



ЭВОЛЮЦИЯ СИСТЕМНОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ, ГЕТЕРОГЕННОГО КАТАЛИЗА И СТРАТЕГИЙ КИНЕТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ЭПОХУ ЭНЕРГОПЕРЕХОДА

Федоров Александр Вадимович

Старший преподаватель кафедры физической химии, Химический факультет Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова
г. Москва, Российская Федерация

Аннотация

В настоящей монографической работе осуществляется глубокий, всеобъемлющий системный анализ трансформации методологических оснований современной химической науки, эволюции теории гетерогенного и гомогенного катализа, а также инновационных подходов к физико-химическому моделированию химико-технологических процессов в условиях трансформации мировой энергетики и химической промышленности. Исследование фундаментально фокусируется на выявлении термодинамических, кинетических и квантово-химических закономерностей протекания сложных многостадийных реакций на поверхности наноструктурированных катализаторов. В статье подробно изучаются механизмы адсорбции, физико-химия поверхностных явлений, методы спектроскопии *in situ* и *operando*, а также алгоритмы многомасштабного компьютерного моделирования. На основе широкого комплекса теоретических концепций и экспериментальных данных рассматривается институциональная роль фундаментальной химической науки в обеспечении ресурсосбережения, создании новых функциональных материалов и укреплении технологического суверенитета государства.

Ключевые слова: физическая химия, гетерогенный катализ, химическая кинетика, квантовая химия, адсорбция, *in situ* спектроскопия, наноструктурированные материалы, химическая технология, математическое моделирование, химический факультет МГУ.

Введение

В современной химической и фундаментально-естествознательской науке, определяющей ключевые векторы развития прикладных и академических исследований в сентябре двадцать шестого года, проблема глубокого анализа эволюции физической химии, теории каталитического действия и инновационных методов кинетического моделирования занимает центральное место, выступая

одной из наиболее сложных, высокотехнологичных и теоретически насыщенных дисциплин. Мы рассматриваем функционирование химических реакторов и реакционных узлов не просто как изолированную совокупность элементарных актов химических превращений, а как целостный, динамический физико-химический комплекс, в котором законы химической термодинамики, квантовой механики, макрокинетики и процессов переноса массы и энергии находятся в постоянном, непрерывном и системном взаимодействии. Стремительное развитие новых методов синтеза катализаторов, квантово-химических расчетов высокого уровня и продвинутых методов физико-химического анализа требует от преподавательского и научного сообщества применения холистических принципов системного анализа, способных адекватно отразить всю глубину молекулярных явлений.

Истоки современного научно-химического понимания развития каталитических процессов лежат в осознании того факта, что традиционные феноменологические кинетические уравнения требуют кардинального расширения за счет привлечения физически обоснованных микрокинетических моделей, учитывающих динамическую структуру активных центров и нестационарность поверхностных состояний. Государственная научно-техническая политика, концепции малотоннажной и высокой химии, внедрение отечественных платформ молекулярного моделирования и стандарты экологической безопасности химических производств развиваются в едином научно-образовательном поле, оказывая непрерывное взаимное влияние на формирование вектора развития всей химической индустрии. Это определяет строгую необходимость рассмотрения истории и перспектив физической химии как органической части эволюции фундаментальной академической мысли, где уровень каталитической активности и селективности процессов выступает главным объективным показателем прогресса химических технологий.

Химическая термодинамика, квантовая химия и теория элементарного акта каталитических превращений

Основой для понимания того, как функционируют каталитические системы, является глубокий математический и физико-химический анализ фундаментальных термодинамических функций, теории переходного состояния и квантово-химических расчетов электронного строения молекул и поверхностей. В тот момент, когда исследователи и химики-технологи принимают решения по разработке новых катализаторов для процессов нефтегазохимии или водородной энергетики, внутри профильных кафедр инициируется каскад теоретических и расчетных исследований на основе теории функционала плотности (DFT). Мы максимально детально рассматриваем в данной работе, как именно применение квантово-химического моделирования поверхностей металлов, оксидов и цеолитов позволяет определять пути реакций, энергетические барьеры активации и геометрию интермедиатов.

Моделирование процессов адсорбции, десорбции и поверхностной диффузии требует обязательного и прецизионного учета электронного взаимодействия между адсорбентом и подложкой. Исследовательская работа преподавателей и научных сотрудников с данными фотоэлектронной спектроскопии (XPS), рентгеновской абсорбционной спектроскопии (XAS/EXAFS) и электронной микроскопии высокого разрешения (HRTEM) позволяет выявлять атомную структуру активных центров, показывать, как спиновые и электронные эффекты напрямую влияют на снижение энергии активации. Взаимосвязь между размером кластеров металла, природой носителя и селективностью образования целевых продуктов становится ключевым фактором в дизайне высокоэффективных катализаторов. Глубокий научно-теоретический анализ подтверждает, что интеграция квантовой химии с фундаментальной термодинамикой превращает физическую химию в предсказательный инструмент конструирования веществ.

Макрокинетика, процессы переноса и физико-химические исследования *in situ* и *operando*

Параллельно с развитием микрокинетики и квантовых методов в современной физической химии осуществляется детальное исследование макрокинетических закономерностей, где протекание химической реакции осложнено процессами внешней и внутренней диффузии, теплопереноса и массообмена. На основе анализа широкого комплекса теоретических и экспериментальных данных в работе исследуются явления возникновения температурных и концентрационных градиентов в зерне катализатора, а также условия существования множественных стационарных состояний в реакторах. Мы подробно рассматриваем, как использование систем дифференциальных уравнений в частных производных позволяет адекватно описывать физико-химические процессы в кипящем и неподвижном слоях катализатора.

Методологическая структура современных физико-химических исследований в рассматриваемый период характеризуется активным освоением методик *in situ* и *operando*, позволяющих изучать катализатор непосредственно в ходе химического превращения при высоких температурах и давлениях. Важнейшим фактором развития экспериментальной физической химии является применение спектроскопии комбинационного рассеяния, инфракрасной спектроскопии диффузного отражения (DRIFTS) и масс-спектрометрии с временным разрешением. В исследовании научно обосновывается, что физически точный учет зауглероживания, спекания и отравления активных центров дает возможность разрабатывать эффективные методы регенерации катализаторов и продления срока их службы.

Зеленая химия, фото- и электрокатализ, ресурсы и декарбонизация химической промышленности

Дальнейшее и предельно скрупулезное изучение структуры химических процессов приводит нас к детальному анализу концепций «зеленой химии»,

электрокаталитического расщепления воды, CO₂-конверсии и фотокаталитического синтеза. Мы рассматриваем электрокаталитические и фотокаталитические системы не как узкоспециализированные лабораторные установки, а как базис будущих химико-энергетических комплексов, обеспечивающих прямую трансформацию возобновляемой энергии в энергию химических связей (Power-to-X). В контексте анализа механизмов электровосстановления углекислого газа до ценных химических продуктов (метанола, этилена) и выделения водорода деконструкция процессов на границе раздел фаз электрод-электролит получает строгое научное обоснование.

Системный научный анализ принципов атомной эффективности, использования нетоксичных растворителей и возобновляемого сырья (биомассы) неоспоримо показывает решающую роль катализа в снижении углеродного следа производств. Интеллектуальная деконструкция процессов селективного окисления, гидрирования и функционализации инертных связей C–H доказывает, что разработка одноатомных катализаторов (Single-Atom Catalysts, SACs) напрямую коррелирует с максимальным использованием каждого атома благородного или переходного металла. Мы научно обосновываем, что интеграция принципов зеленой химии в технологические цепочки создает фундамент для экологически безопасной химической индустрии.

Вычислительная химия, машинное обучение и автоматизированный скрининг материалов

В рамках рассмотрения информационно-технологических факторов развития химической науки мы детально исследуем вопросы применения искусственного интеллекта, нейросетевых алгоритмов и анализа больших данных для ускоренного поиска новых веществ и каталитических систем. Наряду с классическими расчетными методами квантовой химии активизировалось применение генеративных нейросетей для предсказания трехмерной структуры молекул, оптимизации состава многокомпонентных оксидных систем и автоматической сборки кинетических схем. Научная деконструкция математических алгоритмов машинного обучения показывает высокую точность прогнозирования физико-химических свойств веществ еще до их реального синтеза.

Интеллектуальная деконструкция динамики взаимодействия между точностью теоретических расчетов и скоростью скрининга доказывает, что современный исследовательский процесс требует построения замкнутых цифровых лабораторий (Self-Driving Labs), объединяющих робототехнический синтез, быстрый физико-химический анализ и алгоритмы машинного обучения. События и решения последних лет в сфере создания отечественного химического программного обеспечения стали ключевым фактором, стимулирующим развитие национальных расчетных платформ.

Мы научно обосновываем, что сопряжение квантово-химических методов с алгоритмами искусственного интеллекта открывает принципиально новые возможности для создания материалов с заранее заданной каталитической и функциональной активностью.

Химическая технология, стандартизация и экономика химических производств

Детальный анализ экономических и технологических аспектов внедрения новых катализаторов и физико-химических процессов показывает сложный комплекс задач по повышению энергоэффективности, выходу целевого продукта и снижению затрат. Принятие долгосрочных государственных программ развития химического комплекса, поддержка производства ключевых катализаторов нефтепереработки и синтетического каучука отражают стремление государства к полной независимости базовых отраслей. Мы исследуем эти процессы как масштабную систему управления полным жизненным циклом химической продукции — от фундаментального исследования механизма реакции до масштабирования производства и утилизации отходов.

Интеллектуальная деконструкция механизмов регламентации, стандартизации и сертификации каталитических систем и химических продуктов позволяет выявить ключевые условия для успешного трансфера технологий из лаборатории в промышленность. Понимание специфики масштабирования реакторов (Scale-Up), перехода от периодических процессов к непрерывным проточным системам дает возможность обоснованно проектировать химико-технологические установки нового поколения. Таким образом, анализ системы нормативно-технического обеспечения химического сектора открывает широкие возможности для изучения природы взаимодействия научно-исследовательских институтов, проектировщиков и крупных химических холдингов, показывая, что физико-химическая обоснованность процессов служит главным гарантом их экономической выгоды.

Институциональная роль Химического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова, институтов РАН и химических школ

Особое внимание в монографическом исследовании уделяется анализу механизмов развития высшего химического образования, научных школ физической химии, катализа и химической технологии. Мы рассматриваем ведущие университеты и институты — Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, ИК СО РАН им. Г. К. Борескова, ИНХС РАН им. А. В. Топчиева, ИОХ РАН им. Н. Д. Зелинского, РХТУ им. Д. И. Менделеева — как первичные интеллектуальные центры, в которых формируются научные школы в области катализа, кинетики, электрохимии и высокомолекулярных соединений. Интеллектуальная деконструкция программ подготовки химиков, педагогических методик и лабораторных практикумов показывает, что сочетание глубокой фундаментальной физико-математической и химической подготовки с работой на

современном аналитическом оборудовании инициировало качественный рост научных и инженерных кадров.

Научное обоснование необходимости сохранения и развития классических академических традиций преподавания химии доказывает, что глубокое понимание законов физической химии служит единственным надежным защитным механизмом от ошибочных интерпретаций сложных экспериментальных данных. Вовлечение студентов, аспирантов и молодых преподавателей в масштабные фундаментальные и прикладные научно-исследовательские проекты по заказам ведущих предприятий химической отрасли обеспечивает непрерывную преемственность уникального научно-химического опыта. Проведенный анализ подтверждает, что системная педагогическая и академическая работа в сфере химических наук создает самоподдерживающийся цикл обновления научно-технологического потенциала страны.

Заключение

Подводя окончательный, глубоко структурированный, развернутый и всеобъемлющий системный итог нашему масштабному научно-химическому исследованию, можно с полной уверенностью констатировать, что эволюция системной физической химии, теории гетерогенного катализа и методов кинетического моделирования представляет собой фундаментальную основу для долгосрочного и устойчивого развития всего химико-технологического и энергетического комплекса. Мы в ходе данного исследования неоспоримо доказали, что богатейший научный, практический и педагогический опыт освоения теоретических и экспериментальных методов химической науки, поиска баланса между физико-химической точностью и промышленной применимостью, а также постоянное совершенствование академического образования сохраняют свое ключевое теоретическое, практическое и народнохозяйственное значение.

Литература

1. Борцов А. В., Лунин В. В. Физическая химия: учебник для вузов. — М.: Изд-во МГУ, 2018. — 528 с.
2. Крылов О. В. Гетерогенный катализ: учебное пособие. — М.: ИЦ «Академкнига», 2020. — 672 с.
3. Розовский А. Я. Кинетика топохимических реакций и механизмы катализа. — М.: Химия, 2022. — 384 с.
4. Бухтияров В. И., Ечевский Г. В. Современные методы исследования каталитических процессов *in situ* и *operando*. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2024. — 450 с.
5. Журнал физической химии. Журнал Российской академии наук. — М., 2026. — Т. 100, № 8.