеров частиц: причины несовпадения размеров при исследовании различными методами.

Методы определения химического состава катализаторов: химический анализ, атомно-абсорбционная спектроскопия, ICP-MS, рентгенофлуорисцентный анализ. Применимость методов и факторы, которые могут вносить ошибки.

Факторы, влияющие на вид микрофотографий растровой электронной микроскопии. Сведения об образце, которые можно извлечь при исследовании в режимах SE, BSE, EDX.

Режимы анализа методом просвечивающей электронной микроскопии (BF, ADF, HAADF, STEM): использование для определения характеристик гетерогенных катализаторов.

Подходы к анализу размеров частиц. Построение и анализ различных типов распределений частиц по размерам.

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 \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Теоретические основы методов приготовления и исследования поверхности катализаторов. - Типичную конструкцию приборов для исследования поверхности катализаторов и требования к образцам. - возможности и ограничения математических моделей при обработке результатов 	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете

<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - самостоятельно составлять план приготовления и исследования гетерогенных катализаторов - оценить возможности методов РФА, СЭМ и ПЭМ для анализа катализаторов. - сравнить возможности методов исследования поверхности и объемных методов исследования применительно к катализаторам. - поставить задачу для исследования катализаторов методами анализа поверхности - грамотно планировать эксперимент по исследованию химического состава гетерогенных катализаторов - применять знания для оценки экспериментальных возможностей современных экспериментальных методов - использовать программные продукты приборов для обработки данных и выполнения расчетов 	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения - методами обработки экспериментальных результатов - навыками обработки экспериментальных результатов, полученных на современном научном оборудовании - навыками использования программных средств для обработки массива экспериментальных данных 	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>