

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Основы технохимических расчетов Б2.В.4

Направление подготовки: 020100.62 - Химия

Профиль подготовки: Физическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Курамшин А.И. , Салин А.В.

Рецензент(ы):

Бурнаева Л.М.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Галкин В. И.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__г

Регистрационный No 730315

Казань
2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Курамшин А.И. Кафедра высокомолекулярных и элементоорганических соединений Химический институт им. А.М. Бутлерова , Arcady.Kuramshin@kpfu.ru ; старший преподаватель, к.н. Салин А.В. Кафедра высокомолекулярных и элементоорганических соединений Химический институт им. А.М. Бутлерова , Alexey.Salin@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Цель данного курса - знакомство с экспериментальными и расчетными методами исследования процессов, материалов и продуктов химической технологии, которые позволят дополнить знания, полученные в лекционном курсе. Рассматриваются примеры практического приложения основных физико-химических законов к расчетам отдельных процессов химической технологии. Проводится ознакомление с приемами моделирования технологических процессов на примерах получения и расчета заданных продуктов из реального сырья. Студенты составляют материальные и энергетические балансы различных производств.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б2.В.4 Общепрофессиональный" основной образовательной программы 020100.62 Химия и относится к вариативной части. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Курс "Основы технохимических расчетов" относится к общепрофессиональному циклу (Б.2.В.4), имеет основополагающее значение, поскольку главным объектом его изучения являются основы закономерностей, лежащих при планировании и организации химических производств. Для освоения дисциплины необходимы знания по курсам "Органическая химия", "Неорганическая химия", "Физическая химия", "Химическая технология".

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	использует основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применяет методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования;

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные законы, лежащие в основе любых технохимических расчетов (сохранения массы и энергии), условия реализации и технологического оформления процессов, лежащих в основе промышленного получения важнейших неорганических и органических продуктов крупнотоннажных химических производств.

2. должен уметь:

правильно производить взаимное конвертирование физико-химических величин в размерности системы СИ и в размерности, принятой для технохимических расчетов; проводить вычисление и приводить конечный ответ в соответствии с правилами рабочих расчетов с использованием необходимого количества значащих цифр; самостоятельно подбирать алгоритм решения задачи.

3. должен владеть:

владеть основными физико-химическими закономерностями, лежащими в основе мало- и крупнотоннажных химических производств как в рамках отдельных стадий технологических процессов, так и на уровне комплексного подхода к количественному анализу материального и энергетического баланса химических производств цепочке "первичное сырье - готовая продукция"

4. должен демонстрировать способность и готовность:

подбора и решения математико-физико-химической модели для проведения расчетов материального и энергетического баланса базовых химических производств, владеть навыками теоретической разработки новых химических производств исходя из доступных источников как на основании поиска и анализа научно-технической литературы, в том числе и с использованием электронных источников информации

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Типы величин, применяющихся в технохимических расчетах.	7	1-4	0	8	0	
2.	Тема 2. Физико-химические основы технохимических расчетов. Основные законы и закономерности.	7	5-8	0	8	0	устный опрос
3.	Тема 3. Выбор и обоснование сырьевой базы на основе технологических и экономических критериев.	7	9-10	0	4	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Методические основы составления материальных и энергетических балансов химико-технологических процессов.	7	11-12	0	4	0	устный опрос
5.	Тема 5. Химико-технологические процессы и их основные закономерности.	7	13-14	0	4	0	устный опрос
6.	Тема 6. Метод расчета процесса ректификации бинарных систем с использованием графического отображения зависимости состав-свойства двухкомпонентной смеси.	7	15-16	0	4	0	устный опрос
7.	Тема 7. Использование персональных ЭВМ в технохимических расчетах. Использование простейших freeware программ ChemRef PC 1.0, Chemix V2.01, Chemical Equation Expert 2.00	7	17-18	0	4	0	письменная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	зачет
	Итого			0	36	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Типы величин, применяющихся в технохимических расчетах.

практическое занятие (8 часа(ов)):

Типы величин, применяющихся в технохимических расчетах, их соотношение с единицами системы СИ, правила взаимного конвертирования технохимических величин в размерность системы СИ. Основы метрологии в точности осуществления вычислительных действий. Правила работы со значащими цифрами.

Тема 2. Физико-химические основы технохимических расчетов. Основные законы и закономерности.

практическое занятие (8 часа(ов)):

Физико-химические основы технохимических расчетов. Основные законы и закономерности, применяющиеся при проведении технохимических вычислений. Границы применимости основных законов и закономерностей. Способы использования приближенных вычислений и допущения, лежащие в основе теории приближенных вычислений.

Тема 3. Выбор и обоснование сырьевой базы на основе технологических и экономических критериев.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Выбор и обоснование сырьевой базы на основе технологических и экономических критериев. Техничко-экономические показатели химических производств

Тема 4. Методические основы составления материальных и энергетических балансов химико-технологических процессов.

практическое занятие (4 часа(ов)):

.Химико-технологические процессы и их основные закономерности. Методические основы составления материальных и энергетических балансов химико-технологических процессов. Расчет материального и энергетического баланса процесса синтеза аммиака.

Тема 5. Химико-технологические процессы и их основные закономерности.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Химико-технологические процессы и их основные закономерности. Методические основы составления материальных и энергетических балансов химико-технологических процессов. Материальный и энергетический баланс основных стадий производства серной кислоты.

Тема 6. Метод расчета процесса ректификации бинарных систем с использованием графического отображения зависимости состав-свойства двухкомпонентной смеси.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Химико-технологические процессы и их основные закономерности. Методические основы составления материальных и энергетических балансов химико-технологических процессов. Метод расчета процесса ректификации бинарных систем с использованием графического отображения зависимости состав-свойства двухкомпонентной смеси.

Тема 7. Использование персональных ЭВМ в технохимических расчетах. Использование простейших freeware программ ChemRef PC 1.0, Chemix V2.01, Chemical Equation Expert 2.00

практическое занятие (4 часа(ов)):

Использование персональных ЭВМ в технохимических расчетах. Использование простейших freeware программ ChemRef PC 1.0, Chemix V2.01, Chemical Equation Expert 2.00 для определения молекулярных масс, процентного содержания элементов в веществе, определения содержания растворенного вещества в растворе и перехода от одного типа концентрации к другому.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Физико-химические основы технохимических расчетов. Основные законы и закономерности.	7	5-8	подготовка к устному опросу	6	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
3.	Тема 3. Выбор и обоснование сырьевой базы на основе технологических и экономических критериев.	7	9-10	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
4.	Тема 4. Методические основы составления материальных и энергетических балансов химико-технологических процессов.	7	11-12	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
5.	Тема 5. Химико-технологические процессы и их основные закономерности.	7	13-14	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
6.	Тема 6. Метод расчета процесса ректификации бинарных систем с использованием графического отображения зависимости состав-свойства двухкомпонентной смеси.	7	15-16	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
7.	Тема 7. Использование персональных ЭВМ в технохимических расчетах. Использование простейших freeware программ ChemRef PC 1.0, Chemix V2.01, Chemical Equation Expert 2.00	7	17-18	подготовка к письменной работе	6	письменная работа
	Итого				36	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

В рамках курса "Основы технохимических расчетов" предполагается использовать следующие образовательные технологии: использование компьютерных симуляций промышленных производств, решение задач и заданий алгоритмического типа по теме курса, проведение ролевой игры по теме: "Разработка модели промышленного производства", в которых разным группам учащимся предстоит выступить в роли "экспертов", разрабатывающих наиболее оптимальные способы промышленного производства инновационных химических и нанотехнологических продуктов.

Самостоятельная работа включает выполнение качественных задач, например предложить технологическую схему очистки нефти от сернистых соединений, схему получения ацетилсалициловой кислоты, получение ванилина из продуктов первичной переработки нефти и др. а также количественных задач на составление материального и теплового баланса химических производств, таких как производство аммиака, серной кислоты, процесса ректификации

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

Тема 1. Типы величин, применяющихся в технохимических расчетах.

Тема 2. Физико-химические основы технохимических расчетов. Основные законы и закономерности.

устный опрос , примерные вопросы:

Подготовка к устному опросу: основные технологические показатели и методы их определения.

Тема 3. Выбор и обоснование сырьевой базы на основе технологических и экономических критериев.

устный опрос , примерные вопросы:

Подготовка к устному опросу: способы выражения концентраций и состава газообразных, жидких и твердых веществ для проведения технохимических расчетов.

Тема 4. Методические основы составления материальных и энергетических балансов химико-технологических процессов.

устный опрос , примерные вопросы:

Подготовка к устному опросу: понятие материального и теплового балансов химико-технологических процессов.

Тема 5. Химико-технологические процессы и их основные закономерности.

устный опрос , примерные вопросы:

Подготовка к устному опросу: показатели химико-технологического процесса - расходные коэффициенты, конверсия, селективность, выход продукта, производительность, мощность, интенсивность

Тема 6. Метод расчета процесса ректификации бинарных систем с использованием графического отображения зависимости состав-свойства двухкомпонентной смеси.

устный опрос , примерные вопросы:

Подготовка к устному опросу: правила графического расчета процессов ректификации бинарных систем

Тема 7. Использование персональных ЭВМ в технохимических расчетах. Использование простейших freeware программ ChemRef PC 1.0, Chemix V2.01, Chemical Equation Expert 2.00

письменная работа , примерные вопросы:

Подготовка к письменной работе: 1. Составление материального и теплового балансов производства серной кислоты контактным способом. 2. Составление материального и теплового балансов производства аммиака. 3. Расчет процесса ректификации бинарных систем с использованием графического отображения зависимости состав-свойства двухкомпонентной смеси.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Основные классы наноразмерных систем (перечислить, охарактеризовать).

2. Нанотрубки и их свойства. Использование нанотрубок в качестве элементной базы микроэлектроники.
3. Углеродные наноструктуры. Фуллерен. История открытия, структура, возможности модифицирования, области применения.
4. Порошковые наноматериалы. Основные методы получения и направления практического использования.
5. Наноматериалы на основе блок-сополимеров. Возможности практического использования.
6. Супрамолекулярные структуры. Структуры с переходными металлами. Дендритные молекулы. Супрамолекулярные дендримеры. Возможности практического использования.
7. Наноструктурированные материалы. Основные методы получения и направления практического использования.
8. Биологические наноматериалы.
9. Пористые наноструктуры. Методы получения и возможности практического использования.
10. Квантовые точки, квантовые проволоки и квантовые колодцы. Основные принципы приготовления квантовых наноструктур.
11. Нанoeлектроника как одно из направлений применения нанотехнологий.
12. Роль нанотехнологий в развитии фотоники.
13. Применение наноматериалов в медицине и биологии: хирургический и стоматологический инструментарий, диагностика, искусственные органы и ткани.
14. Применение наноструктур в химии и химической технологии. Катализ на наночастицах.
15. Газодиффузионное разделение газовых смесей с использованием пористых наноматериалов - "молекулярных сит".
16. Примеры конструкционных и инструментальных материалов, изготовленных с использованием нанотехнологий.
17. Нанокompозитные материалы. Классификация нанокompозитов (по химической природе матрицы, по форме и характеру наполнителей из наночастиц и др.).
18. Нанокompозиты. Общие методы получения нанокompозитов, возможности практического использования.
19. Нанoeнергетика. Возможности использования нанотехнологий для создания топливных элементов и устройств для хранения энергии.
20. Нанoeлектромеханические системы: наномашинь и наноприборы. Принципы изготовления, возможности применения.
21. Нанотехнология. Основные технологические принципы: "сверху-вниз" и "снизу-вверх". Механизмы самоорганизации.
22. Физические методы синтеза нанопорошков (метод электровзрыва, механическое и ультразвуковое диспергирование).
23. Химические методы синтеза нанопорошков.
24. Методы получения структурированных наноматериалов. Сущность метода Глейтера.
25. Методы получения структурированных наноматериалов. Интенсивная пластическая деформация.
26. Методы получения структурированных наноматериалов. Химическое осаждение из газовой фазы, физическое осаждение из газовой фазы, ионно-лучевая имплантация.
27. Электронная микроскопия как метод исследования наноматериалов. Возможности и ограничения метода.
28. Темплатный синтез наноматериалов и наноструктур. Подходы, основанные на принципе самосборки.
29. Пленочные технологии получения наноматериалов (химическое осаждение из газовой фазы (CVD), физическое осаждение из газовой фазы (PVD), электроосаждение, ионно-лучевая эпитаксия, золь-гель осаждение).
30. Методы получения наноматериалов, которые классифицируются как диспергационные методы ("сверху-вниз").

31. Методы получения наноматериалов, которые классифицируются как конденсационные методы ("снизу-вверх").
32. Сканирующая зондовая микроскопия, как метод исследования наноматериалов. Принцип работы ближнепольного оптического микроскопа.
33. Сканирующая зондовая микроскопия, как метод исследования наноматериалов. Принцип работы атомно-адсорбционного микроскопа.
34. Сканирующая зондовая микроскопия, как метод исследования наноматериалов. Принцип работы сканирующего туннельного микроскопа.
35. Дополнительные возможности метода зондовой микроскопии: атомные манипуляции и нанолитография.
36. Газово-адсорбционный метод определения удельной поверхности порошков.
37. Использование метода малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей для исследования нанобъектов. Возможности и ограничения метода.
38. Силовой нанотестинг поверхности как метод изучения механических свойств наноструктур.
39. Спектроскопические методы исследования наноматериалов. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Мессбауэровская спектроскопия. Метод ядерного магнитного резонанса. Возможности и ограничения методов.
40. Спектроскопические методы исследования наноматериалов. Спектроскопия рентгеновского поглощения (EXAFS, XANES). Методы РФС, УФС, Оже-спектроскопии. Возможности и ограничения данных методов.
41. Особые свойства вещества в нанометровом диапазоне размеров. Размерные эффекты в наносистемах: истинные, тривиальные. Причины их возникновения.
42. Термодинамика поверхности. Термодинамические функции поверхности. Поверхностная энергия и поверхностное натяжение.
43. Особые свойства поверхности. Поверхность в зонной модели. Искривление зон. Состояния и уровни Шоккли и Тамма.
44. Основы физической химии наносистем; уравнения и характеристики условий термодинамической стабильности межфазных границ в наносистемах; особенности поверхностных процессов в наноструктурах.
45. Структурные переходы в наноматериалах. Термодинамическое объяснение возможности стабилизации неравновесных структур для веществ в наноразмерном состоянии.
46. Влияние размера частиц вещества на параметры кристаллической решетки. Возможные объяснения данного явления.
47. Зависимость температуры фазовых переходов от размера частиц вещества.
48. Изменение теплоемкости веществ в зависимости от размера частиц. Объяснение данного явления.
49. Диффузия в наноматериалах.
50. Зависимость величины ионной проводимости от дисперсности материала.
51. Нанокomпозиты. Нанокomпозитный эффект в электропроводности (объяснить на примере ионной проводимости систем состава "ионная соль - нано-оксид").
52. Эвтектики, как микрогетерогенные связно-дисперсные наносистемы. Супрамолекулярная концепция эвтектик.
53. Адсорбция типа "Твердое/Твердое". Адгезионная теория контактного плавления.
54. Проблемы устойчивости наночастиц и их ассоциатов; факторы, обуславливающие стабильность. Способы стабилизации наночастиц.
55. Причины низкой устойчивости веществ в нанокристаллическом состоянии. Технологии стабилизации формы и размеров нанокристаллитов.
56. Неавтономные межфазные соединения, их роль в формировании транспортных свойств и реакционной способности.
57. Магнитные наноматериалы. Влияние размера частицы на магнитные свойства ферромагнетиков. Основные параметры, зависящие от размерного фактора.

58. Полупроводниковые наноматериалы. Особенности зонной структуры металлов и полупроводников в нанокристаллическом состоянии.

7.1. Основная литература:

1. Курамшин А.И., Салин А.В. Основы технохимических расчетов, Казань, 2012
2. Кузнецова И.М., Харлампики Х. Э. Общая химическая технология. Основные концепции проектирования ХТС. - 2-е изд., перераб. - СПб.: Лань, 2014. - 384 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=45973
3. Харлампики Х.Э. Общая химическая технология. Методология проектирования химико-технологических процессов. - 2-е изд., перераб. - СПб.: Лань, 2013. - 448 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=32826
4. Закгейм А.Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: учеб. пособие [Электронный ресурс] / А.Ю. Закгейм. - 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Логос, 2012. - 304 с. Режим доступа:
<http://znanium.com/bookread.php?book=468690>

7.2. Дополнительная литература:

1. Гумеров А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов. - 2-е изд. - М.: Лань, 2014. - 176 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=41014
2. Самойлов Н.А. Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико-технологических процессов". - 3-е исп. - М.: Лань, 2013. - 176 с. Режим доступа:
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=37356

7.3. Интернет-ресурсы:

- Видео-лекции по химической инженерии -
<http://www.learnerstv.com/Free-Engineering-Video-lectures-ltv192-Page1.htm>
- Основные критерии для технологического расчета -
http://www.chem.msu.ru/rus/journals/membranes/17/html/mb_174.pdf
- Основы технологических расчетов в нефтепереработке и нефтехимии -
http://my-shop.ru/_files/product/pdf/119/1188048.pdf
- Технохимические расчеты -
http://booklists.narod.ru/Ch_Chemistry/Beskov_S.D._Tehno_himicheskie_raschety__Vysshaya_Shkola__1
- Химическая инженерия - <http://che.engin.umich.edu/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Основы технохимических расчетов" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Необходимая литература, оборудование для показа презентаций.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.62 "Химия" и профилю подготовки Физическая химия .

Автор(ы):

Курамшин А.И. _____

Салин А.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Бурнаева Л.М. _____

"__" _____ 201__ г.