# Министерство науки и высшего образования Российской Федерации НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ: И.о. декана химического факультета А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

# Специализированный практикум по адсорбции и катализу

по направлению подготовки / специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) подготовки / специализация: **Фундаментальная и прикладная химия** 

Форма обучения **Очная** 

Квалификация **химик-специалист**, преподаватель

Год приема **2023** 

СОГЛАСОВАНО: Руководитель ОП В.В. Шелковников

Председатель УМК Л.Н. Мишенина

## 1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений в различных областях химии;
- ОПК-2. Способен проводить синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследовать процессы с их участием;
- ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения;
- ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках;
- ПК-6. Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

- РООПК 1.1 Знает теоретические основы неорганической, органической, физической и аналитической химии, применяет их при решении профессиональных задач в других областях химии.
- РООПК 1.2 Умеет систематизировать и интерпретировать результаты экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии
- РООПК 1.3 Умеет грамотно формулировать заключения и выводы по результатам работы
- РООПК 2.1 Знает стандартные приемы и операции, используемые при получении веществ неорганической и органической природы
- РООПК 2.2 Знает теоретические основы методов изучения состава, структуры и свойств для грамотного выбора метода исследования
- РООПК 2.3 Умеет проводить стандартные синтезы по готовым методикам, выполнять стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов, а также использовать серийное научное оборудование для изучения их свойств
- РООПК 3.1 Знает основы теоретической физики, математического анализа и квантовой химии; основные теоретические и полуэмпирические модели, применяемые при решении задач химической направленности
- РОПК 1.1 Умеет разрабатывать стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.
- РОПК 1.2 Умеет выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.
- РОПК 6.1 Умеет выполнять стандартные операции на высокотехнологическом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства.

## 2. Задачи освоения дисциплины

- Получить навыки работы на классических и современных приборах и установках по тематике дисциплины (каталитических установках, хемосорбционных анализаторах, спектрофотометре, анализаторе размера частиц и дзета-потенциала).
- Научиться выбирать оптимальные методы и условия проведения экспериментов для исследования текстурных, адсорбционных и каталитических свойств материалов;

определять и рассчитывать на основе полученных экспериментальных данных параметры, характеризующие поверхностные и каталитические свойства материалов (удельную поверхность, общий объем пор, распределение пор по размерам, конверсию, каталитическую активность, селективность, порядок реакции по компоненту, эффективную энергию активации и др.); проводить анализ полученных результатов, в том числе правильно сравнивать параметры, характеризующие поверхностные и каталитические свойства материалов, находить их взаимосвязь со структурой, фазовым составом и другими поверхностными и объёмными характеристиками исследуемых объектов.

## 3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Модуль Физическая химия.

## 4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Восьмой семестр, экзамен

## 5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Неорганическая химия, Аналитическая химия, Органическая химия, Физическая химия, Химическая технология, Адсорбционные процессы, Гетерогенный катализ.

## 6. Язык реализации

Русский

#### 7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 з.е., 180 часов, из которых: -лабораторные: 80 ч.

в том числе практическая подготовка: 80 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

#### 8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Определение каталитических свойств образца катализатора при разных временах контакта. Сравнение каталитических свойств образцов (скрининг).

Проточные методы исследования каталитических свойств твердых катализаторов: интегральный реактор, режим идеального вытеснения. Каталитическая активность, средняя скорость каталитической реакции, конверсия. Время контакта. Стационарное состояние катализатора. Влияние процессов массо- и теплопереноса: области внешней диффузии, внутренней диффузии, кинетическая область. Обеспечение «идеальных» условий протекания реакции на катализаторе. Скрининг катализаторов. Сравнение активности катализаторов.

Тема 2. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции в проточном реакторе. Определение порядка реакции по компоненту

Проточные методы исследования каталитических свойств твердых катализаторов: дифференциальный реактор, режим идеального смешения. Проточно-циркуляционная установка. Дифференциальный режим в проточном реакторе. Удельная каталитическая активность. Ошибка определения скорости реакции. Порядок реакции: общий, частный порядок. Методы определения порядков реакции.

Тема 3. Окислительное дегидрирование пропана в пропилен: определение основных параметров, скрининг, сведение баланса

Проточные методы исследования каталитических свойств твердых катализаторов: интегральный реактор, режим идеального вытеснения. Каталитическая активность, средняя скорость каталитической реакции, конверсия; селективность. Время контакта. Стационарное состояние катализатора. Влияние процессов массо- и теплопереноса: области внешней диффузии, внутренней диффузии, кинетическая область. Обеспечение «идеальных» условий протекания реакции на катализаторе. Скрининг катализаторов. Сравнение активности и селективности катализаторов.

Тема 4. Окислительное дегидрирование пропана в пропилен: определение энергии активации реакции

Проточные методы исследования каталитических свойств твердых катализаторов: интегральный и дифференциальный реактор. Дифференциальный режим в проточном реакторе. Каталитическая активность, средняя скорость каталитической реакции, удельная каталитическая активность. Влияние процессов массо- и теплопереноса: области внешней диффузии, внутренней диффузии, кинетическая область; влияние температуры на наблюдаемую скорость реакции. Эффективная энергия активации реакции.

Тема 5. Определение удельной поверхности, объема пор и распределения пор по размерам с применением прибора «TriStar 3020» для мезопористых твердых тел многоточечным методом БЭТ

Удельная поверхность, пористость, изотерма адсорбции. Основные типы изотерм адсорбции. Методы определения удельной поверхности и размеров пор. Статический метод: многоточечный метод БЭТ. Волюмометрическое измерение величины адсорбции.

Тема 6. Определение удельной поверхности, объема пор и распределения пор по размерам с применением прибора 3Flex для тонкопористых образцов адсорбентов и катализаторов многоточечным методом БЭТ

Удельная поверхность, пористость, изотерма адсорбции. Основные типы изотерм адсорбции. Методы определения удельной поверхности и размеров пор. Статический метод: многоточечный метод БЭТ. Волюмометрическое измерение величины адсорбции.

Тема 7. Определение удельной поверхности твердофазных образцов адсорбентов и катализаторов одноточечным методом БЭТ на проточной сорбционной установке

Удельная поверхность, пористость, изотерма адсорбции. Основные типы изотерм адсорбции. Методы определения удельной поверхности. Динамический метод: одноточечный метод БЭТ.

Тема 8. Изучение кислотно-основного состояния поверхности твердых тел методами рН-метрии (определение рН точки нулевого заряда, рН изоионного состояния)

Кислотно-основные центры на поверхности твердых тел: центры Льюиса и Бренстеда. Изоионное состояние, точка нулевого заряда. Метод рН-метрии. Оценка кислотно-основных свойств поверхности по значению рН точки нулевого заряда, рН изоионного состояния.

- Тема 9. Оценка кислотности и основности поверхности по значению pH изоэлектрического состояния, определенного измерением электрофоретической подвижности частиц при различных значениях pH суспензии
- ДЭС. Электрокинетический потенциал (дзета-потенциал). Электрофоретическая подвижность. Изоэлектрическая точка. Определение изоэлектрической точки. Оценка кислотно-основных свойств поверхности по значению рН изоэлектрического состояния.
- Тема 10. Индикаторный метод определения кислотно-основных свойств поверхности твердых тел разной степени дисперсности (адсорбция индикаторов Гаммета из водной среды)

Кислотно-основные центры на поверхности твердых тел: центры Льюиса и Бренстеда. Характеристика силы кислотных/основных центров на поверхности: функция

Гаммета. Методы определения кислотности поверхности твердых тел (силы центров, концентрации центров, распределения центров) в жидких средах: индикаторный метод.

## 9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, знания теоретического материала к выполняемым практическим работам и методики эксперимента и порядка выполнения работы, подготовки и защиты отчетов по выполненным работам и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

## 10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Изучение дисциплины завершается устным экзаменом, допуском к которому является сдача и защита отчетов по всем выполненным практическим работам. Экзаменационный билет состоит из двух теоретических вопросов, позволяющих оценить достижение РООПК 1.1, РООПК 2.2, РООПК 3.1, РОПК 1.1, РОПК 1.2.

Примерный перечень теоретических вопросов

- 1. Проточный реактор. Режим идеального вытеснения, «интегральный реактор». Время контакта.
- 2. Условия проведения исследований каталитических свойств. Влияние процессов массо- и теплопереноса. Экспериментальные способы проверки отсутствия внешней и внутренней диффузии при проведении эксперимента.
- 3. Проточные методы исследования каталитических свойств твердых катализаторов: дифференциальный реактор, режим идеального смешения. Проточноциркуляционная установка. Дифференциальный режим в проточном реакторе. Удельная каталитическая активность.
- 4. Пористость твердых тел. Определение объёма пор и распределения пор по размерам из изотерм адсорбции-десорбции, полученных с помощью прибора «TriStar 3020».
- 5. Классификация методов определения кислотно-основных свойств поверхности твердых тел. Кислотно-основные параметры различных методов, их определение, характеристика с их помощью кислотно-основного состояния поверхности твердых тел.
- 6. Условия применимости уравнений Генри, Фрейндлиха, Ленгмюра и Дубинина-Астахова для анализа экспериментальных изотерм адсорбции из растворов.
- 7. Общие закономерности адсорбции веществ из водных растворов на твердой поверхности. Классификация экспериментальных изотерм адсорбции из водных растворов по Гильсу
- 8. Микро-, мезо- и макропоры. Механизм заполнения, адсорбции в порах различных размеров. Модельные виды пор и закономерности конденсации в них
- 9. Уравнение Томсона-Кельвина. Использование уравнения для расчета размеров и объема пор.
- 10. Микропоры. Адсорбция на микропористых сорбентах. Определение объёма пор и распределения пор по размерам из изотерм адсорбции-десорбции, полученных с помощью прибора «3Flex»

Оценочные материалы в полном объеме содержатся в архиве кафедры и на странице курса в системе Moodle.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Критерии оценивания описаны ниже.

Неудовлетворительно: не знает, не владеет материалом, в том числе затрудняется в формулировке основных теоретических понятий и плохо разбирается в принципах работы классического и современного оборудования (приборов и установок) по тематике

дисциплины; не разбирается в определении и расчетах параметров и в вопросах их связи с другими свойствам твердого тела.

Удовлетворительно: имеет представление об основных понятиях изучаемой дисциплины, о методах определения свойств поверхности твердых тел, но делает при этом много ошибок; делает грубые ошибки при работе на приборах, необходимых для изучения поверхностных свойств, а также в определении соответствующих параметров.

Хорошо: знает основные теории и уравнения, лежащие в основе методов определения поверхностных свойств, но допускает при этом неточности; разбирается в принципах работы классического и современного оборудования (приборов и установок) по тематике дисциплины, может использовать различные приборы, методы исследования поверхностных свойств, правильно определяет основные параметры, характеризующие поверхность адсорбентов и катализаторов, но допускает небольшие неточности.

Отлично: знает основные теории и уравнения, лежащие в основе методов определения поверхностных свойств; отлично разбирается в принципах работы классического и современного оборудования (приборов и установок) по тематике дисциплины; без труда может использовать различные приборы, методы исследования поверхностных свойств; правильно определяет основные параметры, характеризующие поверхность адсорбентов и катализаторов.

## 11. Учебно-методическое обеспечение

- a) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=23455
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
  - в) План практических занятий по дисциплине.
  - г) Методические указания по проведению лабораторных работ.
  - д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
- Харламова Т. С., Водянкина О. В. Методы исследования каталитических свойств гетерогенных катализаторов. Томск : Издательский Дом ТГУ, 2017. 60 с.
- Минакова Т. С. Адсорбционные процессы на поверхности твердых тел. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2007. 279 с.
- Сычев М. М. Кислотно-основные характеристики поверхности твердых тел и управление свойствами материалов и композитов / М. М. Сычев [и др.]. Санкт-Петербург: Химиздат, 2016. 274 с.
- Минакова Т. С., Екимова И. А. Фториды и оксиды щелочноземельных металлов и магния. Поверхностные свойства. Томск : Издательский Дом ТГУ, 2014. 148 с.
  - б) дополнительная литература:
- Мамонтов Г. В., Минакова Т. С., Харламова Т. С., Горбунова А. С. Лабораторный практикум по курсу «Адсорбционные процессы» / Электронный вариант, 2016.
- Иконникова К. В. Теория и практика определения кислотно-основных свойств поверхности твердых тел методом рН-метрии. / К. В. Иконникова [и др.]. —Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. 99 с.
- Kharlamova T. S., Timofeev K. L., Salaev M. A., Svetlichnyi V. A., Vodyankina O. V. Monolayer MgVO<sub>x</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts for propane oxidative dehydrogenation: Insights into a role of structural, redox, and acid-base properties in catalytic performance // Applied Catalysis A, General. -2020.-V.598.-P.117574. https://doi.org/10.1016/j.apcata.2020.117574

- Grabowski R. Kinetics of Oxidative Dehydrogenation of  $C_2\text{-}C_3$  Alkanes on Oxide Catalysts, Catalysis Reviews. 2006. V. 48. P. 199-268. http://dx.doi.org/10.1080/01614940600631413
- Carrero C. A., Schlögl R., Wachs I. E., Schomaecker R. A critical literature review of the kinetics for the oxidative dehydrogenation of propane over well-defined supported vanadium oxide catalysts // ACS Catal. 2014. V. 4. P. 3357-3380. https://doi.org/10.1021/cs5003417
- Li H., Shen M., Wang J., Wang H., Wang J. The Effect of Support on CO Oxidation Performance over Pd/CeO₂ and Pd/CeO₂-ZrO₂ Catalyst. // Ind. Eng. Chem. Res. 2020. V. 59. N 4. P. 1477–1486. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b05351
- Thommes M., Kaneko K., Neimark A. V., Olivier J. P., Rodriguez-Reinoso F., Rouquerol J., Sing K.S.W., Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report) // Pure Appl. Chem. − 2015. − V. 87. − NN 9 −10. − P. 1051−1069. https://doi.org/10.1515/pac-2014-1117
  - в) ресурсы сети Интернет:
- База данных цитирования издательства Elsevier. Библиографическая информация, информация о цитировании, ссылки на полные тексты. <a href="https://www.scopus.com">https://www.scopus.com</a>
- Информационно-аналитическая платформа компании Clarivate Analytics <a href="https://www.webofscience.com">https://www.webofscience.com</a>
  - Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU <a href="https://elibrary.ru">https://elibrary.ru</a>

## 13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
  - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).
  - б) информационные справочные системы:
- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ <a href="http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system">http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system</a>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ <a href="http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index">http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index</a>
  - ЭБС Лань http://e.lanbook.com/
  - ЭБС Консультант студента <a href="http://www.studentlibrary.ru/">http://www.studentlibrary.ru/</a>
  - Образовательная платформа Юрайт https://urait.ru/
  - ЭБС ZNANIUM.com https://znanium.com/
  - <u>— 9FC IPRbooks http://www.iprbookshop.ru/</u>

## 14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Лаборатории, оснащенные вытяжными шкафами, измерительными инструментами (аналитические весы, термометры, газовые часы, мыльно-пленочные измерители), стеклянной и фарфоровой лабораторной посудой и следующим оборудованием:

- анализатор удельной поверхности и пористости TriStar 3020 (Micromeritics, США);
- хемосорбционные анализаторы AutoChem (Micromeritics, США);
- станция дегазации VacPrep 061 (Micromeritics, США);

- анализатор удельной поверхности и пористости 3Flex (Micromeritics, США);
- ионометр ИПЛ 101, НПО «Семико» (Новосибирск); спектрофотометр UV-2800;
- фотоколориметр;
- проточные каталитические установки, сопряжённые с газовыми хроматографами «Хроматэк-Кристалл 5000» для on-line анализа продуктов реакции;
- аналитический прибор Omni S/N (Brookhaven, США) для измерения дзетапотенциала и размера частиц с автотитратором BI-ZTU (Brookhaven, USA).

## 15. Информация о разработчиках

Харламова Тамара Сергеевна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

Грабченко Мария Владимировна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.