

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

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«30» августа 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ
В НЕФТЕХИМИИ И КАТАЛИЗЕ**

Уровень высшего образования:
Магистратура

Направление подготовки (специальность):

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Нефтехимия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 августа 2019 г., №1033.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

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

2. Планируемые результаты обучения по практике, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор достижения - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикаторы достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>СПК-1.М. Способен использовать теоретические основы органической, физической и коллоидной химии, а также современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач нефтехимических процессов</p>	<p>СПК-1.М.1 Планирует исследование объектов нефтехимии с использованием теоретических основ органической, физической, коллоидной химии и современных физико-химических методов исследования веществ и материалов</p>	<p>Уметь: применять полученные знания о современных процессах и тенденциях в области нефтепереработки, нефте- и газохимии, катализа для формулировки и решения проблем в области нефтепереработки, нефте- и газохимии, катализа.</p>
<p>СПК-2.М. Способен использовать основные экспериментальные методы и подходы, физико-химические методы анализа, применяемые в области нефтепереработки нефте- и газохимии, катализа, для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>СПК-2.М.1 Грамотно планирует эксперимент для получения данных для решения задач нефтепереработки, нефте- и газохимии, катализа</p>	<p>Знать основные принципы и возможности современных физических методов исследования катализаторов и сорбентов, анализа состава и структуры реагентов, проведения каталитических реакций Владеть: основными экспериментальными методами и подходами, физико-химическими методами анализа, применяемыми в области нефтепереработки, нефте- и газохимии, катализа, для решения задач профессиональной деятельности</p>
<p>СПК-3.М. Способен самостоятельно изучать и анализировать научно-технические, патентные и учебные материалы в области нефтепереработки нефте- и газохимии, катализа</p>	<p>СПК-3.М.1 Проводит сбор и систематизацию информации по теме работы в области нефтехимии</p>	<p>Владеть методикой и быть способным самостоятельно изучать и анализировать научно-технические, патентные и учебные материалы в области нефтепереработки, нефте- и газохимии, катализа.</p>
<p>СПК-5.М Способен подбирать катализаторы, конкретные методы их синтеза в зависимости от каталитического процесса</p>	<p>СПК-5.М.1 Предлагает каталитические системы с учетом специфики каталитического процесса</p>	<p>Уметь подбирать катализаторы, конкретные методы их синтеза в зависимости от типа каталитического процесса и комплексно исследовать их свойства</p>

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 5 зачетных единицы, всего 180 часов, из которых 90 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (38 часов занятия лекционного типа, 38 часов – занятия семинарского типа, 2 часа - групповые консультации, 8 часов – индивидуальные консультации, 4 часа - промежуточный контроль успеваемости), 90 часов составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

знать: основные закономерности химических равновесий и реакций в гомогенных и гетерогенных системах;

уметь: формулировать и решать конкретные задачи на основе усвоенных законов и закономерностей; получать экспериментальные данные, проводить их математическую обработку, обобщать полученные результаты;

владеть: навыками поиска необходимых данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных), простейшими методами расчета химических равновесий, техникой химического эксперимента

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
Раздел 1.		12			2		14	20	18	38

Раздел 2.		4	10		2		16		6	6
Раздел 3.		4	10		2		16		4	4
Раздел 4.		18	18		2		38		12	12
Итоговая аттестация - экзамен	36			2		4	6			30
Итого	180	38	38	2	8	4	90	20	40	90

Лекции

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела
1	Хроматографические методы разделения и анализа смесей	История хроматографии. Основные виды хроматографических процессов. Устройство хроматографа. Причины рывывания пиков. Основные параметры удерживания. Селективность разделения. Критерий разделения, Индексы Ковача, Роршайдера. Основные типы хроматографических детекторов. Виды хроматографии: капиллярная хроматография, жидкостная хроматография, планарная хроматография
2	Исследование кинетики каталитических реакций	Цели и задачи кинетических исследований. Стадии каталитических процессов. Влияние диффузии на наблюдаемую кинетику каталитической реакции. Экспериментальные методы исследования кинетики каталитических реакций. Статические системы. Динамические системы. Импульсный проточный метод с хроматографическим контролем.
3	Оптические методы исследования органических лигандов, металлоорганических комплексов и органических супрамолекулярных комплексов	Абсорбционная спектроскопия. основные понятия и законы поглощения. Спектрофотометрический анализ. Спектрофотометрическое титрование. Анализ процессов комплексообразования. Определение констант устойчивости комплексов, скорости протекания фотопревращений, термодинамических характеристик химических реакций. Оптические сенсоры. Флуоресцентная спектроскопия. Люминесценция. Фосфоресценция. Основные Флуорофоры. Флуоресцентные маркеры биологических молекул. Определение квантовых выходов фотохимических превращений. Супрамолекулярная фотоника. Молекулярные моторы.
4	Методы исследования физико-химических свойств катализаторов,	Классификация твердых тел. Типы изотерм адсорбции. Определение величины удельной поверхности и характеристик пористой структуры катализаторов и сорбентов.

	сорбентов, реагентов и продуктов реакций	<p>Определение кислотных свойств поверхности твердых тел: общей кислотности, типа и силы кислотных центров, их концентрации.</p> <p>Исследование взаимодействия адсорбат-адсорбент термодесорбционным методом. Варианты термодесорбционного метода.</p> <p>Основные принципы и границы применения спектральных методов при исследовании адсорбентов, катализаторов, каталитических комплексов и продуктов.</p> <p>Применение оптической спектроскопии для исследования характера адсорбции, химического состояния поверхности, формирования структуры катализаторов.</p> <p>Основные принципы и границы применения специальных спектральных методов: ЯГР, УФЭС, ЭОС; РФЭС, ЭПР, ПМР, ЯМР; ЭПР, EXAFS и др.</p> <p>Электронная микроскопия: ПЭМ, СЭМ, СТМ, АСМ.</p> <p>Методы, не связанные с воздействием электромагнитного излучения. МСВИ; ДМЭ, ЭСД и др.</p>
--	--	---

Семинары (практические занятия)

№ раздела	Тема
2	<ol style="list-style-type: none"> 1. Области протекания гетерогенно-каталитических реакций. Признаки проявления диффузионных осложнений, способы их устранения. 2. Статические системы для реакций в газовой и жидкой фазах, динамические системы, импульсный проточный метод. 3. Представление экспериментальных данных и обработка результатов эксперимента.
3	<ol style="list-style-type: none"> 1. Спектрофотометрический анализ. Спектрофотометрическое титрование. 2. Оптические сенсоры. Спектрофотометры, оптоволоконная спектрофотометрия. 3. Флуоресцентная спектроскопия.
4	<ol style="list-style-type: none"> 1. Методы определения структурных характеристик поверхности катализаторов методом БЭТ (весовой, объемный, упрощенный метод БЭТ). 2. Хроматографический метод определения общей (метод тепловой десорбции) и селективной поверхности катализаторов. 3. Ртутная и водяная порометрия для изучения макропористых сорбентов и катализаторов. 4. Методы определения поверхности общей кислотности твердых тел, типа и силы кислотных центров, их концентрации. 5. Классификация электромагнитных волн по энергии. Основные принципы и границы применения спектральных методов.

- | | |
|--|---|
| | <p>6. Возможности ИК- спектроскопии для изучения химии поверхности, выяснения структуры адсорбционных и каталитических комплексов, изучения кислотности катализаторов и др.</p> <p>7. Основы метода спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Выбор методик ЯМР для решения задач установления структур органических лигандов и их комплексов.</p> <p>8. Требования к подготовке образцов для анализа методом ЯМР. Критерии оценки качества получаемых спектров.</p> <p>9. Общие подходы к анализу одномерных спектров ЯМР (1H, 13C, 13C APT, 13C DEPT)</p> <p>10. Особенности двумерных методик ЯМР (COSY, HETCOR, HSQC, HMBC, EXSY, NOESY, ROESY)</p> <p>11. Возможности и недостатки других спектральных методов.</p> <p>12. Методы электронной микроскопии. Зондовая микроскопия</p> |
|--|---|

6. Образовательные технологии:

- дискуссии,
- встречи со специалистами-катализаторами, работающими в российских и зарубежных исследовательских институтах и вузах
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

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

«[Методы оптической спектроскопии в нефтехимии, изучении органических соединений, катализаторов и каталитических реакций](#)» (учебное пособие). Под редакцией И.И. Кулаковой, А.В. Хорошутина, О.А. Федоровой. М.: КДУ, 2016, 72 с.

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. Пароль и логин не требуются <http://nbmgu.ru/>

Основная литература

1. Денисов Е.Т. Кинетика гомогенных химических реакций. М.: Высшая школа. 1988.
2. В.М. Байрамов. Основы химической кинетики и катализа. М.: АСАДЕМА. 2003. Часть 2.
3. Г. Мак-Ннейр, Э Бонеллиу Введение в газовую хроматографию. М.: Мир, 1970. 280 с.
4. Б.А. Руденко, Г.И. Руденко. Высокоэффективные хроматографические процессы. Т. 1. Газовая хроматография. М.: Наука, 2003. 425 с.; Т. 2. Процессы с конденсированными подвижными фазами. М.: Наука, 2003. 287 с.
5. В.Д. Красиков Основы планарной хроматографии Санкт-Петербург Химиздат, 2005
6. Химия комплексов «гость-хозяин». Синтез, структуры и применение (Под ред. Ф. Фегтле, Э. Вебера). М.: Мир, 1988. 511 с.
7. В. В. Скопенко, А. Ю. Цивадзе, Л. И. Савранский, А. Д. Гарновский. Координационная химия. М.: ИКЦ «Академкнига», 2007.

8. Дж. В. Сидд, Дж. Л. Этвуд. Супрамолекулярная химия. М.: ИКЦ «Академкнига», 2007.
9. Грег С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность и пористость. М.: Мир. 1984.
10. Танабе К. Твердые кислоты и основания. М.: Мир. 1973 (гл. 1, 2, 4, 5)
11. Моррисон С.Р. Химическая физика поверхности твердого тела. М.: Мир. 1980.
12. Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. Физические методы исследования в химии. М. Мир, 2003.
13. Е.В. Скокан, М.А.Абаев, И.Ф.Шишков Физические методы исследования в химии (Учебное пособие). М.Химфак МГУ, 2011. Части 1 и 2.

Дополнительная литература

1. Киперман С.Л. Основы химической кинетики в гетерогенном катализе. М.: "Химия", 1979.
2. Экспериментальные методы химической кинетики. М.: Изд-во МГУ. 1985.
3. Е.Л. Стыскин, Л.Б. Иниксон, Е.В. Брауде. Практическая высокоэффективная жидкостная хроматография. М.: Химия, 1986. ??с.
4. Л.А. Коган. Количественная газовая хроматография. М.: Химия, 1975. 184.
5. В.В. Бражников. Дифференциальные детекторы для газовой хроматографии. М.: Наука, 1974. 224 с.
6. О. И. Койфман, Н. Ж. Мамардашвили, И. С. Антипин. Синтетические рецепторы на основе порфиринов и их конъюгатов с каликс[4]аренам. М.: «Наука», 2006.
7. Metal-ligand interaction in Organic Chemistry and Biochemistry (Eds. B. Pullman, N. Goldblum, Dordrecht, D. Reidel) 1977.
8. V. Valeur. Molecular Fluorescence Molecular Fluorescence: Principles and Applications. 2001
9. Суздалев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: КомКнига, 2006. 592 с.
10. Методы исследования катализаторов (Под ред. В.М.Грязнова). М.: Мир. 1983.
11. Литл Л. ИК-спектры адсорбированных молекул. М.: Мир: 1969.
12. Якерсон В.И., Розанов В.В. Исследование каталитических систем методами термодесорбции и термографии. М.: ВИНТИ, 1974.

Требования к материально-техническому обеспечению: лекции по данной дисциплине проводятся в ауд.210 химического факультета МГУ, оснащенной проекционным оборудованием, компьютерами и интерактивной доской

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

1. Кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник Кулакова Инна Ивановна, кафедра химии нефти и органического катализа, kulakova@petrol.chem.msu.ru, тел.(495)-939-45-38;
1. Кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник Мингалев Павел Германович, кафедра химии нефти и органического катализа, glo@petrol.chem.msu.ru, тел.(495)-939-53-57;
2. Доктор химических наук, профессор Федорова Ольга Анатольевна кафедра химии нефти и органического катализа, fedorova@ineos.ac.ru, тел.(495) 939-2448

3. Кандидат химических наук, старший научный сотрудник Вацуро Иван Михайлович, кафедра химии нефти и органического катализа, vatsuro@petrol.chem.msu.ru, тел.(495) 939-1302

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Перечень вопросов к экзамену

1. Определение хроматографии.
2. Открытие хроматографии и история ее развития.
3. Понятие о подвижной и неподвижной фазах.
4. Классификация хроматографических методов (по агрегатному состоянию фаз, по механизму разделения, по технике выполнения).
5. Устройство газового хроматографа.
6. Типы хроматографических колонок.
7. Характеристики хроматографических пиков.
8. Параметры, характеризующие селективность и эффективность хроматографического разделения.
9. Вихревая и молекулярная диффузия, сопротивление массопередаче.
10. Уравнение Ван-Деемтера.
11. Основные параметры удерживания.
12. Природа сил взаимодействия сорбата с неподвижной фазой, типы этих взаимодействий.
13. Полярность фаз и сорбатов.
14. Индексы Ковача.
15. Индексы Роршнайдера.
16. Концентрационные детекторы.
17. Поточные детекторы.
18. Важнейшие характеристики детекторов
19. Устройство основных типов детекторов: детектор по теплопроводности (катарометр), термохимический детектор, пламенно-ионизационный детектор, термоионный (фосфорный) детектор, детектор электронного захвата.
20. Капиллярная хроматография
21. Определение эффективности капиллярной колонки
22. Жидкостная хроматография

23. Адсорбционная жидкостная хроматография. Носители, подвижные фазы.
24. Распределительная хроматография. Привитые фазы.
25. Цели и задачи кинетических исследований.
26. Стадии каталитических реакций.
27. Энергетический профиль реакции при наличии внутри- и внешнедиффузионных осложнений.
28. Параметры, влияющие на попадание в диффузионную область; основные тесты на протекание реакции в кинетической области
29. Открытые и закрытые системы для изучения каталитических реакций.
30. Устранение диффузионных осложнений
31. Расчет кинетических параметров реакции из экспериментальных данных
32. Типы изотерм адсорбции, сорбционного гистерезиса.
33. Методы определения величины удельной поверхности и характеристик пористой структуры катализаторов и сорбентов
34. Ртутная и водяная порометрия
35. Характеристика кислотности твердых тел: концентрации, типа и силы кислотных центров, их распределения по силе
36. Методы определения кислотных свойств поверхности твердых тел
37. Термодесорбционный метод для исследования взаимодействия адсорбат-адсорбент
38. Классификация электромагнитных волн по энергии.
39. Основные принципы и границы применения спектральных методов при исследовании адсорбентов, катализаторов, каталитических комплексов и продуктов.
40. Абсорбционная спектроскопия. Процесс поглощения света веществом, основные понятия и законы электронной спектроскопии.
41. Спектрофотометрический анализ. Спектрофотометрическое титрование.
42. Флуоресцентная спектроскопия. Возбужденные состояния молекулы, пути релаксации возбуждения.
43. Люминесценция. Основные характеристики испускания флуоресценции. Флуорофоры. Флуоресцентные маркеры биологических молекул. Фосфоресценция.
44. ИК-спектроскопия. Характеристические группы, характеристические частоты.
45. Возможности ИК-спектроскопии.
46. Основные принципы и границы применения одного из следующих спектральных методов: ЯГР, УФЭС, ЭОС; РФЭС, ЭПР, ПМР, ЯМР; ЭПР, EXAFS.
47. Принципиальное устройство современного импульсного спектрометра для регистрации спектров ЯМР жидких образцов.
48. Электронная микроскопия.
49. Основные принципы и границы применения одного из следующих вариантов микроскопии: ПЭМ, СЭМ, СТМ, АСМ.
50. Методы, не связанные с воздействием электромагнитного излучения: МСВИ, ДМЭ, ЭСД. Возможности методов.

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
Знать основные принципы и возможности современных физических методов исследования катализаторов и сорбентов, анализа состава и структуры реагентов, проведения каталитических реакций	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Уметь: применять полученные знания о современных процессах и тенденциях в области нефтепереработки, нефте- и газохимии, катализа для формулировки и решения проблем в области нефтепереработки, нефте- и газохимии, катализа. Уметь подбирать катализаторы, конкретные методы их синтеза в зависимости от типа каталитического процесса и комплексно исследовать их свойства	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Владеть: основными экспериментальными методами и подходами, физико-химическими методами анализа, применяемыми в области нефтепереработки, нефте- и газохимии, катализа, для решения задач профессиональной деятельности Владеть методикой и быть способным самостоятельно изучать и анализировать научно-технические, патентные и учебные материалы в области нефтепереработки, нефте- и газохимии, катализа	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене