

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ  
ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный  
исследовательский государственный университет"**

**Факультет естественных наук**

УТВЕРЖДАЮ



Декан ФЕН НГУ, профессор

Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

**ТЕРМОДИНАМИКА ФУНКЦИОНИРУЮЩЕГО  
КАТАЛИЗАТОРА**

**Программа лекционного курса и самостоятельной работы студентов**

Курс 4-й, VIII семестр

Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов IV курса факультета естественных наук, направление подготовки 020201 «Фундаментальная и прикладная химия (специалист)». В состав пособия включены: программа курса лекций, программа самостоятельной работы студента, структура курса, условия сдачи дифференцированного зачета. Кроме того, приведены примеры задач, предлагаемых на зачете, примеры теоретических вопросов, задаваемых на зачете, примеры экзаменационных билетов, перечень рекомендуемой литературы.

Составитель

Пармон В.Н., акад., д.х.н., проф.

© Новосибирский государственный университет, 2014

## **Содержание**

Аннотация рабочей программы	4
<b>1. Цели освоения дисциплины</b>	<b>5</b>
<b>2. Место дисциплины в структуре ООП</b>	<b>5</b>
<b>3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины</b>	<b>5</b>
<b>4. Структура и содержание дисциплины</b>	<b>6</b>
<b>5. Образовательные технологии</b>	<b>9</b>
<b>6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины</b>	<b>8</b>
<b>7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины</b>	<b>13</b>
<b>8. Материально-техническое обеспечение дисциплины</b>	<b>14</b>

## Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Термодинамика функционирующего катализатора» относится к вариативной части профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020201 Фундаментальная и прикладная химия» (квалификация (степень) специалист). Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой адсорбции и катализа.

Содержание дисциплины охватывает адаптированный для студентов-химиков круг вопросов, связанных с термодинамикой функционирующего катализатора, особенностью которого является сильная неравновесность состояния, а также с термодинамикой высокодисперсных (наноразмерных) систем и поверхностных явлений в приложении к гетерогенным каталитическим системам. Студенты знакомятся с современными концепциями в области термодинамики каталитических систем и процессов с рассмотрением большого числа типичных проблем формальной химической кинетики и катализа. Демонстрируется возможность очень продуктивного применения формализма термодинамики неравновесных процессов и для анализа протекания сложных каталитических превращений вдали от термодинамического равновесия, в том числе в условиях неполной информации о механизме этих превращений.

Дисциплина нацелена на формирование общекультурных компетенций ОК-11, ОК-12, ОК-15, ОК-16; профессиональных компетенций: ПК-3, ПК-4, ПК-5, ПК-7, ПК-11, ПК-14 выпускника.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, самостоятельная работа студента, сдача письменного дифференцированного зачета.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль осуществляется путем контроля посещаемости, а также неформализованного опроса студентов по пройденным темам.

Итоговый контроль в конце семестра осуществляется путем письменного дифференцированного зачета.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетную единицу, 36 академических часов вместе с самостоятельной работой студентов и дифференцированным зачетом. Программой дисциплины предусмотрены 20 часов лекционных занятий, 16 часов самостоятельной работы студентов, включая часы на подготовку к дифференцированному зачету и сдачу зачета.

## 1. Цели освоения дисциплины

Основной целью освоения дисциплины «Термодинамика функционирующего катализатора» является получение студентами знаний о достаточно малоизученном направлении катализа – термодинамике функционирующего катализатора, интегрирующей знания о химической кинетике и «классической» равновесной термодинамике, а также широко востребованной в настоящее время термодинамике наноразмерных объектов.

В данном курсе рассматриваются основные понятия и термины современной термодинамики неравновесных процессов с рассмотрением большого числа типичных проблем формальной химической кинетики и катализа. Демонстрируется возможность очень продуктивного применения формализма термодинамики неравновесных процессов и для анализа протекания сложных каталитических превращений вдали от термодинамического равновесия, в том числе в условиях неполной информации о механизме этих превращений.

Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: ознакомление студентов с теоретическими основами и современным состоянием раздела науки «Термодинамика функционирующего катализатора»; а также освоение приемов активного использования излагаемых теоретических основ для практического использования при проведении собственных экспериментальных исследований.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Термодинамика функционирующего катализатора» относится к вариативной части профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ» (квалификация (степень) бакалавр).

Дисциплина «Термодинамика функционирующего катализатора» опирается на следующие дисциплины данной ООП:

- Физическая химия;
- Неорганическая химия;
- Органическая химия;
- Химия твердого тела.

Результаты освоения дисциплины «Термодинамика функционирующего катализатора» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- Научно-исследовательская практика;
- Итоговая государственная аттестация.

## 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Термодинамика функционирующего катализатора»:

Дисциплина нацелена на формирование **общекультурных компетенций**:

- *способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области информатики и современных информационных технологий, наличием навыков использования программных средств и работы в компьютерных сетях, умением создавать базы специальных данных и использовать ресурсы сети Интернет (ОК-11);*
- *способностью ориентироваться в создающихся условиях производственной деятельности и к адаптации в новых условиях (ОК-12);*
- *способностью самостоятельно применять методы и средства познания, обучения и самоконтроля для приобретения новых знаний и умений, в том числе в новых областях, непосредственно не связанных со сферой деятельности (ОК-15);*
- *способностью в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей (ОК-16);*

**профессиональных компетенций:**

- *способностью использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ПК-3);*

- использованием основных законов естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применением методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ПК-4);
- знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, наличием представлений о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-5);
- пониманием необходимости и способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владением ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций (ПК-7);
- знанием основ теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии) (ПК-11);
- пониманием основных химических, физических и технических аспектов химического промышленного производства с учетом сырьевых и энергетических затрат (ПК-14).

#### В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- знать основные понятия и теорию термодинамики функционирующего катализатора в рамках представленной программы, а также особенности термодинамики высокодисперсных систем и поверхностных явлений в приложении к катализу;
- уметь применять теорию термодинамики неравновесных процессов для качественного и количественного анализа протекания стационарных каталитических процессов;
- владеть навыками термодинамического анализа процессов в каталитических наноразмерных системах и на поверхностях.

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетную единицу, 36 часов.

Курс состоит из двух взаимодополняющих разделов: (1) адаптированная для химиков термодинамика неравновесных процессов и (2) термодинамика высокодисперсных систем и поверхностных явлений.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)			Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра)  Форма промежуточной аттестации
				Лекция	Самост. работа	Зачет	
1.1	Особенности функционирующего катализатора как объекта термодинамики. Неравновесность состояния катализатора в ходе каталитического процесса.	8	5	2	1		
1.2	Особенности термодинамики высокодисперсных систем в приложении к катализу.	8	5	2	1		

1.3	Особенность параметра «температура» в приложении к функционирующему катализатору	8	6	2	1		
1.4	Основные задачи физической химии в приложении к функционирующему катализатору	8	6	2	1		
1.5	Использование понятия химического потенциала для описания состояния функционирующей каталитической системы.	8	7	2	1		
1.6	Устойчивые и неустойчивые стационарные состояния катализатора.	8	7	2	1		
1.7	Микрокинетический анализ протекания каталитических процессов. Совместный кинетико-термодинамический анализ простейших схем каталитических процессов	8	8	2	1		
1.8	Применение корреляционных соотношений для анализа влияния энергетических параметров на скорость каталитических процессов	8	8	2	1		
1.9	Сопряжение каталитических процессов. Уравнения Хориути-Борескова-Онзагера для каталитических превращений с общими интермедиатами. Связь селективности многоканальных каталитических процессов с термодинамическими движущими силами в системе. Связь селективности с энергетикой процессов десорбции.	8	9	2	1		
1.10	Адсорбция как элемент гетерогенного процесса. Реконструкция катализатора под действием реакционной среды и его эволюция	8	9	2	1		
					4	2	<b>Письменный дифференцированный зачет</b>
				<b>20</b>	<b>14</b>	<b>2</b>	<b>Всего 36 час</b>

### Программа курса

1. Особенности функционирующего катализатора как объекта термодинамики. Неравновесность состояния катализатора в ходе каталитического процесса. Влияние реакционной среды и особенности термодинамического состояния катализатора и каталитических интермедиатов в ходе каталитической реакции. Равновесная и неравновесная реконструкции катализатора под действием реакционной среды.

2. Особенности термодинамики высокодисперсных систем в приложении к катализу. Избыточная поверхностная энергия и поверхностное натяжение. Равновесная форма микрочастиц, нанесенных на подложку. Смачиваемость и «сильное взаимодействие активный

компонент-подложка». Влияние диспергирования вещества на фазовые равновесия. Сегрегация составляющих компонентов в частице каталитически активного компонента. Фазовые переходы при высокой температуре функционирования катализатора. Самопроизвольное нанодиспергирование вещества катализаторов. Термодинамическая устойчивость поверхности при наличии хемосорбции. Микрофасетирование поверхности.

3. Особенность параметра «температура» в приложении к функционирующему катализатору. Возможность отличия температуры активного компонента от температуры гранулы катализатора. Методы экспериментального измерения реальной температуры активного компонента функционирующего катализатора.

4. Основные задачи физической химии в приложении к функционирующему катализатору. Каталитические реакции как сопряженные химические процессы. Микрокинетическое описание каталитических процессов. Активные центры катализатора и множественность их форм. Термодинамические движущие силы в каталитическом процессе. Термодинамическое описание брутто-реакций.

5. Использование понятия химического потенциала для описания состояния функционирующей каталитической системы. Совместный кинетико-термодинамический анализ протекания каталитической реакции и неравновесного состояния катализатора. Внешние и внутренние переменные. Каталитические интермедиаты. Скорость-определяющая стадия реакции. Кинетическая необратимость элементарных реакций и ее связь с термодинамикой.

6. Устойчивые и неустойчивые стационарные состояния катализатора. Множественность стационарных состояний. Стационарный химический потенциал каталитических интермедиатов. Термодинамические критерии достижения и устойчивости стационарных состояний. Необходимые условия для отсутствия устойчивости стационарного состояния. Проявления неравновесности для устойчивых стационарных состояний катализатора. Изменение условий сосуществования фаз в ходе химической реакции. Первичное обогащение высокоактивной фазой в ходе реакции. Равновесная и неравновесная реконструкция поверхности катализатора. Плавление активного компонента катализатора в ходе реакции за счет пересыщения интермедиатом.

7. Микрокинетический анализ протекания каталитических процессов. Совместный кинетико-термодинамический анализ простейших схем каталитических процессов. Нахождение скорость-лимитирующих стадий и скорость-определяющих параметров при стационарном протекании реакции. Зависимость стационарной скорости каталитической реакции от стандартных термодинамических характеристик промежуточных состояний. Кажущаяся энергия активации каталитического процесса. Энергетические корреляции в катализе.

8. Применение корреляционных соотношений для анализа влияния энергетических параметров на скорость каталитических процессов. Корреляция скорости кислотно-основных каталитических процессов с кислотностью активных центров. Условие максимальной активности катализатора при заданных внешних параметрах. Влияние размера активного компонента на скорость каталитической реакции. Влияние растворения одного из реагентов реакции в активном компоненте на скорость и селективность каталитической реакции. Влияние диспергирования активного компонента на скорость гетерогенной реакции с нерастворимыми компонентами.

9. Особенности применения понятия переходного состояния в катализе. Время жизни переходного состояния. Понятие реакционного комплекса.

10. Сопряжение каталитических процессов. Уравнения Хориути-Борескова-Онзагера для каталитических превращений с общими интермедиатами. Связь селективности



многоканальных каталитических процессов с термодинамическими движущими силами в системе. Связь селективности с энергетикой процессов десорбции.

11. Адсорбция как элемент гетерогенного процесса. Равновесный и неравновесный химические потенциалы сорбированных молекул. «Сильная адсорбция» и кинетическая необратимость адсорбционных процессов. Устойчивость молекулярной и островковой адсорбции.

12. Неустойчивые состояния катализатора и каталитической системы. Временные и пространственно-временные диссипативные структуры в каталитических системах. Примеры схем с множественностью и неустойчивостью стационарных состояний. Реакция Белоусова-Жаботинского как пример неустойчивой гомогенной каталитической системы. Осцилляции изотермической скорости гетерогенных каталитических реакций и химические волны на поверхности катализатора.

13. Реконструкция катализатора под действием реакционной среды и его эволюция. Движущие силы реконструкции функционирующего катализатора. Обратимая и необратимая, равновесная и неравновесная реконструкция катализатор. Возможность изменения агрегатного состояния активной фазы катализатора при его функционировании. Фазовые равновесия активной фазы катализатора в неравновесной реакционной среде. Пребиотическая эволюция катализаторов, способных к саморепликации. Жизнь как форма существования катализатора.

## **5. Образовательные технологии**

Основные образовательные технологии: лекционная система обучения, а также обучение на основе опыта поиска и анализа литературных данных.

Лекции читаются специалистами основных разделов физической химии: химической кинетики и химической термодинамики.

Преподаватели, участвующие в проведении курса, регулярно готовят и издают учебно-методические пособия, посвященные различным разделам курса. Эти пособия размещаются и в электронном виде на сайтах кафедр адсорбции и катализа и физической химии. Там же можно найти примеры типовых задач к письменному зачету, а также дополнительные материалы, полезные для прохождения курса.

## **6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины**

Рекомендуемый режим работы: лекционные занятия – 4 часа в неделю; а также самостоятельные занятия с обязательной и дополнительной литературой.

Аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в виде письменного дифференцированного зачета. Вопросы к зачету и материалы лекций в виде презентаций представлены на сайте ФЕН НГУ.

### **Список тем – вопросов**

*Каждый экзаменационный билет «Термодинамика функционирующего катализатора» включает в себя четыре расчетные задачи по одной из означенных тем. У каждой задачи указаны максимальные баллы, которые можно получить за правильный ответ. При наборе более 90 % от суммарного максимума баллов – «отлично», от 70 до 90 % – «хорошо», от 50 до 70 % – «удовлетворительно».*

**Примеры билетов на письменный дифференцированный зачет.**

**Билет 1.**

Фамилия студента:	Зачет по предмету «Термодинамика функционирующего катализатора»	Оценка
-------------------	--------------------------------------------------------------------------	--------

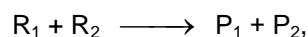
**Вариант 1**

**Задача 1.** (100 баллов)

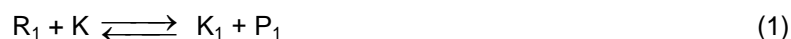
Оценить равновесный при 600 °С состав поверхностного слоя для сплава Cu : Ni с объемным составом 1 : 1 (атомн. долей), если поверхностное натяжение для Cu 1,67 Дж / м<sup>2</sup>, а для Ni – 1,85 Дж / м<sup>2</sup>. Ход решения пояснить.

**Задача 2.** (100 баллов)

Стехиометрический брутто-процесс



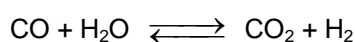
осуществляется по схеме



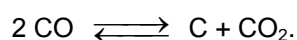
Найти условия, когда лимитирующей стадией («узким горлом») этого процесса является стадия 2. Что является при этом скорость-определяющими параметрами и каковы значения кажущейся энергии активации этой реакции в условиях сильного и слабого заполнения активного центра интермедиатом K<sub>1</sub>? Ход решения пояснить.

**Задача 3.** (100 баллов)

Каталитическая реакция



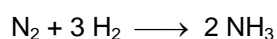
сопровождается реакцией коксообразования



При каких концентрациях присутствующих в системе реагентов кокс не будет откладываться? Ответ пояснить.

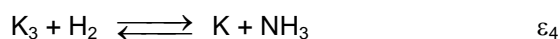
**Задача 4.** (\_\_\_ баллов)

Кинетически необратимая стехиометрическая реакция синтеза аммиака



на железо-содержащих катализаторах происходит по механизму





где  $K$  – свободная форма активного центра катализатора,  $K_1 \equiv KN_2$ ,  $K_2 \equiv KN_2H_2$ ,  $K_3 \equiv KNH$  – каталитические интермедиаты.

Найти эффективную энергию активации процесса в стационарном режиме при условии, что скорость-лимитирующей является стадия 2 и поверхность катализатора преимущественно заполнена интермедиатом  $K_2$ .

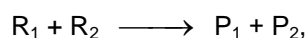
## Вариант 2

### Задача 1. (100 баллов)

Оценить равновесный при  $600\text{ }^\circ\text{C}$  состав поверхностного слоя для сплава  $Ag: Au$  с объемным составом  $1:1$  (атомн. долей), если поверхностное натяжение для  $Ag$   $1,14\text{ Дж/м}^2$ , а для  $Au$  –  $1,41\text{ Дж/м}^2$ . Ход решения пояснить.

### Задача 2. (100 баллов)

Каталитический стехиометрический брутто-процесс



осуществляется по схеме

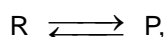


где  $K_1$  и  $K_2$  – каталитические интермедиаты.

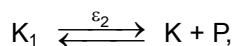
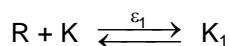
При каких соотношениях параметров лимитирующей стадией («узким горлом») процесса является стадия 2. Каковы значения кажущейся энергии активации этой реакции в условиях сильного и слабого заполнения поверхности? Что является скоростью-определяющими параметрами в указанных случаях? Ход решения пояснить.

### Задача 3. (100 баллов)

Каталитическая стехиометрическая брутто-реакция



На дисперсном металле с радиусом сферических частиц протекает по механизму

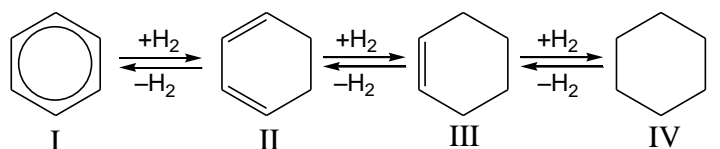


где  $K_1$  – молекулярно-адсорбированный интермедиат.

Найти, при каком размере активного компонента  $r$  TOF процесса будет максимальным при фиксированных концентрациях  $R$  и  $P$ . Корреляционный коэффициент  $\alpha$  для обеих элементарных реакций одинаков. Процесс протекает в стационарном режиме, энергия поверхностного натяжения и мольный объем свободной формы активного компонента равны соответственно  $\sigma$  и  $V$ .

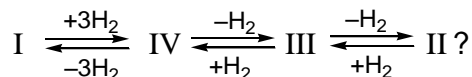
### Задача 4. (100 баллов)

Предполагают, что гидрирование бензола в циклогексан на Ni-содержащем катализаторе осуществляется по последовательной схеме



где все соединения II–IV могут быть выделены в виде индивидуальных продуктов превращения.

Можно ли, не прибегая к нестационарным кинетическим экспериментам, подтвердить или опровергнуть справедливость указанной последовательной схемы, а не, например, схемы с последовательностью



Ответ аргументировать.

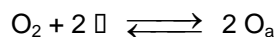
### Вариант 3

#### Задача 1. (100 баллов)

Катализатор V–Ti–O является твердым раствором оксидов  $V_2O_5$  и  $TiO_2$  с атомным соотношением V : Ti = 1 : 1. Сохранится ли это соотношение V : Ti на поверхности в условиях равновесия? Ответ аргументировать.

#### Задача 2. (100 баллов)

При каких теплотах диссоциативной хемосорбции кислорода на серебра

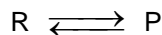


следует ожидать самопроизвольного микрофасетирования поверхности серебра при температуре 300 °C?

Давление кислорода 1 бар. Энтропию хемосорбции кислорода считать равной  $\Delta_{адс} S^0 = -20 \text{ Дж/моль} \cdot \text{К}$ .

#### Задача 3. (100 баллов)

Стехиометрическая брутто-реакция



осуществляется по механизму

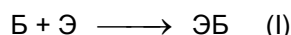


где  $K_1$  и  $K_2$  – каталитические интермедиаты.

Найти кажущуюся энергию активации при стационарном протекании каталитического процесса, когда скорость-лимитирующей стадией («узким горлом») реакции является стадия 3 и при этом заполнение поверхности каталитическими интермедиатами мало. Каковы в данном случае скорость-определяющие параметры процесса?

#### Задача 4. (100 баллов)

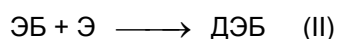
Алкилирование бензола (Б) этиленом (Э) в целевой продукт – этилбензол (ЭБ)



на цеолитах протекает по схеме



и сопровождается «переалкилированием» этилбензола в диэтилбензол (ДЭБ)



по схеме



Здесь К, К<sub>1</sub> и К<sub>2</sub> – активный центр и каталитические интермедиаты. Для стационарного относительно каталитических интермедиатов К<sub>1</sub> и К<sub>2</sub> протекания процесса найти выражение для скорости реакции по каждому из брутто-каналов и выражение для селективности процесса по этилбензолу. Как будет меняться эта селективность, если в качестве дополнительного исходного реагента при подаче, кроме Э и Б, в реактор подают ДЭБ?

## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### Рекомендованная литература к курсу «Термодинамика функционирующего катализатора»

#### *Основная литература*

- Пармон В.Н. Лекции по термодинамике неравновесных процессов для химиков. Новосибирск: Изд-во НГУ, 2005, 296 с. (доступно на сайте <http://fen.nsu.ru>)
- Пармон В.Н. Лекции по термодинамике для химиков. Новосибирск: Изд-во НГУ, 2004, 254 с. (доступно на сайте <http://fen.nsu.ru>)
- Пармон В.Н. Термодинамика неравновесных процессов для химиков: Приложение к химической кинетике, катализу, биохимии и материаловедению. М.: Интеллект, 2015, 420 с.
- Бажин Н. М., Иванченко В. А., Пармон В. Н. Термодинамика для химиков. М.: Химия, 2000. 300 с.
- Бажин Н. М., Иванченко В. А., Пармон В. Н. Термодинамика для химиков. (2-е изд., дополненное) М.: КолосС, 2004, 416 с.
- Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. М.: Мир, 2002, 461 с.
- Пригожин И., Дефей Р. Химическая термодинамика. М.: БИНОМ, 2009.
- Родунер Э. Размерные эффекты в наноматериалах. М.: Техносфера, 2010. 367 с.
- Ролдугин В.И., Физико-химия поверхности, М.: Интеллект, 2011, 500 с.
- Parmon V.N. Thermodynamics of Non-Equilibrium Processes with a Particular Application to Catalysis. Amsterdam: Elsevier, 2010, 321 pp.

#### *Дополнительная литература*

- Базаров И. П. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. М.: Изд-во МГУ, 1979.
- Базаров И. П., Геворкян Э. В., Николаев П. Н. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. М.: Изд-во МГУ, 1989. 240 с.
- Базаров И. П. Термодинамика. М.: Высш.шк., 1991. 376 с.
- Бокштейн Б. С., Менделев М. И. Краткий курс физической химии. М.: ЧеРо, 1999. 230 с.
- Боресков Г. К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986. 400 с.

Боресков Г. К. Катализ. Вопросы теории и практики. Новосибирск, 1987. 536 с.

Булатов Н. К., Лундин А. Б. Термодинамика необратимых физико-химических процессов. М.: Химия, 1984. 334 с.

Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М: Изд-во Мир, 1973. 500 с.

Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы. М.: Мир, 1974. 404 с.

Кайзер Дж. Статистическая термодинамика неравновесных процессов. М.: Мир, 1990. 608 с.

Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979. 512 с.

Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. М.: Издательство, 1960.

Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. М.: Прогресс, 1986. 432 с.

Эйген М. Самоорганизация материи и эволюция биологических макромолекул. М.: Мир, 1973.

Handbook of Heterogeneous Catalysis (Eds. G.E. Ertl et al.), Vol. 3, Weinheim, Wiley-VCH, 1997.

Parmon V.N., Catalysis and Nonequilibrium Thermodynamics, Catalysis Today, 1999, v. 51, p. 435.

Somorjai G. Introduction to Surface Chemistry and Catalysis. Wiley: N.Y., 1997.

Кроме того, рекомендуется ознакомиться с российскими и зарубежными обзорными журналами по химии, которые публикуют развернутые обзоры по различным аспектам термодинамики функционирующего катализатора (Успехи химии, Успехи физических наук, Chemical Review, Accounts of Chemical Research и другие).

### ***Интернет-ресурсы***

1. Сайт Международного союза по чистой и прикладной химии ИЮПАК (IUPAC) <http://www.iupac.com>.

Обучающиеся интенсивно используют ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» для работы в ходе освоения курса. В первую очередь это базы научных публикаций eLibrary.ru, Scopus, Science Research Portal, SciNet. Активно используются сайты известных издательств научной литературы, таких как Elsevier, Springer или American Chemical Society. Для коммуникации со студентами в период самостоятельной работы используется почтовый адрес на портале Yandex.

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

- Ноутбук, медиа-проектор, экран.
- Программное обеспечение для демонстрации слайд-презентаций.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с ОС ВПО, принятым в ФГАОУ ВО Новосибирский национальный исследовательский государственный

университет, с учетом рекомендаций ООП ВПО по направлению «020201 Фундаментальная и прикладная химия».

Автор: **Пармон Валентин Николаевич**, академик, д.х.н., профессор, зав. кафедрой физической химии ФЕН, директор Института катализа СО РАН.



Программа одобрена на заседании кафедры адсорбции и катализа "21" апреля 2014 г.

Секретарь кафедры к.х.н., ассистент  И.В.Делий