



Силабус освітнього компонента
Програма навчальної дисципліни

Теоретичні основи каталізу

Шифр та назва спеціальності
161 Хімічні технології та інженерія

Освітня програма
Хімічні технології та інженерія

Рівень освіти
Бакалавр

Семестр
5

Інститут
ННІ Хімічних технологій та інженерії

Кафедра
Хімічної технології неорганічних речовин,
каталізу та екології (181)

Тип дисципліни
Дисципліна вільного вибору студента
профільної підготовки

Мова викладання
Українська

Викладачі, розробники



Казаків Валентин Васильович

valentyn.kazakov@khpі.edu.ua

Доктор технічних наук, професор
Досвід роботи – 11 років. Автор понад 140 наукових та навчально-методичних праць. Провідний лектор з дисциплін: «Теоретичні основи каталізу», «Каталіз в хімії та хімічних технологіях», «Технології мінеральних кислот»

Загальна інформація, кількість публікацій, основні курси тощо.

[Детальніше про викладача на сайті кафедри](#)

Загальна інформація

Анотація

«Теоретичні основи каталізу» – є однією з дисциплін професійної підготовки бакалавра за спеціалізацією 161.01 Хімічні технології неорганічних речовин. Її викладання забезпечують природничі дисципліни загальної підготовки і професійної підготовки за спеціальністю. При вивченні дисципліни передбачається одержання спеціальних знань і вмінь в області каталізу щодо розуміння сутності активаційного процесу гетерогенних реакцій, дифузійних, адсорбційно-десорбційних стадій каталітичного процесу, знання впливу різноманітних параметрів каталізатора та умов його експлуатації на продуктивність каталітичного процесу.

Мета та цілі дисципліни

Формування теоретичних знань та практичних навичок з питань каталізу щодо розуміння сутності активаційного процесу гетерогенних реакцій, дифузійних, адсорбційно-десорбційних стадій каталітичного процесу, знання впливу різноманітних параметрів каталізатора та умов його експлуатації на продуктивність каталітичного процесу, генерувати нові уявлення, переносити знання на нетипові, нестандартні ситуації щодо перебігу каталітичних процесів.

Формат занять

Лекції, самостійна робота, консультації. Підсумковий контроль – екзамен.

Компетентності

Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

Здатність використовувати положення і методи фундаментальних наук для вирішення професійних задач.

Здатність використовувати обчислювальну техніку та інформаційні технології для вирішення складних задач і практичних проблем в галузі хімічної інженерії.

Результати навчання

Коректне використання у професійній діяльності термінології та основні поняття хімії, хімічних технологій, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі.

Знати і розуміти механізми і кінетику хімічних процесів, ефективно використовувати їх при проектуванні і вдосконаленні технологічних процесів та апаратів хімічної промисловості.

Використовувати сучасні обчислювальну техніку, спеціалізоване програмне забезпечення та інформаційні технології для розв'язання складних задач і практичних проблем у галузі хімічної інженерії, зокрема, для розрахунків устаткування і процесів хімічних виробництв.

Розуміти механізм і кінетику хімічних процесів в гетерогенних системах.

Обсяг дисципліни

Обсяг дисципліни: 3 кредити ECTS, 90 год., в т.ч. лекції – 48 год., самостійна робота – 42 год.

Індивідуальне завдання: передбачено.

Передумови вивчення дисципліни (пререквізити)

Для успішного проходження курсу необхідно мати знання та практичні навички з наступних дисциплін: "Загальна та неорганічна хімія"; "Загальна хімічна технологія"; "Фізична хімія"; "Теоретичні основи технології неорганічних речовин".

Особливості дисципліни, методи та технології навчання

Лекції проводяться з використанням мультимедійних презентацій.

Програма навчальної дисципліни

Теми лекційних занять

Тема 1. Вступ до учбової дисципліни. Мета та задачі учбової дисципліни.

Роль і місце каталітичних процесів у хімічній та нафтохімічній технологіях. Місце курсу в підготовці спеціалістів у галузі хімічної технології. Об'єм та предмет курсу. Короткі відомості щодо історії розвитку каталізу. Наукові школи по каталізу та фірми виробники каталізаторів і адсорбентів в Україні та світі.

Тема 2. Основні поняття та загальні відомості щодо каталізу.

Визначення терміну «каталіз», позитивного та від'ємного. Гомогенний та гетерогенний каталіз, приклади. Каталізатор і рівновага реакції, доказ.

Тема 3. Каталітичний процес і його стадії. Класифікація каталітичних процесів за областю протікання процесу

Визначення каталітичного процесу. Зона реакції гетерогенного каталітичного процесу. Стадії гомогенного та гетерогенного каталітичних процесів. 4. Зовнішня, внутрішня дифузії, стадії хімічного акту каталізу. Лімітуюча стадія. Класифікація гетерогенно-каталітичного процесу за областю протікання.

Тема 4. Дифузія реагуючих компонентів у шарі та зерні каталізатора.

Дифузія як один із варіантів масопереносу. Види переносу речовини всередині фази: молекулярна дифузія, конвекція, молекулярна дифузія і конвекція одночасно. Перенос речовини в рухомому середовищі. Турбулентна дифузія. Молекулярна дифузія: звичайна, з обмеженням у стисненому режимі. Закон Фіка. Рівняння швидкості молекулярної дифузії. Фізичний смисл коефіцієнта звичайної молекулярної дифузії та його залежність від характеристик компонента, який дифундує, і середовища, інших параметрів, розмірність. Межі значень коефіцієнта звичайної молекулярної дифузії. Розрахунок коефіцієнта звичайної молекулярної дифузії та ефективного коефіцієнта дифузії залежно від співвідношення розмірів діаметра пор та вільного перебігу молекул. Графіки залежності ефективних коефіцієнтів дифузії від температури.

Тема 5. Методи визначення області перебігу і шляхи прискорення гетерогенного каталітичного процесу з використанням твердофазного каталізатора.

Зовнішньо-дифузійна область. Залежність швидкості реакції від лінійної швидкості реакційного потоку. Шляхи прискорення. Внутрішньо-дифузійна область. Методи визначення, шляхи прискорення. Кінетична область. Методи визначення по залежності швидкості реакції від температури. Шляхи прискорення.

Тема 6. Швидкість каталітичної реакції.

Швидкість реакції. Вираз швидкості для некаталітичної реакції. Вивід рівняння швидкості реакції, яка перебігає в незамкнутому об'ємі. Визначення швидкості реакції за будь-яким компонентом реакції. Фіктивний та істинний час перебування; вивід рівняння для їх розрахунку. Порожність шару каталізатора; суть та рівняння розрахунку.

Тема 7. Кінетичні рівняння елементарних та неелементарних реакцій.

Аналіз кінетичних рівнянь щодо впливу парціальних тисків та загального тиску процесу на швидкість реакції. Основний закон кінетики. Використання його для виведення структури кінетичного рівняння неелементарних реакцій, приклади. Теоретичні та емпіричні кінетичні рівняння неелементарних реакцій. Етапи їх розробки. Вираз кінетичного рівняння реакції через парціальні тиски учасників реакції. Обґрунтування доцільності представлення структури кінетичних рівнянь через парціальні тиски. Поняття щодо рушійної сили процесу. Приклади аналізу кінетичного рівняння неелементарної реакції для визначення впливу парціального тиску процесу на швидкість реакції.

Тема 8. Активність контактних мас, методи її визначення. Продуктивність каталізатора, продуктивність реактора.

Активність каталізатора. Визначення активності через уявну енергію активації, по швидкості реакції, по ступеню перетворення одного з учасників реакції, через константу швидкості. Константа швидкості віднесена до одиниці по-верхні каталізатора як параметр істинної активності каталізатора. Інші вирази константи швидкості, розмірності. Питома продуктивність каталізатора, розрахунок, розмірність, залежність від параметрів процесу. Продуктивність реактору його розрахунок.

Тема 9. Короткі відомості щодо атомно-кристалічної структури твердих тіл.

Термінологія а.к.с. Сили зв'язку в металах. Схема взаємодії двох атомів метану залежно від міжатомної відстані. Схема кристалічної решітки твердого тіла та її основні параметри. Види елементарних щільно упакованих кристалічних решіток: об'ємноцентрована кубічна; гранецентрована кубічна; гексагональна щільно упакована, та значення коефіцієнта щільності. Атомно-кристалічна решітка оксидів металів та сили які обумовлюють зв'язок поміж іонами.

Тема 10. Адсорбція і каталітична реакція на поверхні твердо-фазного каталізатора.

Обґрунтування необхідності враховувати специфічний характер явищ на фазових границях: газ – тверда поверхня. Загальні положення і термінологія.

Тема 11. Види адсорбції, сили зв'язку які їх обумовлюють. Критерії, які визначають фізичну та хімічну адсорбції.

Фізична адсорбція. Види дисперсійних сил зв'язку газ – тверда по-верхня, їх внесок за фізичної адсорбції. Хімічна адсорбція. Сили які обумовлюють хімічну адсорбцію. Критерії які визначають фізичну та хімічну адсорбцію: зміна електронних характеристик по-верхні адсорбенту; енергія активації; зміна кількості адсорбованої речовини зі зміною температури адсорбції; теплота адсорбції.

Теми практичних занять

Практичні заняття не передбачені навчальним планом.

Теми лабораторних робіт

Лабораторні роботи не передбачені навчальним планом.

Самостійна робота

Самостійна робота за даною дисципліною передбачає опрацювання лекційного матеріалу, підготовку до заліку та самостійне вивчення тем та питань, які не викладаються на лекційних заняттях. Навчальним планом передбачене виконання індивідуального завдання за дисципліною.

Література та навчальні матеріали

1. Технологія неорганічних речовин. Частина 1. Технологія газів / Волошин М. Д., Шестозуб А. Б, Черненко Я. М., Зеленська Л. О. — Дніпродзержинськ : 2009. — 268 с. URL: [посилання](#) (дата звернення 24.01.2024).
2. Хімічна технологія каталізаторів та каталітичних процесів: Конспект лекцій з розділу «Технологія каталізаторів». Лабораторний практикум. : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія», спеціалізації «Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення» /уклад. Т.І. Обушенко, Ю.М. Феденко; КПІ ім. Ігоря Сікорського.– Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 300 с. URL: [посилання](#) (дата звернення 24.01.2024).
3. Каталізатори та сорбенти : навч. посібник / Я. М. Черненко, М. Д. Волошин, Л. П. Ларичева. - Кам'янське : ДДТУ, 2017. — 317 с. URL: [посилання](#) (дата звернення 24.01.2024).
4. Конспект лекцій з дисципліни „Каталізатори і сорбенти” для студентів заочної форми навчання спеціальності 8.05130101 "Хімічна технологія неорганічних речовин". / Укл.: доцент Черненко Я.М. Дніпродзержинськ, ДДТУ, 2013 . – 52 с. URL: [посилання](#) (дата звернення 24.01.2024).
5. Янчук О. М., Марчук О. В. Фізична хімія. Хімічна кінетика та каталіз. Курс лекцій для студентів факультету хімії, екології та фармації. Луцьк: ПП Іванюк В.П., 2023. – 104 с. URL: [посилання](#) (дата звернення 24.01.2024).
6. Кінетичні закономірності перебігу хімічних реакцій: навчальний посібник / А. Г. Каплаушенко, Ю. Г. Самелюк, Ю. С. Фролова. – Запоріжжя : [ЗДМФУ], 2023. - 106 с. URL: [посилання](#) (дата звернення 24.01.2024).
7. Фізична хімія. Хімічна термодинаміка [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» / уклад.: Т.А. Каменська, Г.А. Рудницька, М.Є. Пономарьов ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові данні. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. – 257 с. URL: [посилання](#) (дата звернення 24.01.2024).

Система оцінювання

Критерії оцінювання успішності студента та розподіл балів

Поточний контроль реалізується у формі опитування. Семестровий контроль проводиться у формі диференційованого заліку (з оцінкою за 100-бальною шкалою) в усній формі за контрольними запитаннями.

Шкала оцінювання

Сума балів	Національна оцінка	ECTS
90–100	Відмінно	A
82–89	Добре	B
75–81	Добре	C
64–74	Задовільно	D
60–63	Задовільно	E
35–59	Незадовільно (потрібне додаткове вивчення)	FX
1–34	Незадовільно (потрібне повторне вивчення)	F

Норми академічної етики і політика курсу

Студент повинен дотримуватися «Кодексу етики академічних взаємовідносин та доброчесності НТУ «ХПІ»: виявляти дисциплінованість, вихованість, доброзичливість, чесність, відповідальність. Конфліктні ситуації повинні відкрито обговорюватися в навчальних групах з викладачем, а при неможливості вирішення конфлікту – доводитися до відома співробітників дирекції інституту. Нормативно-правове забезпечення впровадження принципів академічної доброчесності НТУ «ХПІ» розміщено на сайті: <http://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/nv/akademichna-dobrochesnist/>

Погодження

Силабус погоджено

Дата погодження, підпис

Дата погодження, підпис

Завідувач кафедри
Валентин КАЗАКОВ

Гарант ОП
Ганна ЧЕРКАШИНА