



Теорія адсорбції і каталізу

Робоча програма освітньої компоненти (Силабус)

Реквізити освітньої компоненти

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	<i>16 Хімічна інженерія та біоінженерія</i>
Спеціальність	<i>161 Хімічні технології та інженерія</i>
Освітня програма	<i>ОНП «Хімічні технології та інженерія»</i>
Статус освітньої компоненти	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>Очна (денна)/змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, весняний семестр</i>
Обсяг освітньої компоненти	<i>4 кредити, 120 год. (Лекції 18 год., комп'ютерний практикум 36 год., СРС 66 год.)</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік/МКР, ДКР</i>
Розклад занять	<i>Лекція 1 години на тиждень (1 пара на 2 тижня), лабораторні (комп'ютерний практикум) 2 години на тиждень (1 пара) за розкладом на roz.kpi.ua</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор: к.т.н., доцент Концевой Андрій Леонідович, kontsev@xtf.kpi.ua ¹ Комп'ютерний практикум: к.т.н., доцент Концевой Сергій Андрійович, serkon157@ukr.net.</i>

Програма освітньої компоненти

1. Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Адсорбція широко використовується для очищення газів і води, водних та неводних розчинів. Адсорбція реагентів і продуктів є обов'язковою стадією гетерогенно-каталітичних процесів. Теорія і практика гетерогенного каталізу передбачає вивчення методів визначення стадій каталітичного процесу, що гальмують процес, і вибору відповідних рівнянь кінетики – саме це дозволяє правильно застосовувати технологічні важелі для інтенсифікації каталітичних процесів. Модуль «Теорія адсорбції і каталізу» сприятиме опануванню термодинаміки (статики), кінетики і динаміки адсорбційних процесів, основних механізмів і відповідних рівнянь хімічної кінетики, основних законів дифузійної макрокінетики. Отриманні знання закріплюються при виконанні завдань комп'ютерного практикуму і домашньої контрольної роботи розрахункового характеру, що розвине у студентів вміння визначати параметри рівнянь статики, кінетики і динаміки адсорбційних процесів, розраховувати рівновагу складних хімічних реакцій, складати кінетичні рівняння каталітичних процесів і розраховувати кінетичні параметри, робити розрахунки дифузійних стадій каталітичних процесів, виконувати інтегрування складних кінетичних рівнянь –

¹ Електронна пошта викладача або інші контакти для зворотного зв'язку, можливо зазначити прийомні години або години для комунікації у разі зазначення контактних телефонів. Для силабусу дисципліни, яку викладає багато викладачів (наприклад, історія, філософія тощо) можна зазначити сторінку сайту де представлено контактну інформацію викладачів для відповідних груп, факультетів, інститутів.

математичних моделей каталітичних реакторів. Реалізація розрахунків передбачена у середовищі Excel і/або пакеті MathCAD.

Метою освітньої компоненти є формування у студентів здатностей:

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК02. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК03. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК04. Здатність оцінювати і адаптувати освоєні наукові методи і способи діяльності до умов сталого розвитку.

Фахові компетентності:

ФК04. Здатність використовувати сучасне спеціальне наукове обладнання та програмне забезпечення при проведенні експериментальних досліджень і здійсненні дослідно конструкторських розробок у сфері хімічних технологій та інженерії.

Програмні результати навчання:

ПРН01. Критично осмислювати наукові концепції та сучасні теорії хімічних процесів та хімічної інженерії, застосовувати їх при проведенні наукових досліджень та створенні інновацій.

ПРН02. Здійснювати пошук необхідної інформації з хімічної технології, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, аналізувати та оцінювати відповідну інформацію.

ПРН08. Застосовувати передові знання сучасних концепцій, практик та методів для вдосконалення існуючих матеріалів та функціональних покриттів для визначення та прогнозування ключових параметрів і властивостей нових матеріалів та функціональних покриттів, в умовах лабораторії або виробництва

ПРН13. Вирішувати проблеми в області хімічної технології та інженерії як за стандартними підходами, так й власними оригінальними методиками.

Після засвоєння освітньої компоненти студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

ЗНАННЯ:

- теорії адсорбційних процесів – статичні (рівноваги), кінетики і динаміки;
- теорій гетерогенного каталізу, передбачення каталітичної дії;
- основних механізмів перебігу гетерогенно-каталітичних процесів;
- складання рівнянь кінетики за законом діючих поверхонь Ленгмюра-Хіншельвуда;
- основних законів макрокінетики – перебігу процесу у зовнішньо і внутрішньо дифузійній області;
- методів вирішення на ПК розрахункових задач з адсорбції і каталізу.

УМІННЯ:

- обробляти на ПК результати адсорбційних досліджень – мономолекулярна і полімолекулярна адсорбція, капілярна конденсація;
- складати кінетичні рівняння каталітичних процесів згідно з механізмами їх перебігу;
- розраховувати на ПК рівновагу складних каталітичних реакцій;
- виконувати на ПК кінетичні розрахунки промислових реакторів;
- робити розрахунки дифузійних стадій каталітичних процесів;
- складати матеріальні і теплові баланси каталітичних реакторів.

досвід:

асоціативного використання фахових знань і умінь для виконання комп'ютерних розрахунків адсорбційних та каталітичних процесів.

2. Пререквізити та постреквізити освітньої компоненти (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою компонентою)

Навчальний матеріал освітньої компоненти «Теорія адсорбції і каталізу» базується на знаннях, отриманих при навчанні за ОПП Бакалавра.

Освітні компоненти, які базуються на результатах навчання: переддипломна практика, виконання магістерської дисертації.

3. Зміст освітньої компоненти

Тема 1. Статика, кінетика і механізми адсорбційних процесів

Класифікація каталітичних процесів. Стадії гетерогенного каталізу. Основні поняття каталізу. Питома каталітична активність. Роль хімічного складу каталізатору і реакційного середовища. Дезактивація каталізаторів. Адсорбція і кінетика на ідеальній однорідній поверхні. Фізична адсорбція і хемосорбція. Ізотерми і ізобари адсорбції. Рівняння Ленгмюра і БЕТ. Капілярна конденсація. Рівняння Кельвіна. Механізм хімічної адсорбції. Статика і кінетика адсорбції. Типи ізотерм адсорбції в залежності від моделі поруваної структури. Адсорбція газових сумішей. Теплота адсорбції: інтегральна, диференціальна, ізостерна. Методи визначення теплоти адсорбції. Взаємодія реакційного середовища з каталізатором. Активована адсорбція. Використання рівняння Кельвіна для побудови залежності об'єму пор від розміру пори.

Тема 2 Кінетика і механізми каталітичних процесів

Кінетика гетерогенних каталітичних реакцій на однорідній поверхні. Закон діючих поверхонь. Кінетика Ленгмюра-Хіншельвуда. Спостережна енергія активації і порядок реакції. Передбачення каталітичної дії: теорії гетерогенного каталізу Баландіна та Борескова. Передбачення каталітичної дії: теорії гетерогенного каталізу Рогинського та Волькенштейна. Вплив механізму реакції на вид кінетичного рівняння: адсорбція продуктів реакції, ударний механізм Ріділа, дисоціативна адсорбція.

Рівняння складної каталітичної реакції: оборотної, паралельної, послідовної. Кінетика реакцій на каталізаторах з активністю, що змінюється: самоотруєння, отруєння, блокування, старіння.

Рівняння швидкості гомогенного каталітичного процесу.

Тема 3. Дифузійна кінетика каталітичних процесів

Порувата структура і поверхня каталізаторів. Вплив процесів переносу речовини і теплоти на хід гетерогенної каталітичної реакції. Области проходження процесу: зовнішньо дифузійна і внутрішньо дифузійна. Кінетика процесу в зовнішньодифузійній області. Вплив основних технологічних параметрів на проходження процесу. Розрахунок коефіцієнту масовіддачі за критеріальними рівняннями.

Кінетика процесу в внутрішньо дифузійній області. Перший закон Фіка. Дифузія молекулярна і за механізмом Кнудсена, залежність коефіцієнтів дифузії від параметрів каталізатору і процесу. Ефективний коефіцієнт дифузії. Квазігомогенна модель гранули каталізатору.

Визначення області протікання процесу: вплив температури, лінійної швидкості, розміру гранули каталізатору.

Розрахунок градієнту концентрації в гранулі каталізатора за другим законом Фіка. Аналіз рівняння швидкості процесу: значення енергії активації і порядку реакції. Ступінь використання внутрішньої поверхні. Параметр Тіле. Оптимальний розмір гранули каталізатора. Стаціонарний та нестаціонарний каталіз.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету, електронному кампусі КПІ та на сервері кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології та розміщені на електронному ресурсі ELAKPI. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

Базова:

- 1. Теорія адсорбції і каталізу: Курс лекцій. Комп'ютерний практикум. Домашня контрольна робота [Електронний ресурс] : навч. посіб. для здобувачів ступеня магістра за освітньою програмою «Хімічні технології та інженерія» спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» / А. Л. Концевой, С.А. Концевой ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові данні (1 файл: 12 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. – 262 с.*

Додаткова

- 2. Хімічна технологія каталізаторів та каталітичних процесів: Курс лекцій з розділу «Кінетика і макрокінетика гетерогенно-каталітичних процесів». Практикум. Розрахункова робота [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія», спеціалізації «Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення» / А. Л. Концевой ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові данні (1 файл: 10,16 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 183 с.*
- 3. Комп'ютерні технології у процесах неорганічних виробництв [Електронний ресурс] : підручник для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія», освітня програма «Хімічні технології неорганічних, електродних матеріалів та водоочищення» / А. Л. Концевой, С. А. Концевой ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові данні (1 файл: 4,8 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. – 238 с.*

Навчальний контент

5. Методика опанування освітньої компоненти

Лекційні заняття

Вичитування лекцій з освітньої компоненти проводиться паралельно з виконанням студентами лабораторного (комп'ютерного) практикуму з розглядом питань, що виносяться на самостійну роботу. Під час читання лекцій застосовуються засоби для відеоконференцій Zoom та відео лекцій, розміщених на ютубі. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

№ з/п	Назва теми лекції та перелік основних питань
1	<i>Тема 1 Статика, кінетика і механізми адсорбційних процесів Класифікація каталітичних процесів. Стадії гетерогенного каталізу. Основні поняття каталізу. Питома каталітична активність. Роль хімічного складу каталізатору і реакційного середовища. Дезактивація каталізаторів. Адсорбція і кінетика на ідеальній однорідній поверхні. Фізична адсорбція і хемосорбція. Ізотерми і ізобари адсорбції. Рівняння Ленгмюра і БЕТ. Капілярна конденсація. Рівняння Кельвіна. Механізм хімічної адсорбції. Статика, кінетика і</i>

	<i>динаміка адсорбції.</i>
2	<i>Адсорбція газових сумішей. Теплота адсорбції: інтегральна, диференціальна, ізостерна. Методи визначення теплоти адсорбції. Взаємодія реакційного середовища з каталізатором. Активована адсорбція.</i>
3	<i>Тема 2 Кінетика і механізми каталітичних процесів Кінетика гетерогенних каталітичних реакцій на однорідній поверхні. Закон діючих поверхонь. Кінетика Ленгмюра-Хіншельвуда. Спостережна енергія активації і порядок реакції.</i>
4	<i>Вплив механізму реакції на вид кінетичного рівняння: адсорбція продуктів реакції, ударний механізм Ріділа, дисоціативна адсорбція вихідного газу.</i>
5	<i>Рівняння складної каталітичної реакції: оборотної, паралельної, послідовної. Кінетика реакцій на каталізаторах з активністю, що змінюється: самоотруєння, отруєння, блокування, старіння. Механізми гомогенних каталітичних реакцій. Рівняння швидкості</i>
6	<i>Тема 3. Дифузійна кінетика каталітичних процесів Порувата структура і поверхня каталізаторів. Вплив процесів переносу речовини і теплоти на хід гетерогенної каталітичної реакції. Области проходження процесу: зовнішньодифузійна і внутрішньодифузійна. Кінетика процесу в зовнішньо дифузійній області. Вплив основних технологічних параметрів на проходження процесу. Розрахунок коефіцієнту масовіддачі за критеріальними рівняннями.</i>
7	<i>Кінетика процесу в внутрішньо дифузійній області. Перший закон Фіка. Дифузія молекулярна і за механізмом Кнудсена. Квазігомогенна модель гранули каталізатору. Ефективний коефіцієнт дифузії.</i>
8	<i>Розрахунок градієнту концентрації в гранулі каталізатора за другим законом Фіка. Аналіз рівняння швидкості процесу: значення енергії активації і порядку реакції. Ступінь використання внутрішньої поверхні. Параметр Тіле. Оптимальний розмір гранули каталізатора.</i>
9	<i>Стаціонарний та нестаціонарний каталіз. Аналіз рівняння швидкості для реакції першого порядку Модульна контрольна робота.</i>

Комп'ютерний практикум

Основною метою комп'ютерного практикуму є навчання студентів використовувати теоретичні знання, набуті на лекціях і під час самостійної роботи, для вирішення конкретних практичних завдань з фахового напрямку, набуття студентами вмій і навичок проведення технологічних розрахунків. При цьому одночасно ставиться за мету поглиблення теоретичних знань при усвідомленні студентами методики застосування цих знань для розрахункового обґрунтування реальних рішень.

№ з/п	Тема заняття
1	<i>Вступне заняття. Обробка адсорбційних даних (ізотерм адсорбції). Розрахунок питомої поверхні за рівняннями Ленгмюра і БЕТ. Визначення параметрів пористої структури за рівнянням Кельвіна.</i>
2	<i>Розрахунки адсорбційних процесів в середовищі Excel – статика і динаміка адсорбції.</i>
3	<i>Розрахунки адсорбційних процесів засобами MathCAD – статика і динаміка адсорбції.</i>
4	<i>Розрахунок кінетичних параметрів адсорбційного процесу в середовищі Excel.</i>
5	<i>Розрахунок каталітичних процесів, що перебігають у кінетичній області. Визначення кінетичних параметрів за заданими механізмами в середовищі Excel.</i>
6	<i>Розрахунок густини, в'язкості, теплопровідності, коефіцієнта дифузії індивідуальних газів та їх суміші в середовищі Excel.</i>
7	<i>Розрахунок каталітичних процесів, що перебігають у зовнішньо дифузійній</i>

	<i>області, в середовищі Excel на прикладі окиснення аміаку.</i>
8-11	<i>Розрахунок рівноваги каталітичних процесів на прикладах парової і пароповітряної конверсії метану, синтезів аміаку і метанолу засобами MathCAD.</i>
12-16	<i>Розрахунок каталітичних процесів, що перебігають у внутрішньо дифузійній області, засобами MathCAD на прикладах парової і пароповітряної конверсії метану, парової конверсії оксиду (II) карбону, синтезів аміаку і метанолу, окиснення SO₂ в SO₃ засобами MathCAD</i>
17	<i>Розрахунок теплообміну в багато полицних каталітичних реакторах засобами MathCAD.</i>
18	<i>Заключне заняття. Захист програмних продуктів. Ознайомлення з підсумковим результатом. Прийняття підсумкових рішень.</i>

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студента (СРС) в обсязі 66 годин протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків комп'ютерного практикуму, виконання домашньої контрольної роботи (ДКР), підготовка до модульної контрольної роботи (МКР). Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

<i>Вид СРС</i>	<i>Кількість годин на підготовку</i>
<i>Підготовка до комп'ютерного практикуму: повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків та їх доопрацювання після занять</i>	<i>46 години</i>
<i>Виконання ДКР</i>	<i>12 годин</i>
<i>Підготовка до МКР</i>	<i>2 години</i>
<i>Підготовка до заліку</i>	<i>6 годин</i>

8. Індивідуальні завдання

Для більш ґрунтовного опанування програмного матеріалу освітньої компоненти студенти одержує індивідуальне завдання на домашню контрольну роботу за темами (варіанти виконання визначає викладач): 1.Розрахунки каталітичного реактору (назва за завданням викладача). 2. Розрахунки з виробництва залізо-хромового каталізатору конверсії СО. Ціллю індивідуального завдання є стимулювання студентів до самостійного осмислення теоретичного матеріалу і результатів розрахунків, самостійного виконання матеріальних, теплових і конструктивних розрахунків, вдосконалення вміння пошуку та аналізу інформації з програмного матеріалу (в т. ч. з використанням мережі Internet) і творчого, продуктивного, обґрунтованого рішення індивідуального завдання, що максимально наближена до реальних виробничих проблем.

Політика та контроль

7. Політика освітньої компоненти

У звичайному режимі роботи університету лекції та лабораторні роботи (комп'ютерний практикум) проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні та комп'ютерні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський. У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу дистанційного навчання

Сікорський. Відвідування лекцій та комп'ютерного практикуму є обов'язковим. На початку кожної лекції проводиться опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів (Google Forms, Classtime тощо) або у письмовому вигляді. Перед початком чергової теми лектор може надсилати питання із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою та підвищення зацікавленості.

У ході виконання всіх завдань комп'ютерного практикуму студент створює власний програмний продукт, що надсилається на електронну пошту викладача для перевірки і зберігання

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

1. Поточний контроль: опитування на лекціях, оцінка рівня виконання завдань комп'ютерного практикуму і МКР, захист ДКР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.
3. Семестровий контроль: залік.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

Рейтинг студента складається з балів, що він отримує за:

- 1) роботу на 16 комп'ютерних заняттях;
- 2) виконання та захист ДКР;
- 3) модульну контрольну роботу.

1 Робота на комп'ютерних заняттях:

Ваговий бал за виконання завдання комп'ютерного практикуму становить 5 балів. Кількість тематичних занять з виконання завдань – 16. Максимальна кількість балів на усіх заняттях дорівнює: 80 балів.

Критерії оцінювання:

5 балів: безпомилкове виконання та оформлення завдання під час поточного заняття або до кінця дня;

4 бали: вірно в цілому виконання з незначними недоліками в оформленні, або помилковим виконанням окремих елементів роботи, здача роботи під час наступного заняття;

3 бали: вірно виконання роботи після навідної допомоги викладача або проведення роботи зі значущими помилками, які підлягають виправленню; здача роботи під час наступного заняття;

2 бали: неповне виконання завдання викладача або проведення роботи з грубими помилками, що підлягають не виправленню, а переробки завдання; здача роботи впродовж семестру;

0 балів: використання матеріалів інших студентів (списування).

3. Домашня контрольна робота

Ваговий бал – 10

Критерії оцінювання:

- своєчасне безпомилкове виконання та оформлення всіх завдань – 10 балів;
- своєчасне вірне в цілому рішення з незначними недоліками в оформленні, або похибками окремих елементів розрахунку – 9 балів;
- виконання вірних розрахунків після навідної допомоги викладача або проведення розрахунків зі значущими помилками, які підлягають виправленню – 8 балів;
- Несвоєчасне виконання вірних розрахунків після навідної допомоги викладача або проведення розрахунків зі значущими помилками, які підлягають виправленню – 7 балів;
- Невиконання або плагіат – 0 балів.

4 Модульна контрольна робота (МКР)

Максимальна кількість балів за модульну контрольну роботу тривалістю 1 година становить 10. Можливі 2 варіанти проведення МКР.

1. При проведенні МКР у дистанційному режимі використовується тестова система оцінки знань. Результат визначається відношенням кількості правильних відповідей студента N до їхньої максимальної кількості N_m : оцінка $= 5 * N / N_m$.
2. Нарахування балів за письмову МКР здійснюється за наступними критеріями.
 - повна відповідь (не менше 95% потрібної інформації) – 10 балів;
 - достатньо повна відповідь (не менше 85% потрібної інформації), або повна відповідь з незначними неточностями – 8 балів;
 - достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), або повна відповідь з незначними неточностями – 6 балів;
 - неповна відповідь (не менше 65% потрібної інформації) та незначні помилки – 4 бали;
 - неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 2 бал;
 - списування (плагіат) під час контрольної, відмова від виконання контрольної роботи – 0 балів.

Заохочувальні бали за:

1. За модернізацію робіт нараховується від 1 до 3 заохочувальних балів;
2. За виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з дисципліни нараховується від 1 до 3 заохочувальних балів;

Максимальна сума балів стартової складової дорівнює 40 балів

$$R_c = 80 + 10 + 10 = 100$$

Необхідною умовою отримання заліку є зарахування модульної контрольної роботи, виконання і захист ДКР, виконання всіх завдань комп'ютерного практикуму.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з освітньої компоненти

- Вимоги до оформлення ДКР, перелік запитань до МКР надаються студентам у файловому виді на пошту групи і аналізуються під час лекцій.

Робочу програму освітньої компоненти (силабус):

Склали:

доцент кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології к.т.н. доц. Концевой А.Л.

доцент кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології к.т.н. доц. Концевой С.А.

Ухвалено кафедрою ТНРВ та ЗХТ (протокол №27 від 24.06.2024)

Погоджено Методичною комісією ХТФ (протокол №10 від 21.06.2024)