

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«ТЮМЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор

 А.В. Толстиков

2022 г.



ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ
КАТАЛИЗ В НЕФТЕХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ
по научной специальности 1.4.12. Нефтехимия

1. Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине

№ п/п	Темы дисциплины (модуля) / Разделы (этапы) практики в ходе текущего контроля, вид промежуточной аттестации (зачет, экзамен, с указанием семестра)	Код и содержание компетенции (или ее части)	Оценочные материалы (виды и количество)
1.	Феноменология катализа	ПК-14 способность использовать современную научную аппаратуру и методы, используемые при выполнении научных исследований в области нефтехимии (элементный анализ, газовая и жидкостная хроматография, ИК-, УФ-, ЯМР-спектроскопия и масс-спектрометрия, каталитические установки, методы математического моделирования и статистической обработки данных)	Устный ответ, собеседование.
2.	Теоретические модели катализа		Устный ответ, собеседование. Реферат
3.	Структура катализаторов и методы ее анализа		Устный ответ, собеседование. Подготовка к практическим занятиям.
4.	Катализаторы и каталитические процессы в современной нефтехимии		Устный ответ, собеседование. Подготовка к практическим занятиям.
5.	Методы приготовления гетерогенных катализаторов		Устный ответ, собеседование. Подготовка к практическим занятиям.
6.	Консультация перед зачетом		Собеседование
7.	Дифференцированный зачет (4 семестр)		Ответы на вопросы

2. Виды и характеристика оценочных средств

Устный опрос проводится по теоретическому материалу на практических занятиях. Может проводиться в форме индивидуального собеседования или собеседования в малых группах по вопросам.

Реферат представляет собой краткое изложение содержания научных трудов, литературы по определенной научной теме, материалов правоприменительной практики. Объем реферата может достигать 10-15 стр.; время, отводимое на его подготовку – от 2 недель до месяца. Подготовка реферата подразумевает самостоятельное изучение аспирантом нескольких литературных источников (монографий, научных статей и т.д.) и материалов правоприменительной практики по определённым вопросам, не рассматриваемым подробно на практическом занятии, систематизацию материала и краткое его изложение. Цель написания реферата – привитие аспиранту навыков краткого и лаконичного представления собранных материалов и фактов в соответствии с требованиями, предъявляемыми к научным отчетам, обзорам и статьям. За время изучения курса аспирант представляет один реферат по предлагаемой теме (из примерного перечня)

или формулирует тему самостоятельно, при одобрении темы преподавателем. Контроль – представление реферата.

Зачет проводится в форме собеседования по заранее определенным вопросам. Собеседование имеет целью выявление уровня освоения дисциплины, характеризующего знания обучающегося в соответствии с определенными компетенциями.

3. Оценочные средства

Оценочное средство 1. Устный опрос

Проводится по теоретическому материалу на практических занятиях. Для подготовки необходимо проработать лекцию и прочитать рекомендуемую литературу по теме. Устный опрос может проводиться в форме индивидуального собеседования или собеседования в малых группах по вопросам.

Тема 1. Феноменология катализа

Внешние проявления каталитических эффектов в области стехиометрии и механизма, энергетических эффектов и характеристик, кинетике химических превращений. Условия проявления каталитических эффектов. Ограничения явления катализа.

Вопросы к практическим занятиям.

Методы описания катализаторов и каталитических реакций. Схемы каталитических реакций. Каталитические циклы. Каталитическая активность и способы ее количественного выражения. Методы измерения активности. Избирательность и специфичность катализаторов, их типы и методы количественного выражения. Селективность каталитических реакций и селективность катализаторов, их типы и методы количественного выражения.

Методы глобального описания: оператор эволюции и релаксационное уравнение. Спектр релаксации. Элементарные релаксаторы.

Тема 2. Теоретические модели катализа

Локальные и глобальные подходы к задаче описания каталитических явлений. Сравнительный анализ их особенностей, преимуществ и недостатков.

Химические теории катализа. Химическое взаимодействие "субстрат – катализатор", его особенности. Активные центры катализатора, их типы и строение. Каталитические комплексы, их типы, особенности химических связей в каталитических комплексах. Принципы соответствия: электронного, энергетического и геометрического.

Вопросы к практическим занятиям.

Физические теории катализа. Энергетическое взаимодействие "субстрат – катализатор". Деформационный и резонансный типы каталитического действия. Проблема энергетической регенерации катализатора. Рекуперация энергии в каталитических реакциях. Квантово-механическая точка зрения на катализ. Адиабатические и неадиабатические процессы. Разрешенные и запрещенные элементарные химические акты. Правила отбора в синхронных реакциях (симметрия и законы сохранения). Методы снятия запретов. Катализ как релаксационное явление. Релаксация неравновесных систем. Динамические режимы и переходы между ними: критический характер, влияние внешних и внутренних факторов.

Теория катализаторов. Корреляции каталитических свойств веществ с их химическим составом и строением. Методы рационального подбора катализаторов.

Тема 3. Структура катализаторов и методы ее анализа

Химический анализ молекулярных и каркасных катализаторов.

Методы исследования поверхности гетерогенных катализаторов: измерение площади поверхности, измерение поровой структуры, определение кислотно-основных свойств поверхности, определение окислительно-восстановительных свойств поверхности.

Вопросы к практическим занятиям.

Инструментальные методы исследования гетерогенных катализаторов: ИК- и УФ-спектроскопия, рентгеновская спектроскопия, фотоэлектронная спектроскопия, электронно-микроскопические методы.

Тема 4. Катализаторы и каталитические процессы в современной нефтехимии

Гомогенный катализ и его основные особенности. Гомогенные каталитические системы. Гомогенные катализаторы, их типы и строение. Молекулярный характер гомогенных катализаторов.

Газофазный гомогенный катализ. Газообразные системы и каталитические реакции. Примеры газофазного катализа. Механизм каталитического действия.

Жидкофазный гомогенный катализ. Кислотно-основный катализ в растворах. Катализаторы, природа каталитического действия. Типы химических реакций. Примеры каталитических процессов. Металлокомплексный катализ. Комплексы переходных металлов, особенности их состава и строения. Стадии каталитического процесса с участием КПМ, каталитические циклы. Принципы соответствия в металлокомплексном катализе. Примеры реакций: гидрирование, окисление, гидроформилирование, изомеризация.

Гетерогенный металлокомплексный катализ. Гетерогенизация КПМ на твердых носителях. Способы гетерогенизации. Основные особенности строения и каталитического действия гетерогенизированных КПМ.

Гетерогенный катализ и его основные особенности (многофазность и наличие межфазных границ, градиенты концентрации и температуры, процессы переноса вещества и энергии). Типы гетерогенных катализаторов, их особенности. Химический состав (металлы и сплавы, бинарные соединения, сложные соединения, смеси и композиции), физическое строение (тип каркаса или решетки, пористость, величина, строение и текстура поверхности, дефекты состава и структуры), геометрия (межатомные расстояния, тип кристаллической ячейки, размеры и форма кристаллитов, зерен, пор, глобул), электронно-энергетические характеристики (проводники, полупроводники и изоляторы, энергия выхода электронов, теплопроводность, поверхностная энергия, наличие неравновесных и метастабильных структур).

Тема 5. Методы приготовления гетерогенных катализаторов

Методы приготовления гетерогенных катализаторов. Химический синтез, введение добавок (промоторы, сокатализаторы, протекторы), формирование физической структуры, тренировка. Эволюция гетерогенных катализаторов в ходе реакции: явления отравления и разработки, их причины, методы стабилизации и регенерации гетерогенных катализаторов.

Вопросы к практическим занятиям.

Основные стадии гетерогенно-каталитической реакции: диффузия (типы диффузии, кинетические области и кривая Зельдовича, переходы между кинетическими и диффузионными областями), адсорбция (адсорбционно-десорбционное равновесие, его параметры — адсорбционные коэффициенты, теплота адсорбции и др., физическая и химическая адсорбция, конкурентная адсорбция, адсорбированное состояние вещества и его реакционная способность), химические превращения на поверхности (латеральная диффузия и столкновения, типы кинетических механизмов на поверхности, ударные механизмы), принципы соответствия в гетерогенном катализе.

Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Статические и проточные установки. Особенности кинетики в статических установках, учет перемешивания. Особенности кинетики в проточных системах. Кинетические режимы. Стационарные и нестационарные режимы, автоколебания.

Ферментативный катализ. Строение молекул фермента. Особенности взаимодействия в каталитическом комплексе «субстрат — фермент». Основные особенности кинетики ферментативных реакций. Имобилизация ферментов.

Мицеллярный катализ. Поверхностно-активные вещества. Мицеллообразование в водных и органических средах. Распределение реагентов в мицеллярном растворе. Природа каталитического эффекта. Области применения мицеллярного катализа.

Межфазный катализ. Особенности химических реакций в многофазных системах. Процессы переноса через поверхности раздела фаз. Катализаторы-переносчики, механизм их действия.

Оценочное средство 2. Реферат

Примерная тематика рефератов

1. Химические теории катализа
2. Физические теории катализа
3. Методы описания характеристик катализаторов и каталитических реакций
4. Каркасные гетерогенные катализаторы: строение и применение
5. Нанесенные металлические гетерогенные катализаторы: строение и применение
6. Металлокомплексные катализаторы: строение и применение
7. Ферменты: строение и применение
8. Катализаторы межфазного переноса: строение и применение
9. Основные каталитические процессы: крекинг, пиролиз, гидроформилирование, изомеризация, алкилирование, полимеризация, окисление, метатезис, риформинг.

Оценочное средство 3. Вопросы к зачету

Перечень контрольных вопросов для зачета

1. Феноменология катализа. Внешние проявления каталитических эффектов в области стехиометрии и механизма, энергетических эффектов и характеристик, кинетике химических превращений. Условия проявления каталитических эффектов.
2. Методы описания катализаторов и каталитических реакций. Схемы каталитических реакций. Каталитические циклы. Каталитическая активность и способы ее количественного выражения. Методы измерения активности. Избирательность и специфичность катализаторов, их типы и методы количественного выражения. Селективность каталитических реакций и селективность катализаторов, их типы и методы количественного выражения.
3. Теоретические модели катализа. Локальные и глобальные подходы к задаче описания каталитических явлений. Сравнительный анализ их особенностей, преимуществ и недостатков.
4. Химические теории катализа. Химическое взаимодействие "субстрат – катализатор", его особенности. Активные центры катализатора, их типы и строение. Каталитические комплексы, их типы, особенности химических связей в каталитических комплексах. Принципы соответствия: электронного, энергетического и геометрического.
5. Физические теории катализа. Энергетическое взаимодействие "субстрат – катализатор". Деформационный и резонансный типы каталитического действия. Проблема энергетической регенерации катализатора. Рекуперация энергии в каталитических реакциях.
6. Квантово-механическая точка зрения на катализ. Адиабатические и неадиабатические процессы. Разрешенные и запрещенные элементарные химические акты. Правила отбора в синхронных реакциях (симметрия и законы сохранения). Методы снятия запретов.
7. Катализ как релаксационное явление. Релаксация неравновесных систем. Динамические режимы и переходы между ними: критический характер, влияние внешних и внутренних факторов.

8. Теория катализаторов. Корреляции каталитических свойств веществ с их химическим составом и строением. Методы рационального подбора катализаторов.
9. Методы исследования поверхности гетерогенных катализаторов: измерение площади поверхности, измерение поровой структуры, определение кислотно-основных свойств поверхности, определение окислительно-восстановительных свойств поверхности.
10. Инструментальные методы исследования гетерогенных катализаторов: ИК- и УФ-спектроскопия, рентгеновская спектроскопия, фотоэлектронная спектроскопия, электронно-микроскопические методы.
11. Гомогенный катализ и его основные особенности. Гомогенные каталитические системы. Гомогенные катализаторы, их типы и строение. Молекулярный характер гомогенных катализаторов. Газофазный гомогенный катализ. Газообразные системы и каталитические реакции. Примеры газофазного катализа. Механизм каталитического действия. Жидкофазный гомогенный катализ. Кислотно-основный катализ в растворах. Катализаторы, природа каталитического действия. Типы химических реакций. Примеры каталитических процессов. Металлокомплексный катализ. Комплексы переходных металлов, особенности их состава и строения. Стадии каталитического процесса с участием КПП, каталитические циклы. Принципы соответствия в металлокомплексном катализе. Примеры реакций: гидрирование, окисление, гидроформилирование, изомеризация.
12. Гетерогенный металлокомплексный катализ. Гетерогенизация КПП на твердых носителях. Способы гетерогенизации. Основные особенности строения и каталитического действия гетерогенизированных КПП.
13. Гетерогенный катализ и его основные особенности (многофазность и наличие межфазных границ, градиенты концентрации и температуры, процессы переноса вещества и энергии).
14. Типы гетерогенных катализаторов, их особенности. Химический состав (металлы и сплавы, бинарные соединения, сложные соединения, смеси и композиции), физическое строение (тип каркаса или решетки, пористость, величина, строение и текстура поверхности, дефекты состава и структуры), геометрия (межатомные расстояния, тип кристаллической ячейки, размеры и форма кристаллитов, зерен, пор, глобул), электронно-энергетические характеристики (проводники, полупроводники и изоляторы, энергия выхода электронов, теплопроводность, поверхностная энергия, наличие неравновесных и метастабильных структур).
15. Методы приготовления гетерогенных катализаторов. Химический синтез, введение добавок (промоторы, сокатализаторы, протекторы), формирование физической структуры, тренировка. Эволюция гетерогенных катализаторов в ходе реакции: явления отравления и разработки, их причины, методы стабилизации и регенерации гетерогенных катализаторов.
16. Основные стадии гетерогенно-каталитической реакции: диффузия (типы диффузии, кинетические области и кривая Зельдовича, переходы между кинетическими и диффузионными областями), адсорбция (адсорбционно-десорбционное равновесие, его параметры — адсорбционные коэффициенты, теплота адсорбции и др., физическая и химическая адсорбция, конкурентная адсорбция, адсорбированное состояние вещества и его реакционная способность), химические превращения на поверхности (латеральная диффузия и столкновения, типы кинетических механизмов на поверхности, ударные механизмы).
17. Принципы соответствия в гетерогенном катализе.
18. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Статические и проточные установки. Особенности кинетики в статических установках, учет перемешивания. Особенности кинетики в проточных системах. Кинетические режимы. Стационарные и нестационарные режимы, автоколебания.

19. Ферментативный катализ. Строение молекул фермента. Особенности взаимодействия в каталитическом комплексе «субстрат — фермент». Основные особенности кинетики ферментативных реакций. Иммуобилизация ферментов.

20. Мицеллярный катализ. Поверхностно-активные вещества. Мицеллообразование в водных и органических средах. Распределение реагентов в мицеллярном растворе. Природа каталитического эффекта. Области применения мицеллярного катализа.

21. Межфазный катализ. Особенности химических реакций в многофазных системах. Процессы переноса через поверхности раздела фаз. Катализаторы-переносчики, механизм их действия.