

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Термодинамика и кинетика в химической технологии

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки :

Цифровая химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

А. С. Князев

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

Томск – 2023

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.

ПК-2 Способен к реализации и управлению химическими и биомедицинскими процессами на базе математического прогнозирования и моделирования.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Приобретает систематические теоретические и практические знания в избранной области химии или смежных наук, анализирует возникающие в процессе научного исследования проблемы с точки зрения современных научных теорий, осмысливает и делает обоснованные выводы из научной и учебной литературы.

ИОПК-1.2. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук.

ИОПК-1.3. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.

ИОПК-1.4. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач

ИПК 2.1 Применяет методы математического прогнозирования и управления отдельными стадиями химико-технологических процессов

2. Задачи освоения дисциплины

- Освоить общие закономерности кинетики реакций гетерогенного катализа;
- Освоить закономерности протекания реакций при гомогенном катализе;
- Освоить принципы и подходы к выбору состава, фазового состояния и размеров зерна и пор катализатора;
- Освоить термодинамические закономерности протекания химических процессов;
- Освоить методы оценки эффективности протекания химического процесса с точки зрения термодинамических параметров;
- Освоить подходы и методы расчета термодинамических параметров процесса.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Первый семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

-лекции: 16 ч.

-практические занятия: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Основы технической термодинамики:

Предмет и задачи технической термодинамики, закономерности фазового перехода и параметры состояния, химическая термодинамика, термодинамические законы (в том числе для кругового процесса), понятие эксергии, термодинамический анализ ХТС.

Тема 2. Кинетика химических процессов.

Кинетика гомогенного и гетерогенного процесса, основные отличия и методы расчета кинетических параметров химических реакций. Связь термодинамических и кинетических параметров, методы математического моделирования простых химических реакторов.

Тема 3. Макрокинетика

Понятие цель и объекты макрокинеки, перенос вещества в гомогенных и гетерогенных процессах, методы математического моделирования химических процессов в зернах катализатора, методы расчета реальных реакторов гомогенных и гетерогенных процессов.

Тема 4. Термодинамические расчеты.

Основные термодинамические модели, принятые для расчета ХТС. Модели состояния и модели активности. Типы и классификация моделей состояния. Типы и классификация моделей активности. Основные расчетные формулы. Отличия и случаи применимости каждого типа моделей.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций и практических занятий, проведения занятий с презентациями студентов по индивидуальному заданию и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в первом семестре проводится в устной форме в виде ответа на билет и проверяет ИОПК 1.1., ИОПК 1.2., ИОПК 1.3., ИОПК 1.4., ИПК 2.1.

Экзаменационный билет состоит из двух теоретических вопросов и двух задач. Продолжительность экзамена 2 часа.

Предоставляется развернутый ответ в устной форме.

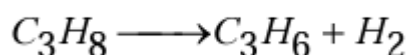
Примерны теоретических вопросов:

1. Термодинамические параметры состояния газовой смеси. Отличия идеальных и реальных газов?
2. Второй закон термодинамики для кругового процесса.
3. Первый закон термодинамики.
4. Способы вычисления удельной теплоемкости.
5. Основные типы реакторного оборудования в химической промышленности.

6. Основные подходы и алгоритм моделирования реального гетерогенного реактора идеального вытеснения.
7. Подходы и алгоритм моделирования реального гомогенного реактора.
8. Основные уравнения (модели) состояния и случаи их применимости.
9. Модели активности. Случаи применимости моделей, отличия от моделей состояния.
10. Подходы и алгоритмы расчета реакторов с кипящим слоем катализатора.

Примеры задач:

1. Температура вспышки паров бензина в двигателе внутреннего сгорания (ДВС) равна примерно 2000 °С, а температура атмосферы летом 20 °С. Найти термический коэффициент полезного действия двигателя ДВС, работающего по циклу Карно.
2. Рассчитать изменение концентрации в зерне катализатора при протекании следующей химической реакции:



Константа скорости данной реакции равна $k = 1,6 \text{ с}^{-1}$. Эффективный коэффициент диффузии пропана $D(C_3H_8) = 4,2 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$. Скорость потока в порах зерна катализатора $u = 0,005 \text{ м/с}$ и начальная концентрация пропана $x_{\text{вх}} = 0,7$ мольн. доли.

3. Рассчитать эффективный коэффициент диффузии кислорода в пористом катализаторе со средним радиусом пор 30 \AA (3нм) при 800 К, если коэффициент извилистости пор равен 2 и доля свободного объема зерна катализатора равна 0,6.

Результаты ответа определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» или «неудовлетворительно». Итоговая оценка складывается из оценки ответа на билет, результатов ответов на дополнительные вопросы и оценок за выполнение практических работ в семестре.

Оценка «отлично» выставляется студенту, если даны полные и правильные ответы на все вопросы; содержание ответа изложено логично и последовательно; существенные фактические ошибки отсутствуют; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать исчерпывающие и правильные ответы на уточняющие и дополнительные вопросы экзаменатора по теме вопросов. Не допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера.

Оценка «хорошо» выставляется студенту, если даны не полные, но правильные по сути составляющей ответы на все вопросы; содержание ответа изложено логично и последовательно; присутствуют несущественные фактические ошибки; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать правильные ответы на все уточняющие и дополнительные вопросы экзаменатора по теме вопросов. Допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера.

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если на большинство вопросов даны не полные, но правильные по сути составляющей ответы; содержание ответа изложено логично и последовательно; присутствуют несущественные фактические ошибки; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать правильные ответы на большую часть уточняющих и дополнительных вопросов экзаменатора по теме вопросов. Допускаются ошибки и погрешности, имеющие принципиального характера.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если он не дал ответа на большинство вопросов при защите индивидуального задания; дал неверные, содержащие фактические ошибки, ответы на все вопросы; не смог ответить более, чем на половину дополнительных и уточняющих вопросов преподавателя и студентов. «Неудовлетворительно» выставляется студенту, отказавшемуся отвечать на вопросы преподавателя и студентов.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=00000>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987. – 502 с.

- Бесков В.С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов и реакторов. – М.: Химия, 1991. – 256 с.

- Иоффе И.И., Письмен Л.М. Инженерная химия гетерогенного катализа. – Л.: Химия, 1972. – 464 с.

- Жоров Ю.М. Кинетика промышленных органических реакций: справочное издание. – М.: Химия, 1989. – 384 с.

- Жоров Ю.М. Термодинамика химических процессов. – М.: Химия, 1985. – 459 с.

- Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей./под ред.Б.И.Соколова – Л.:Химия, 1982. – 591с.

- Ермакова А. Методы макрокинетики применяемые при математическом моделировании химических процессов и реакторов. – Новосибирск: Изд-во НГУ, 2001. – 188с.

- Воробьев А.Х. Диффузионные задачи в химической кинетике: учебное пособие. – М.: Изд-во Моск. Университета, 2003. – 98с.

- Новиков И. И. Термодинамика. – М.: Машиностроение, 1984. – 592 с.

- Четкин А. В., Занемонец Н. А. Теплотехника. – М.: Высш. шк. 1986. – 344 с.

- Теплотехника. /Под ред. А. П. Баскакова. – М.: Энергоатомиздат. – 1991. – 225 с.

- Делягин Г. Н., Лебедев В. И., Пермяков Б. А. Теплогенерирующие установки. М.: Стройиздат. – 1986. – 242 с.

- Сидельковский Л. Н., Юренев В. Н. Парогенератора промышленных предприятий. – М.: Энергия, Энергия, 1978. – 326 с.

- Лейтес И. Л. и др. Теория и практика химической энерготехнологии–М.: Химия, 1988. – 280 с.

- Бродянский В. М. Эксергетический метод термодинамического анализа. – М.: Энергия, 1973. – 246 с.

- Семененко И. А., Куперман Л. И., Романовский С. А. и др. Вторичные энергоресурсы и энерготехнологическое оборудование в промышленности. – Киев: Высш. шк., 1979. – 296 с.

б) дополнительная литература:

- Кафаров В.В., Михайлов Г.В. Введение в инженерные расчеты реакторов с неподвижным слоем катализатора. – М.:Химия,1969. – 89с.

- Расчеты аппаратов кипящего слоя./ под ред. И.П. Мухленова, Б.С. Сажина, В.Ф. Фролова – Л.:Химия, 1986. – 352 с.

- Стефогло Е.Ф., Жукова О.П., Кучин И.В. Моделирование газожидкостных процессов на суспендированном катализаторе. – Кемерово: Кузбассиздат, 2000. – 427с.

в) ресурсы сети Интернет:

<http://elibrary.ru>

<https://login.webofknowledge.com/>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

Аудитория для выполнения практических занятий, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации, а также персональными компьютерами с установленным пакетом MS Office (MS Word, MS Excel, MS Visio), доступом в интернет для выполнения практических заданий.

15. Информация о разработчиках

1. Норин Владислав Вадимович, ассистент кафедры неорганической химии НИ ТГУ, ведущий специалист отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ»
2. Галанов Сергей Иванович, к.х.н., доцент, кафедра неорганической химии НИ ТГУ