



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»



С Т В Е Р Ж Д А Ю
Директор ИЕиС
И.Ю. Мезин

14.02.2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Направление подготовки (специальность)
29.03.03 Технология полиграфического и упаковочного производства

Направленность (профиль/специализация) программы
Брендинг и химическое моделирование

Уровень высшего образования - бакалавриат

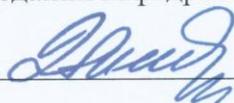
Форма обучения
очная

Институт/ факультет	Институт естествознания и стандартизации
Кафедра	Химии
Курс	2
Семестр	4

Магнитогорск
2022 год

Рабочая программа составлена на основе ФГОС ВО - бакалавриат по направлению подготовки 29.03.03 Технология полиграфического и упаковочного производства (приказ Минобрнауки России от 22.09.2017 г. № 960)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Химии
07.02.2022, протокол № 6

Зав. кафедрой  Н.Л. Медяник

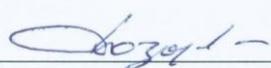
Рабочая программа одобрена методической комиссией ИЕиС
14.02.2022 г. протокол № 6

Председатель  И.Ю. Мезин

Рабочая программа составлена:

доцент кафедры Химии, канд. хим. наук  Е.В. Тарасюк

Рецензент:

доцент кафедры Физики, канд. хим. наук  А.В. Дозоров

Лист актуализации рабочей программы

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2023 - 2024 учебном году на заседании кафедры Химии

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ Н.Л. Медяник

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2024 - 2025 учебном году на заседании кафедры Химии

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ Н.Л. Медяник

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2025 - 2026 учебном году на заседании кафедры Химии

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ Н.Л. Медяник

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2026 - 2027 учебном году на заседании кафедры Химии

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ Н.Л. Медяник

1 Цели освоения дисциплины (модуля)

Целью дисциплины «Моделирование химических процессов» является формирование фундаментальных знаний в области основ производственно-технологической деятельности, включающих основные понятия, законы и закономерности протекания технологических и производственных процессов, обоснование выбора и разработку новых химических технологических процессов, формирование профессиональной мотивации для внедрения инновационных технологических процессов и оборудования.

2 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Моделирование химических процессов входит в обязательную часть учебного плана образовательной программы.

Для изучения дисциплины необходимы знания (умения, владения), сформированные в результате изучения дисциплин/ практик:

Химия

Органическая химия

Аналитическая химия и физико-химические методы анализа

Знания (умения, владения), полученные при изучении данной дисциплины будут необходимы для изучения дисциплин/практик:

Учебная-научно-исследовательская практика

Производство изделий из полимерных и композиционных материалов

Процессы и аппараты

Возобновляемое сырье в химической технологии

Утилизация композиционных упаковочных материалов

3 Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) и планируемые результаты обучения

В результате освоения дисциплины (модуля) «Моделирование химических процессов» обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции
ОПК-2	Способен участвовать в реализации современных технически совершенных технологий по выпуску конкурентоспособной продукции полиграфического и упаковочного производства
ОПК-2.1	Использует знания о современных материалах, технологиях и оборудовании для изготовления конкурентоспособной полиграфической и упаковочной продукции
ОПК-2.2	Выбирает материалы, технологии и оборудование для производства полиграфической и упаковочной продукции с учетом требований к качеству продукции и к её безопасности и с учётом экономических ограничений
ОПК-2.3	Участвует в реализации технически совершенных современных технологий изготовления конкурентоспособной продукции полиграфического и упаковочного производства
ОПК-7	Способен применять методы оптимизации технологических процессов производства упаковки, полиграфической продукции и промышленных изделий, производимых с использованием полиграфических технологий
ОПК-7.1	Анализирует технологический процесс производства печатной и упаковочной продукции с точки зрения необходимости оптимизации и внедрения инновационных технологий
ОПК-7.2	Участвует в моделировании отдельных операций и технологического процесса производства печатной и упаковочной

	продукции в целом
ОПК-7.3	Применяет оптимальные технологические решения и приёмы для повышения эффективности производства и качества печатной и упаковочной продукции

4. Структура, объём и содержание дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц 144 акад. часов, в том числе:

- контактная работа – 97 акад. часов;
- аудиторная – 95 акад. часов;
- внеаудиторная – 2 акад. часов;
- самостоятельная работа – 47 акад. часов;
- в форме практической подготовки – 0 акад. час;

Форма аттестации - зачет с оценкой

Раздел/ тема дисциплины	Семестр	Аудиторная контактная работа			Самостоятельная работа студента	Вид самостоятельной работы	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Код компетенции
		Лек.	лаб. зан.	практ. зан.				
1.								
1.1 Основные понятия химической технологии. Иерархическая организация процессов в производстве. Важнейшие направления	4	2			2	- самостоятельное изучение учебной литературы.	Конспект.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-2.3, ОПК-7.1, ОПК-7.2, ОПК-7.3
1.2 Технологическая подготовка производства. Сырьевая и энергетическая база промышленности.		4	10	5	10	- оформление отчета по лабораторной работе; - самостоятельное изучение	Защита лабораторной работы. Тестирование.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-2.3, ОПК-7.1, ОПК-7.2, ОПК-7.3
1.3 Классификация технологических процессов. Основные закономерности управления химическими процессами.		4	6		10	- оформление отчета по лабораторной работе; - самостоятельное изучение	Защита лабораторной работы. Тестирование.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-2.3, ОПК-7.1, ОПК-7.2, ОПК-7.3
1.4 Основы технологических расчетов. Материальный и тепловой балансы.		4		6	10	- решение домашнего задания; - самостоятельное изучение	Проверка домашней работы. Тестирование.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-2.3, ОПК-7.1, ОПК-7.2, ОПК-7.3

1.5	Химические реакторы. Моделирование химико-технологических процессов и реакторов.	4	6		10	- оформление отчета по лабораторной работе; - решение домашнего задания; - самостоятельное изучение	Защита лабораторной работы. Проверка домашней работы. Тестирование.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-2.3, ОПК-7.1, ОПК-7.2, ОПК-7.3
1.6	Компьютерное моделирование.	4	10	8		- оформление отчета по лабораторной работе; - самостоятельное изучение	Защита лабораторной работы. Тестирование.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-2.3, ОПК-7.1, ОПК-7.2, ОПК-7.3
1.7	Технология важнейших неорганических и органических производств.	16	6		5	- подготовка презентации; - самостоятельное изучение учебной	Представление презентации.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-2.3, ОПК-7.1, ОПК-7.2, ОПК-7.3
Итого по разделу		38	38	19	47			
Итого за семестр		38	38	19	47		зао	
Итого по дисциплине		38	38	19	47		зачет с оценкой	

5 Образовательные технологии

Реализация компетентностного подхода предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся.

При обучении обучающихся дисциплине «Химические основы производственных процессов» можно использовать следующие образовательные технологии:

1. Традиционные образовательные технологии ориентируются на организацию образовательного процесса, предполагающую прямую трансляцию знаний от преподавателя к студенту (преимущественно на основе объяснительно-иллюстративных методов обучения). Учебная деятельность студента носит в таких условиях, как правило, репродуктивный характер.

Формы учебных занятий с использованием традиционных технологий:

Информационная лекция – последовательное изложение материала в дисциплинарной логике, осуществляемое преимущественно вербальными средствами (монолог преподавателя).

Лабораторная работа – организация учебной работы с реальными материальными и информационными объектами, экспериментальная работа с аналоговыми моделями реальных объектов.

2. Технологии проблемного обучения – организация образовательного процесса, которая предполагает постановку проблемных вопросов, создание учебных проблемных ситуаций для стимулирования активной познавательной деятельности студентов.

Формы учебных занятий с использованием технологий проблемного обучения:

Проблемная лекция – изложение материала, предполагающее постановку проблемных и дискуссионных вопросов, освещение различных научных подходов, авторские комментарии, связанные с различными моделями интерпретации изучаемого материала.

Практическое занятие в форме практикума – организация учебной работы, направленная на решение комплексной учебно-познавательной задачи, требующей от студента применения как научно-теоретических знаний, так и практических навыков.

3. Интерактивные технологии – организация образовательного процесса, которая предполагает активное и нелинейное взаимодействие всех участников, достижение на этой основе лично значимого для них образовательного результата. Наряду со специализированными технологиями такого рода принцип интерактивности прослеживается в большинстве современных образовательных технологий. Интерактивность подразумевает субъект-субъектные отношения в ходе образовательного процесса и, как следствие, формирование саморазвивающейся информационно-ресурсной среды.

Формы учебных занятий с использованием специализированных интерактивных технологий:

Лекция «обратной связи» – лекция–провокация (изложение материала с заранее запланированными ошибками), лекция-беседа, лекция-дискуссия, лекция-прессконференция.

Семинар-дискуссия – коллективное обсуждение какого-либо спорного вопроса, проблемы, выявление мнений в группе (межгрупповой диалог, дискуссия как спор-диалог).

5. Информационно-коммуникационные образовательные технологии – организация образовательного процесса, основанная на применении специализированных программных сред и технических средств работы с информацией.

Формы учебных занятий с использованием информационно-коммуникационных

технологий:

Лекция-визуализация – изложение содержания сопровождается презентацией (демонстрацией учебных материалов, представленных в различных знаковых системах, в т.ч. иллюстративных, графических, аудио- и видеоматериалов).

Практическое занятие в форме презентации – представление результатов проектной или исследовательской деятельности с использованием специализированных программных сред.

План-график, литература, материалы к лекциям и лабораторным работам, тесты для текущего контроля, вопросы для итоговой аттестации выложены для самостоятельной работы обучающихся на образовательном портале ФГБОУ ВО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова».

6 Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Представлено в приложении 1.

7 Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

Представлены в приложении 2.

8 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

а) Основная литература:

1. Загкейм, А. Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие / А. Ю. Загкейм. - 3-е изд., перераб. и доп. - Москва : Логос, 2020. - 304 с. - (Новая университетская библиотека). - ISBN 978-5-98704-497-1. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1212487> (дата обращения: 09.02.2022). – Режим доступа: по подписке.

2. Крылова, С. А. Общая химическая технология : учебное пособие / С. А. Крылова, Р. Н. Абдрахманов, И. В. Понурко ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2017. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsistema.ru/uploader/fileUpload?name=26.pdf&show=dcatalogues/1/1139098/26.pdf&view=true> (дата обращения: 09.02.2022). - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

б) Дополнительная литература:

1. Технохимические расчеты в производственных процессах : учебное пособие / Н. Л. Калугина, Л. А. Бодьян, И. А. Варламова, Х. Я. Гиревая ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2016. - 59 с. : табл., схемы - URL: <https://magtu.informsistema.ru/uploader/fileUpload?name=3131.pdf&show=dcatalogues/1/1136169/3131.pdf&view=true> (дата обращения: : 09.02.2022). - Макрообъект. - Текст : электронный. - Имеется печатный аналог.

2. Мишурина, О. А. Водные ресурсы. Контроль качества. Методы обеззараживания : учебное пособие / О. А. Мишурина, Э. Р. Муллина, Е. В. Тарасюк ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2018. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsistema.ru/uploader/fileUpload?name=3574.pdf&show=dcatalogues/1/1515135/3574.pdf&view=true> (дата обращения: : 09.02.2022). - Макрообъект. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-9967-1122-2. - Сведения доступны также на CD-ROM.

3. Тарасюк, Е. В. Золь-гель технология получения стеклокерамических и гибридных покрытий : монография / Е. В. Тарасюк, О. А. Шилова, С. В. Хашковский ; МГТУ, [каф. ХТПиУП]. - [2-е изд., подгот. по печ. изд. 2009 г.]. - Магнитогорск, 2016. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsistema.ru/uploader/fileUpload?name=2826.pdf&show=dcatalogues/1/1133064/2826.pdf&view=true>

(дата обращения: : 09.02.2022). - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

4. Крылова, С. А. Введение в анализ и синтез химико-технологических систем : учебное пособие / С. А. Крылова ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2016. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsistema.ru/uploader/fileUpload?name=25.pdf&show=dcatalogues/1/1131464/25.pdf&view=true> (дата обращения: : 09.02.2022). - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

5. Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология: научно-технический журнал – ISSN 0579-2991.

в) Методические указания:

1. Тарасюк, Е. В. Химические основы производственных процессов : лабораторный практикум / Е. В. Тарасюк, Л. Г. Коляда ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2017. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsistema.ru/uploader/fileUpload?name=3325.pdf&show=dcatalogues/1/1138338/3325.pdf&view=true> (дата обращения: : 09.02.2022). - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

2. Калугина, Н.Л. Промышленная водоподготовка. Технический анализ и умягчение природных и промышленных вод: методические указания к лабораторным работам по дисциплине «Химические основы производственных процессов» для обучающихся по направлению 29.03.03 очной формы обучения / Н.Л. Калугина, Т.М. Куликова, Т.В. Добросердова ; Магнитогорский гос. технический ун-т им. Г. И. Носова. – Магнитогорск : МГТУ им. Г. И. Носова, 2017. – 13 с. – Текст : непосредственный.

3. Тарасюк, Е.В. Переработка отходов упаковки ТЕТРА РАК: методические указания к лабораторной работе по дисциплине «Утилизация упаковочных и полиграфических материалов», «Вторичная переработка упаковочных и полиграфических материалов», «Химические основы производственных процессов» для обучающихся по направлению подготовки 29.03.03 очной формы обучения / Е.В. Тарасюк, А.В. Смирнова ; Магнитогорский гос. технический ун-т им. Г. И. Носова. – Магнитогорск : МГТУ им. Г. И. Носова, 2017. – 10 с. – Текст : непосредственный.

4. Калугина, Н.Л. Технологическая подготовка производства. Флотация минералов (переиздание) Методические указания к лабораторной работе по дисциплинам «Химические основы производственных процессов» и «Моделирование химических процессов» для обучающихся по направлению 29.03.03 «Технология полиграфического и упаковочного производства» очной формы обучения / Н.Л. Калугина ; Магнитогорский гос. технический ун-т им. Г. И. Носова. – Магнитогорск : МГТУ им. Г. И. Носова, 2020. – 13 с. – Текст : непосредственный.

г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

<http://newlms.magtu.ru> Образовательный портал ФГБОУ ВО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»

www.i-exam.ru/ Единый портал интернет-тестирования в сфере образования

Программное обеспечение

Наименование ПО	№ договора	Срок действия лицензии
MS Office 2007 Professional	№ 135 от 17.09.2007	бессрочно
7Zip	свободно распространяемое ПО	бессрочно
FAR Manager	свободно распространяемое ПО	бессрочно
Браузер Yandex	свободно распространяемое ПО	бессрочно

Chemcraft Windows	Д-933-14 от 17.07.2014	бессрочно
-------------------	------------------------	-----------

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Название курса	Ссылка
Электронная база периодических изданий East View Information Services, ООО	https://dlib.eastview.com/
Национальная информационно-аналитическая система – Российский индекс научного цитирования	URL: https://elibrary.ru/project_risc.asp
Поисковая система Академия Google (Google Scholar)	URL: https://scholar.google.ru/
Информационная система - Единое окно доступа к информационным ресурсам	URL: http://window.edu.ru/
Российская Государственная библиотека. Каталоги	https://www.rsl.ru/ru/4readers/catalogues/
Электронные ресурсы библиотеки МГТУ им. Г.И. Носова	https://magtu.informsystema.ru/Marc.html?locale=ru
Университетская информационная система РОССИЯ	https://uisrussia.msu.ru
Международная реферативная и полнотекстовая справочная база данных	http://scopus.com
Международная коллекция научных протоколов по различным отраслям	http://www.springerprotocols.com/

9 Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа. Оснащение аудитории: мультимедийные средства хранения, передачи и представления информации.
2. Учебные аудитории для проведения лабораторных занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации. Оснащение аудитории: оборудование для выполнения лабораторных работ, химическая посуда, реактивы. Наглядные материалы: таблицы, схемы, плакаты.
3. Помещения для самостоятельной работы обучающихся. Оснащение аудитории: Персональные компьютеры с пакетом MS Office, Chemcraft Windows, выходом в Интернет и с доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.
4. Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования. Оснащение аудитории: Стеллажи, сейфы для хранения учебного оборудования, инструменты для ремонта лабораторного оборудования.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа студентов подразделяется на аудиторную, которая происходит как во время лабораторных занятий, так и на плановых консультациях, и на внеаудиторную, происходящую во время подготовки студентами отчетов по лабораторным занятиям и выполнения домашних заданий.

Аудиторная самостоятельная работа обучающихся предполагает выполнение тестов по пройденным темам.

Перечень лабораторных работ и контрольных вопросов к их защите

Лабораторная работа №1 Анализ нефтепродуктов

1. Какие показатели определяют качество нефтепродуктов?
2. Как классифицируют показатели качества нефтепродуктов? По какому принципу?
3. Дайте определение понятиям «октановое число» и «цетановое число».
4. Как определяют плотность нефтепродуктов?
5. Какие виды вязкости нефтепродуктов Вы знаете?
6. Что называется кинематической вязкостью жидкостей? Каким методом ее определяют?
7. Что называется динамической вязкостью жидкостей? Как определяют динамическую вязкость?
8. На чем основан метод определения водорастворимых кислот и щелочей в нефтепродуктах?
10. Какой метод используется для определения содержания воды в нефтепродуктах?
11. Как влияют механические примеси на качество нефтепродуктов?

Лабораторная работа №2 Флотация минералов

1. Определите, в чем заключается сущность процесса флотации и область ее применения.
2. Какие технологические проблемы решаются с помощью флотации минералов?
3. Что такое «флотационная пульпа», «пенный продукт», «камерный продукт», «флотоконцентрат», «флотохвосты»?
4. Какая флотация называется селективной?
5. В чем проявляется гидратация поверхности минерала? Как она влияет на флотацию?
6. Как выглядит процесс смачивания жидкостью твердой поверхности? Чем количественно выражается степень смачиваемости?
7. С какой целью используют флотационные реагенты-собиратели? Какое строение имеют их молекулы?
8. В чем заключается значение реагентов-пенообразователей? Какое строение имеют молекулы пенообразователей?
9. С какой целью применяют реагенты-регуляторы? В чем заключается их действие? Как классифицируют регуляторы?
9. По какому принципу классифицируют флотомашинны? Приведите их классификацию, разъясните ее.

Лабораторная работа №3 Промышленная водоподготовка

1. Какие показатели определяют качество воды?
2. Дайте определение понятиям «ионное производство воды» и «водородный показатель».
3. Какие виды жесткости Вы знаете?
4. Присутствием в воде, каких солей обусловлена карбонатная и некарбонатная жесткость?
5. Как подразделяют воды по степени общей жесткости?
6. На чем основан комплексометрический метод определения общей жесткости воды?

7. Какой метод используется для определения карбонатной жесткости воды?
8. Какие методы умягчения воды Вы знаете?
9. Какими методами можно снизить жёсткость воды?

Лабораторная работа №4 Обеззараживание воды

1. Что такое обеззараживание?
2. Какие виды обеззараживания существуют?
3. В чем суть ультрафиолетового обеззараживания?
4. Какой вид обеззараживания больше всего применяется в промышленности?
5. Какой метод обеззараживания рассмотрен в лабораторной работе? В чем суть метода?
6. Что за показатель «активный хлор»? Что он показывает?
7. Как влияют условия хранения на процесс разложения гипохлорита натрия?
8. Какова допустимая концентрация ионов Cl^- в питьевой воде?
9. Приведите химические реакции, лежащие в основе методики определения ионов Cl^- в воде.

Лабораторная работа №5 Очистка природных и сточных вод методом коагуляции

1. Перечислите физико-химические методы очистки сточных вод.
2. Охарактеризуйте процесс коагуляции.
3. Что происходит при реагентной обработке воды?
4. Какие специальные вещества используются в качестве коагулянтов?
5. От чего зависит выбор коагулянта?
6. Какую роль выполняют флокулянты? Что они собой представляют?
7. Что такое окисляемость? Как ее определяют?
8. Из каких стадий состоит процесс очистки сточных вод методом коагуляции?
9. Как влияет значение pH на процесс коагуляции?
10. Какова оптимальная величина pH для проведения коагуляции?

Лабораторная работа №6 Получение пластмасс

1. Какие вещества называют пластмассами?
2. Как классифицируют пластмассы по составу?
3. Какие вещества используют в качестве наполнителей в пластмассах? Для чего в состав пластмасс вводят наполнители?
4. Какие вещества используют в качестве пластификаторов при изготовлении пластмасс? Для чего в состав пластмасс вводят пластификаторы?
5. Какие вещества используют в качестве отвердителей при изготовлении пластмасс? Для чего в состав пластмасс вводят отвердители?
6. Какие вещества используют в качестве красителей пластмасс, стабилизаторов? Для чего в состав пластмасс вводят смазочные вещества?
7. Какие промышленные методы переработки пластмасс Вы знаете?
8. Что называют пресспорошками? Какими способами их получают в промышленности?
9. Что такое пленкообразующие вещества? Назовите их свойства. Для чего применяют пленкообразующие вещества?
10. Как получают пленкообразующие вещества в промышленности?
11. Какие вещества называют пленкообразователями? Где они применяются?

Лабораторная работа №7 Моделирование в программе ChemCraft

1. Для каких целей используется программа Chemcraft?
2. Какие возможности она имеет?
3. Чем отличается от других программ?
4. Как отобразить длины связи на молекуле?
5. Как нарисовать молекулу?
6. Какие виды пространственных моделей молекул позволяет построить?

7. Какие расчеты позволяет просматривать и редактировать?

Варианты тематических домашних заданий для самостоятельной работы

Домашнее задание № 1

по теме «Расчеты расходных коэффициентов, констант равновесия и равновесного выхода продукта, состава равновесных смесей»

В домашнем задании по теме «Расчеты расходных коэффициентов, констант равновесия и равновесного выхода продукта, состава равновесных смесей»: первая задача оценивается в 2,5 балла; вторая – в 1,5 балла; третья – в 1 балл.

Задача №1

380 кг серы 100 % чистоты сжигают в избытке воздуха 1,2, чтобы обеспечить степень выгорания серы 0,998. Содержание кислорода в воздухе составляет 0,21 объемных долей. Определить объем и состав образующегося при сжигании печного газа.

Задача №2

100 т руды, содержащей 0,32 масс. долей железа, 0,025 масс. долей меди и 0,015 масс. долей цинка подвергают селективному обогащению. При этом получают: флотационный колчедан, содержащий 0,47 масс. долей железа (степень обогащения – 0,95); халькопиритный концентрат, содержащий 0,28 масс. долей железа (степень обогащения – 0,80); цинковый концентрат, содержащий 0,46 масс. долей железа (степень обогащения – 0,79). Определить массу и выход каждого продукта.

Задача №3

Определить расходные коэффициенты (РК) фосфорной кислоты концентрацией 55 % и аммиака концентрацией 98 % для производства 1 т ортофосфата аммония.

Домашнее задание № 2

по теме «Составление материального и теплового баланса»

В домашнем задании по теме «Составление материального баланса»: каждая задача оценивается в 5 баллов.

1. Составить материальный баланс хлоратора в производстве хлорбензола (на 1 т хлорбензола). Содержание жидких продуктов (ω , %): бензола – 65,0; хлорбензола – 32,0; дихлорбензола – 2,5; трихлорбензола – 0,5. Исходный технический бензол содержит 97,5 % C_6H_6 , технический хлор – 98 % Cl_2 .

2. Рассчитать объем полимеризатора стирола и составить тепловой баланс первого полимеризатора (в кДж на 1 т исходного стирола) при коэффициенте заполнения реактора 0,65 и рабочем объеме – 1,8 м³. Плотность стирола – 0,906 г/см³, теплоемкость стирола при 50 °С – 1,742 кДж/(м³·°С), при 145 °С – 2,479 кДж/(м³·°С); полистирола: при 20 °С – 1,457 кДж/(м³·°С), при 145 °С – 3,119 кДж/(м³·°С). Процесс начинается при 50 °С, заканчивается при 145 °С. Степень полимеризации – 48 %. Время пребывания в реакторе – 2 часа.

Пример выполнения задания в программе ChemCraft

Задание:

а) постройте объемные 3D модели молекул, укажите величины углов и длины связей;

- б) импортируйте декартовые координаты атомов в текстовом формате в ангстремах и борках;
- в) постройте пространственные модели молекулы: шаростержневую модель, полусферическую модель Стюарта-Бриглеба, модель Драйвинга;
- г) выведите ван-дер-ваальсовы сферы;
- д) рассчитайте z-матрицу для заданной молекулы.

Порядок выполнения

Рассмотрим порядок работы в ChemCraft на примере молекулы пиридина.

1. Открыть программу.
2. Построить молекулу в программе. Выбрать Edit/Add atom, вылетит таблица Менделеева, щелчком выбираем нужный атом и левой кнопки мыши щелкаем по полю программы, у нас появляется выбранный атом, как показано на рис. 1. Чтобы добавить или удалить связь, выделить атомы и нажать комбинацию клавиш Ctrl+V.

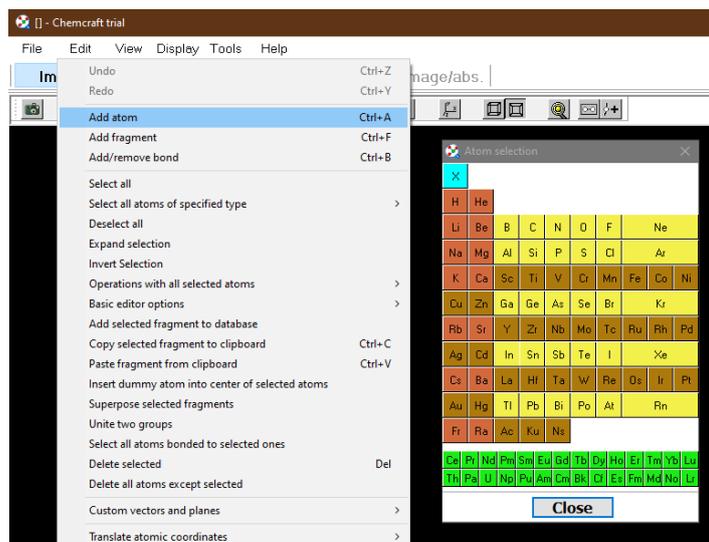


Рис. 1. Выбор атома

3. Или можно выбрать готовый фрагмент молекулы или радикала Edit/Add fragment (рис. 2). Для примера выбрана молекула пиридина Add fragment/molecules/rings/pyridine, как показано на рис. 3.

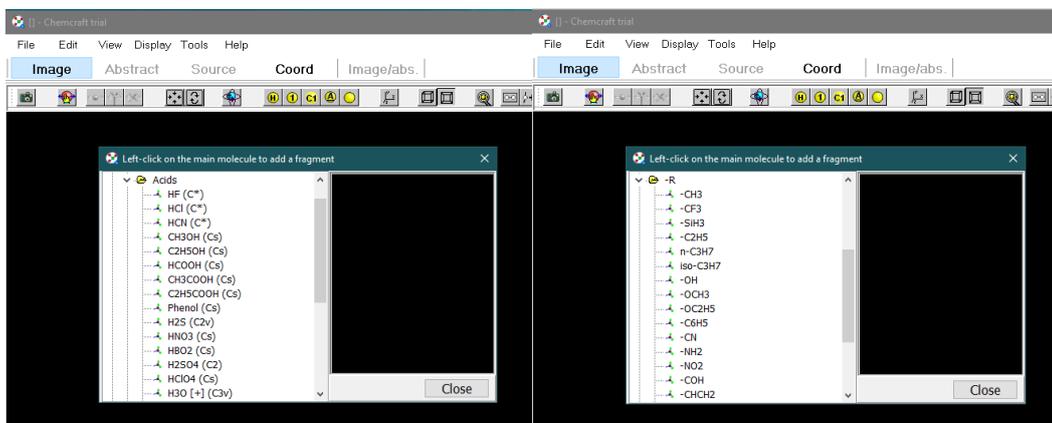


Рис. 2. Выбор кислоты или радикала

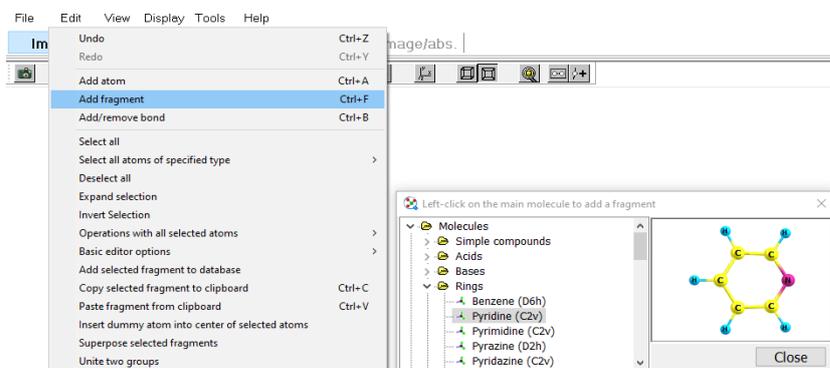


Рис. 3. Моделирование молекулы пиридина

4. После нажатия левой кнопки мыши на экране появится молекула пиридина, и будут доступны различные манипуляции с ней, например, просмотр длины связей. Для этого нужно воспользоваться опцией View/structural parametres/show all bond lengths, как показано на рис. 4.

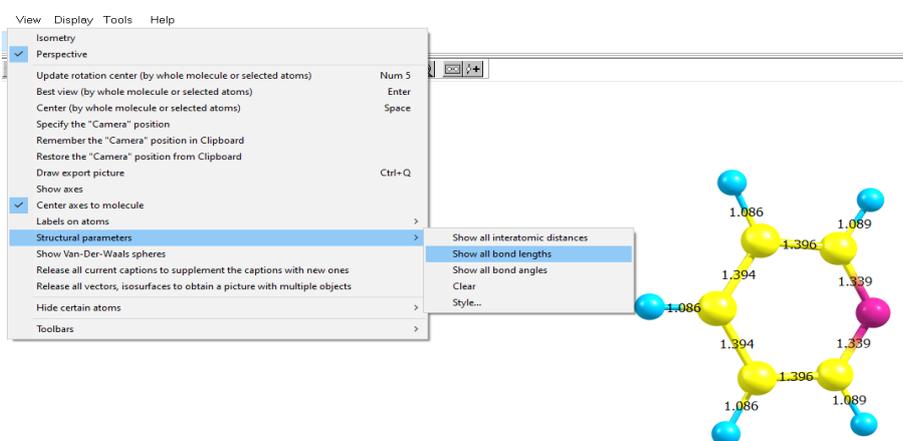


Рис. 4. Длины связей в молекуле пиридина

5. Также доступен просмотр величины углов между связями, как показано на рис. 5.

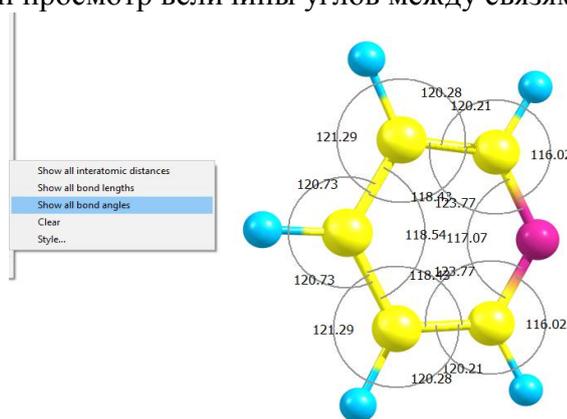


Рис. 5. Величины углов между связями в молекуле пиридина

6. Из вкладки Coord импортировать декартовые координаты атомов в текстовом формате в ангстремах и борах. Кнопки Copy и Paste помогают копировать текст с координатами в буфер обмена или из буфера на экран. Внизу окна есть вкладка – Coord format – выводит расчетные данные в разных форматах. На рис. 6 приведен стандартный формат и в агстремах.

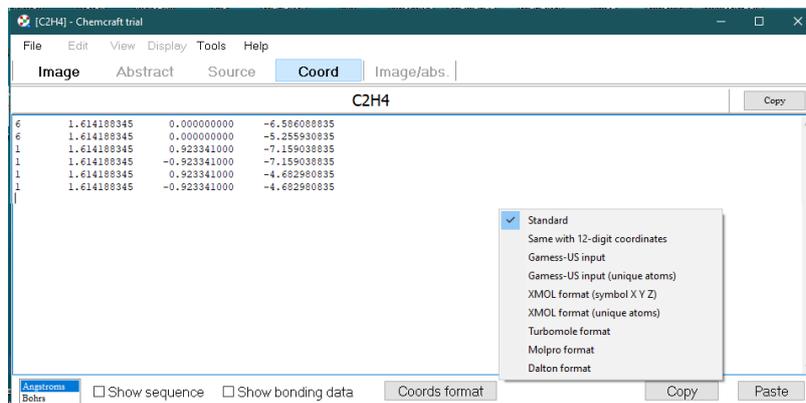


Рис. 6. Вывод расчетных данных в разных форматах

7. Для наглядного изображения пространственного строения молекул применяют различные модели. В опции Display можно просмотреть различные виды предоставления молекул: а, б, д – шаростержневая модель, г - полусферическая модель Стюарта-Бриглеба, в - модель Драйвинга, е – 2Д (рис. 7).

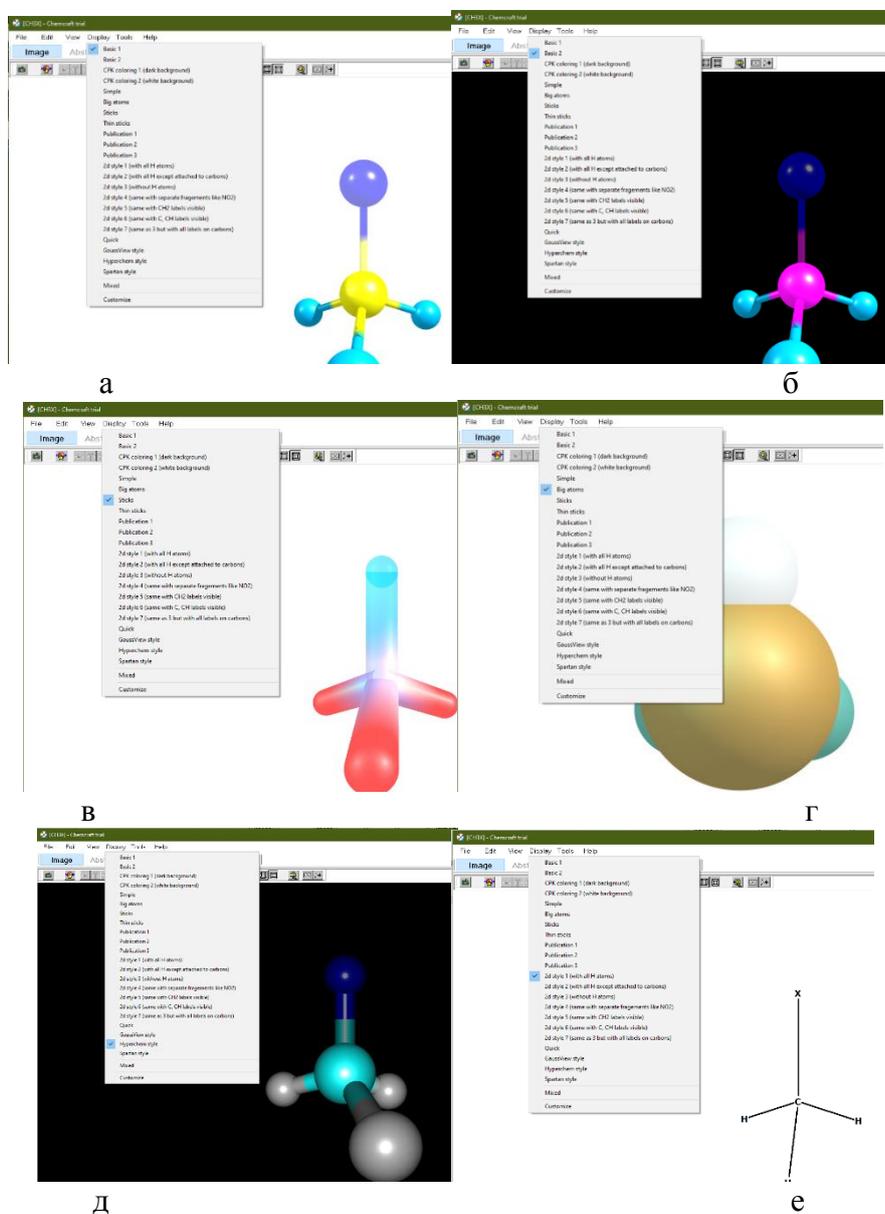


Рис. 7. Модели молекулы (описание в тексте)

8. Открываем опцию Show Van-Der-Waals spheres, появляется галочка напротив надписи (рис. 8). Если сферы не нужно, то можно галочку снять.

9. Чтобы вывести z-матрицу для молекулы пиридина, необходимо выбрать вкладку Tools/Build Z-matrix/Gaussian format, вылетит новое окно, в нем нажимаем на Complete automatically. Программа через некоторое время сформирует z-матрицы молекулы (рис. 9).

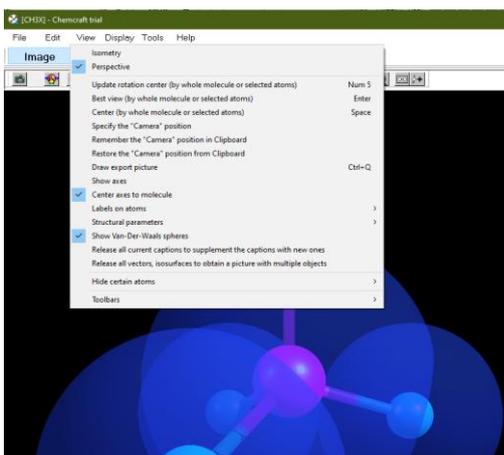


Рис. 8. Вывод ван-дер-ваальсовых сфер

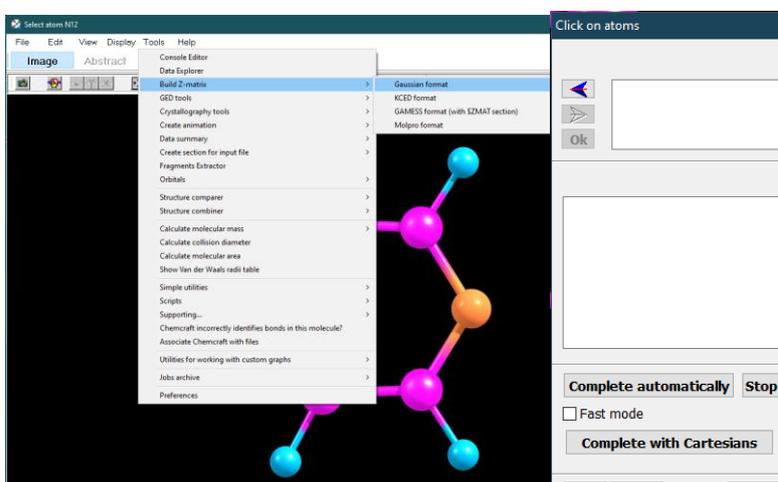


Рис. 9. Вывод z-матрицы для молекулы

Z-matrix		#P B3LYP/6-31G(D,P) OPT(Z-Matrix)	
R12	1.3941	CSNH5	
R13	1.3941	O 1	
A213	118.5351	C	
R14	1.0862	C 1 R12	
A214	120.7324	C 1 R13 2 A213	
D3214	180.0000	H 1 R14 2 A214 3 D3214	
R25	1.3959	C 2 R25 1 A125 3 D3125	
A125	118.4291	H 2 R26 5 A526 1 D1526	
D3125	0.0000	N 5 R57 2 A257 1 D1257	
R26	1.0855	H 5 R58 7 A758 2 D2758	
A526	120.2795	C 7 R79 5 A579 8 D8579	
D1526	180.0000	H 9 R9_10 7 A79_10 3 D379_10	
R57	1.3392	H 3 R9_11 9 A93_11 1 D193_11	
A257	123.7690	Variables:	
D1257	0.0000	R12 = 1.39413485	
R58	1.0887	R13 = 1.39413485	
A758	116.0222	A213 = 118.53514632	
D2758	180.0000	R14 = 1.08624200	
R79	1.3392	A214 = 120.73242694	
A579	117.0685	D3214 = 179.99999915	
D379_10	180.0000	R25 = 1.39592378	
R3_11	1.0855	A125 = 118.42913745	
A93_11	120.2795	D3125 = 0.00000085	
D193_11	180.0000	R26 = 1.08550777	
		A526 = 120.27949796	
		D1526 = 180.00000000	
		R57 = 1.33916723	
		A257 = 123.76902568	
		D1257 = 0.00000000	
		R58 = 1.08872441	
		A758 = 116.02223244	
		D2758 = 180.00000000	
		R79 = 1.33916723	
		A579 = 117.06852742	
		D8579 = 180.00000000	
		R9_10 = 1.08872441	
		A79_10 = 116.02223244	
		D379_10 = 180.00000000	
		R3_11 = 1.08550777	
		A93_11 = 120.27949796	
		D193_11 = 179.99999915	

Рис. 9. Z-матрица для молекулы пиридина

Отчет по Заданию.

1. Скрин молекулы в программе Chemcraft.
2. Скрин с длинами связи.
3. Скрин с величинами углов.
4. Скрины молекулы: а – шаростержневая модель, б - полусферическая модель Стюарта-Бриглеба, в - модель Драйвинга.
5. Скрины выводов расчетных данных в разных форматах.
6. Скрин ван-дер-ваальсовых сфер.
7. Скрин Z-матрицы.
8. Все скрины сохранить в документ Word, файл с сохраненной структурой молекулы сохранить в программе и прикрепить на Образовательный портал.

**Вариант тестового задания для текущего контроля
по теме «Сырьевые ресурсы»**

В тестах содержится 10 вопросов, которые оцениваются по 1 баллу.

1. Целесообразность применения источников энергии определяется:
 - a) энергетической ценностью
 - b) географическим положением
 - c) комплексным использованием сырья
 - d) запасами в природе

2. Вещества, обладающие энергетическим потенциалом и являющиеся побочными продуктами деятельности человека, – это источники энергии:
 - a) безвозвратно теряемые
 - b) вторичные
 - c) дополнительные
 - d) неиспользуемые

3. Предложите пути решения сырьевой проблемы.
 - a) применение концентрированного сырья
 - b) использование отходов
 - c) комплексное использование сырья
 - d) применение более дешёвых видов сырья
 - e) применение более дорогих видов сырья

4. Невозобновляемое сырье - это ...
Выберите один ответ:
 - a) это сырье, которое не восстанавливается совсем или восстанавливается значительно медленнее, чем расходуется
 - b) это вода и воздух
 - c) это только растительное и животное сырье
 - d) это сырье, которое включает в себя и растительное и животное, некоторые виды минерального сырья

5. Тепловая энергия применяется:
 - a) для получения в электроприводах различных машин и аппаратов механической энергии
 - b) для получения в паровых и газовых турбинах механической энергии
 - c) для осуществления тепловых процессов
 - d) для обеспечения теплового режима технологического процесса

е) для реализации фотохимических реакций

6. Горные поро-ды, не содержащие металлы, или содержащие в количествах, не пригодных для получения этих металлов промышленным путем, называются...

(Ответ впишите: _____)

7. Сырье — это ...

Выберите один или несколько ответов:

- a) отходы производства
- b) вещества и материалы, подвергшиеся ранее воздействию труда
- c) вещества и материалы, предназначенные для дальнейшей переработки
- d) полупродукты

8. Какими физическими свойствами характеризуется качество воды?

- a) прозрачность
- b) окисляемость
- c) цвет
- d) запах
- e) солесодержание

9. Для каких целей используется воздух в химическом производстве?

- a) для перемешивания текущих сред, для создания «воздушных подушек» в резервуарах
- b) для продувки аппаратов
- c) в качестве сырья в процессах окисления, при получении кислорода, азота, благородных газов
- d) в качестве теплоносителя и хладагента
- e) используется в процессах пиролиза, крекинга, дегидрирования

10. Источниками тепловой энергии служат следующие виды сырья:

Выберите один или несколько ответов:

- a) нефть
- b) природные угли
- c) горные породы (галит, серный колчедан и др)
- d) природный газ

Вариант тестового задания для итогового контроля

В тестах содержится 20 вопросов, которые оцениваются в 0,4 балла.

Тест 1

1. Строгое понятие химической технологии – это:

- 1) отрасль промышленности;
- 2) наука;
- 3) способ производства;
- 4) метод переработки веществ.

2. Последовательность процессов целенаправленной переработки сырья в продукт – это:

- 1) химическое производство;
- 2) химико-технологическая система;
- 3) химико-технологический процесс;
- 4) химическая технология.

3. Совокупность процессов и операций, осуществляемых в машинах и аппаратах и предназначенных для переработки сырья путем химических превращений в необходимые продукты, – это:

- 1) химическое производство;
- 2) химико-технологическая система;
- 3) химико-технологический процесс;
- 4) химическая технология.

4. Какие производства относятся к неорганической химической технологии?

- 1) высокомолекулярных соединений;
- 2) стекла, керамики, вяжущих материалов;
- 3) продуктов из природных углеводов;
- 4) редких металлов;
- 5) минеральных кислот, щелочей, солей;
- 6) аминокислот, ферментов, антибиотиков.

5. Какие производства относятся к органической химической технологии?

- 1) высокомолекулярных соединений;
- 2) стекла, керамики, вяжущих материалов;
- 3) редких металлов;
- 4) продуктов из природных углеводов;
- 5) минеральных кислот, щелочей, солей;
- 6) аминокислот, ферментов, антибиотиков.

6. Совокупный химико-технологический процесс включает основные процессы:

- 1) химические;
- 2) энергетические;
- 3) теплообменные и массообменные;
- 4) механические и гидромеханические;
- 5) управления.

7. В химическом производстве кроме основных процессов совокупного химико-технологического процесса осуществляются процессы:

- 1) механические и гидромеханические;
- 2) энергетические;
- 3) массообменные;
- 4) управления;
- 5) химические.

8. Вещества, обладающие энергетическим потенциалом и являющиеся побочными продуктами деятельности человека, – это источники энергии:

- 1) дополнительные;
- 2) вторичные;
- 3) неиспользуемые;
- 4) безвозвратно теряемые.

9. Совокупность отходов производства и потребления, пригодных в качестве основного или вспомогательного сырья для выпуска целевой продукции, – это материальные ресурсы:

- 1) первичные;
- 2) основные;
- 3) исходные;
- 4) вторичные.

10. Сопоставьте показатели химического производства и группу их классификации

Показатель химического производства	Группа классификации
-------------------------------------	----------------------

Производительность Производительность труда Себестоимость продукции Качество продукта Удельные капитальные затраты Надежность системы и оборудования Мощность Интенсивность процесса Безопасность функционирования Степень автоматизации процессов Расходные коэффициенты по сырью Выход продукта Расходные коэффициенты по энергии Безвредность обслуживания Экологическая безопасность Управляемость	Технические показатели Экономические показатели Эксплуатационные показатели Социальные показатели
---	--

11. К вторичным энергетическим ресурсам (ВЭР) относится энергия:

- 1) отходящих газов, рабочих тел систем охлаждения;
- 2) отработанного пара и горячей воды;
- 3) попутно вырабатываемого пара и нагреваемой воды;
- 4) сжигания природного газа и торфа;
- 5) сжигания каменного угля и древесины;
- 6) избыточного давления.

12. Если в химическом производстве рационально используются все компоненты сырья и энергии и не нарушается экологическое равновесие, то используемая технология:

- 1) улучшенная;
- 2) малоотходная;
- 3) безотходная;
- 4) малозатратная;
- 5) энерготехнологическая;
- 6) ресурсоэнергосберегающая.

13. Химическое производство, вредные последствия деятельности которого не превышают уровня, допустимого санитарными нормами, но часть сырья и материалов переходит в отходы, – это производство:

- 1) малоотходное;
- 2) безотходное;
- 3) вторичное;
- 4) неисправное.

14. Чем отличается технологическая схема производства от энерготехнологической?

- 1) присутствием теплообменной аппаратуры;
- 2) производством энергии для соседних заводов;
- 3) наличием энергетического узла;
- 4) наличием очистных сооружений;
- 5) реализацией приемов регенерации и рекуперации тепла и энергии;
- 6) автономностью по электроэнергии.

15. Химико-технологическая система, позволяющая на одном оборудовании после некоторых изменений компоновки оборудования и режимных параметров реализовать различные химико-технологические процессы, называется:

- 1) неуправляемая;

- 2) комплексная;
- 3) перестраиваемая;
- 4) переоборудованная.

16. Если при допустимых изменениях условий химико-технологического процесса его показатели сохраняются в заданных пределах, то химико-технологическая система называется:

- 1) управляемой;
- 2) нечувствительной;
- 3) устойчивой;
- 4) активной;
- 5) автономной.

17. Среднее время функционирования химико-технологической системы между отказами ее элементов или число отказов, или общее время простоя за данный период – это показатели:

- 1) надежности;
- 2) устойчивости;
- 3) управляемости;
- 4) реактивности.

18. Тепловой баланс химико-технологического процесса составляется на основе законов:

- 1) сохранения массы вещества;
- 2) сохранения энергии;
- 3) сохранения массы вещества и энергии;
- 4) действующих масс;
- 5) эквивалентов.

19. Расходные коэффициенты характеризуют расход сырья на единицу:

- 1) массы побочного продукта;
- 2) объема побочного продукта;
- 3) массы целевого продукта;
- 4) объема целевого продукта;
- 5) плотности целевого продукта;
- 6) моля продукта.

20. Материальный баланс химико-технологического процесса составляется на основе закона:

- 1) сохранения массы вещества и с учетом стехиометрических соотношений;
- 2) сохранения энергии и с учетом стехиометрических соотношений;
- 3) действующих масс и с учетом стехиометрических соотношений.

7. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация имеет целью определить степень достижения запланированных результатов обучения по дисциплине «Моделирование химических процессов» за определенный период обучения.

а) Планируемые результаты обучения и оценочные средства для проведения промежуточной аттестации:

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции	Оценочные средства
<p>ОПК-2 Способен участвовать в реализации современных технически совершенных технологий по выпуску конкурентоспособной продукции полиграфического и упаковочного производства</p>		
ОПК-2.1	Использует знания о современных материалах, технологиях и оборудовании для изготовления конкурентоспособной полиграфической и упаковочной продукции	<p>Перечень теоретических вопросов к зачету:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Механическая и химическая технологии, их особенности. 2. Важнейшие технологические понятия и определения. 3. Элементы, составляющие себестоимость продукта и пути ее снижения. 4. Основные направления в развитии технологии. 5. Характеристика и запасы сырья. Принципы обогащения сырья. Комплексное использование сырья. 6. Вода и воздух в промышленности. 7. Промышленная водоподготовка. 8. Основные показатели качества воды. 9. Энергетическая база промышленности. 10. Основные направления повышения эффективности использования сырьевых и топливно-энергетических ресурсов. 11. Классификация химико-технологических процессов. 12. Термодинамические расчеты химико-технологических процессов: равновесие в технологических процессах, скорость гомогенных технологических процессов, способы ее увеличения; общие особенности гетерогенных процессов, диффузионные стадии гетерогенных процессов. 13. Гетерогенные каталитические процессы. Их основные стадии и кинетические особенности. Контактные массы. 14. Общие сведения о химических реакторах, их классификация. Требования, предъявляемые к химическим реакторам. 15. Реактор идеального смешения. Реактор идеального вытеснения. Сравнение их эффективности. 16. Реакторы с неидеальной структурой потоков. Время пребывания в проточных реакторах. 17. Принципы моделирования ХТП и реакторов.

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции	Оценочные средства
		18. Понятие ХТС. Структура ХТС, величины, характеризующие их работу. 19. Модели ХТС. Возможности различного способа функционирования ХТС. 20. Компьютерные программы для химического моделирования.
ОПК-2.2	Выбирает материалы, технологии и оборудование для производства полиграфической и упаковочной продукции с учетом требований к качеству продукции и к её безопасности и с учётом экономических ограничений	Примерные практические задания: <u>Задача №1.</u> 380 кг серы 100 % чистоты сжигают в избытке воздуха 1,2, чтобы обеспечить степень выгорания серы 0,998. Содержание кислорода в воздухе составляет 0,21 объемных долей. Определить объем и состав образующегося при сжигании печного газа. <u>Задача №2.</u> 100 т руды, содержащей 0,32 масс. долей железа, 0,025 масс. долей меди и 0,015 масс. долей цинка подвергают селективному обогащению. При этом получают: флотационный колчедан, содержащий 0,47 масс. долей железа (степень обогащения – 0,95); халькопиритный концентрат, содержащий 0,28 масс. долей железа (степень обогащения – 0,80); цинковый концентрат, содержащий 0,46 масс. долей железа (степень обогащения – 0,79). Определить массу и выход каждого продукта. <u>Задача №3.</u> Определить расходные коэффициенты (РК) фосфорной кислоты концентрацией 55 % и аммиака концентрацией 98 % для производства 1 т ортофосфата аммония. <u>Задача №4.</u> Печной газ имеет состав (объемных долей): оксида серы (IV) – 10 %; кислород – 8 %; азот – 82 %. К нему добавляют воздух до содержания оксида серы (IV) 7 %. Объемная доля кислорода в воздухе – 21 %. Определить состав газа после корректировки и содержание в нем кислорода. <u>Задача №5.</u> Определить расход бурого угля, содержащего 70 масс. % С, водяного пара и воздуха для получения 1000 м ³ состава (объемн. %) СО – 40, Н ₂ -18, N ₂ -42. Процесс газификации идет по уравнениям: $C + H_2O = CO + H_2$, $2C + O_2 = 2CO$. Процесс окисления $2NO + O_2 \leftrightarrow N_2O_4$. Рассчитать состав равновесной газовой смеси, если исходная смесь содержит 5 % объемн. NO. Значение константы равновесия – 0,435. <u>Задача №6.</u> При окислении оксида серы (IV) в оксид серы (VI) в производстве серной кислоты в контактный аппарат поступает газ состава (% , объемн.): SO ₂ – 11; O ₂ -10; N ₂ – 79/ Степень окисления – 70 %. Рассчитать состав окисленного газа.
ОПК-2.3	Участвует в реализации технически совершенных современных технологий изготовления конкурентоспособной продукции	Примерные практические задания: <u>Задача №1.</u> Процесс описывается реакцией типа $A + B \rightarrow R$ с константой скорости $k = 0,54$ л/(моль/мин). Объемные потоки вещества А с концентрацией 1,8 моль/л и вещества В с концентрацией 2,7 моль/л равны 100 и 80 л/мин. Производительность реактора по продукту R составляет 8,64 кмоль/ч, концентрация продукта R на выходе - 0,8 моль/л. Определить

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции	Оценочные средства
	полиграфического и упаковочного производства	<p>требуемый объем реактора смешения.</p> <p><u>Задача № 2.</u> В непрерывном реакторе смешения проводится последовательная реакция типа $A \rightarrow R \rightarrow S$ с константами скоростей $k_1 = 0,5 \text{ ч}^{-1}$ и $k_2 = 0,8 \text{ ч}^{-1}$. Исходная концентрация вещества А равна 5 кмоль/м³. Продукты R и S на входе в реактор отсутствуют. Рассчитать необходимый объем реактора вытеснения, степень превращения вещества А, селективность и выход целевого продукта.</p> <p><u>Задача № 3.</u> В проточном РИС объемом 2 м³ проводится необратимая экзотермическая реакция с константой скорости, с^{-1}, описываемой уравнением $k=10^{12}e^{(-90000/RT)}$. Теплоемкость реакционной смеси равна 20190 Дж/(кг•К) и не зависит от температуры и степени превращения. Плотность реакционной смеси остается постоянной и равной 1000 кг/м³. Исходный реагент с концентрацией 6 кмоль/м³ подается в реактор со скоростью 5 м³/ч. Тепловой эффект равен 96600 Дж/моль. Температура в реакторе не должна превышать 333 К. Рассчитать, при какой температуре следует подавать исходный раствор, чтобы процесс протекал в адиабатических условиях.</p>
<p>ОПК-7</p> <p>Способен применять методы оптимизации технологических процессов производства упаковки, полиграфической продукции и промышленных изделий, производимых с использованием полиграфических технологий</p>		
ОПК-7.1	Анализирует технологический процесс производства печатной и упаковочной продукции с точки зрения необходимости оптимизации и внедрения инновационных технологий	<p>Перечень теоретических вопросов к зачету:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Производство аммиака 2. Производство азотной кислоты. 3. Производство серной кислоты. 4. Производство водорода. 5. Производство минеральных удобрений. 6. Производство солей. 7. Производство щелочей. 8. Процессы органического синтеза. 9. Технология нефти: первичная переработка нефти. 10. Деструктивная переработка нефти. 11. Очистка нефтепродуктов. 12. Синтез метилового спирта. 13. Синтез этилового спирта. 14. Производство бутадиена-1,3.

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции	Оценочные средства
		15. Хлорирование парафинов, их производных и бензола. 16. Производство ацетилена. 17. Основные методы получения ВМС. 18. Производство химических волокон. 19. Производство эластомеров. 20. Электрохимические производства. 21. Производство жиров. 22. Производство мыла. 23. Производство синтетических моющих средств. 24. Химическая технология и охрана окружающей среды: очистка промышленных выбросов и отходящих газов химических производств; очистка их сточных вод, переработка твердых отходов.
ОПК-7.2	Участвует в моделировании отдельных операций и технологического процесса производства печатной и упаковочной продукции в целом	<p>Примерные практические задания:</p> <p><u>Задача №1.</u> Составить материальный баланс хлоратора в производстве хлорбензола (на 1 т хлорбензола). Содержание жидких продуктов (ω, %): бензола – 65,0; хлорбензола – 32,0; дихлорбензола – 2,5; трихлорбензола – 0,5. Исходный технический бензол содержит 97,5 % C₆H₆, технический хлор – 98 % Cl₂.</p> <p><u>Задача №2.</u> Составить материальный баланс печи для сжигания серы производительностью 60 т/сутки. Степень окисления серы – 0,95. Коэффициент избытка воздуха – 1,5. Расчет вести на производительность печи по сжигаемой сере в кг/час.</p> <p><u>Задача №3.</u> Рассчитать тепловой баланс контактного аппарата для частичного окисления оксида серы (IV) оксид серы (VI) производительностью 25000 м³/ч. Исходная газовая смесь содержит (φ, %): оксида серы (IV) - 9,0; кислорода – 11,0; азота – 80,0. Степень окисления – 88 %. Температура входящего газа 460 °С, выходящего – 580 °С. Средняя теплоемкость смеси (условно принятая неизменной) – 2,052 кДж/ (м³·°С). Потери теплоты в окружающую среду 5 % от прихода теплоты.</p> <p><u>Задача №4.</u> Рассчитать объем полимеризатора стирола и составить тепловой баланс первого полимеризатора (в кДж на 1 т исходного стирола) при коэффициенте заполнения реактора 0,65 и рабочем объеме – 1,8 м³. Плотность стирола – 0,906 г/см³, теплоемкость стирола при 50 °С – 1,742 кДж/ (м³·°С), при 145 °С – 2,479 кДж/ (м³·°С); полистирола: при 20 °С – 1,457 кДж/ (м³·°С), при 145 °С – 3,119 кДж/ (м³·°С). Процесс начинается при 50 °С, заканчивается при 145 °С. Степень полимеризации – 48 %. Время пребывания в реакторе – 2 часа.</p>

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции	Оценочные средства
ОПК-7.3	Применяет оптимальные технологические решения и приёмы для повышения эффективности производства и качества печатной и упаковочной продукции	<p>Примерные практические задания:</p> <p>Задание 1. С помощью программы ChemCraft: а) постройте объёмные 3D модели молекул, укажите величины углов и длины связей; б) импортируйте декартовы координаты атомов в текстовом формате в ангстремах и борах; в) постройте пространственные модели молекулы: шаростержневую модель, полусферическую модель Стюарта-Бриглеба, модель Драйвинга; г) выведите ван-дер-ваальсовы сферы; д) рассчитать z-матрицу для молекулы.</p> <p>Задание 2. Нарисуйте в конструкторе Avogadro молекулу кофеина. 1. Сохраните структуру в формате mol. и откройте этот файл в редакторе BIOVIA Draw. Действительно ли это нужная Вам структура (проверьте по названию ИЮПАК)? 2. Просмотрите свойства полученной молекулы, импортируй-те декартовы координаты атомов в текстовом формате из расчетов GAMESS и Gaussians.</p> <p>Задание 3. В программе “РЕАКТОР” провести моделирование химико-технологических процессов, протекающих в реакторах РИВ, РИС и каскаде реакторов РИС при изменении следующих управляющих параметров: температура проведения процесса, начальное соотношение реагентов, число реакторов в каскаде, начальная концентрация исходного реагента. Проследить, как изменения управляющих параметров процесса сказываются на технологических показателях химико-технологического процесса. Исходные данные: Реакция $A \rightarrow R \rightarrow S$ протекает в реакторе идеального смешения без изменения плотности реакционной массы. Константы скорости реакций: $k_1=0.01 \text{ 1/с}$; $k_2=0.024 \text{ 1/с}$. Определить: -максимальную относительную концентрацию продукта R; -степень конверсии исходного вещества A; -относительную концентрацию продукта S при максимальном выходе продукта R.</p>

б) Порядок проведения промежуточной аттестации, показатели и критерии оценивания:

Промежуточная аттестация по дисциплине «Моделирование химических процессов» включает теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень усвоения обучающимися знаний, и практические задания, выявляющие степень сформированности компетенций, проводится в форме зачета.

Зачет с оценкой по данной дисциплине проводится в устной форме по экзаменационным билетам, которые включают 2 теоретических вопроса и одно практическое задание.

Показатели и критерии оценивания:

– на оценку **«отлично»** (5 баллов) – обучающийся демонстрирует высокий уровень сформированности компетенций, всестороннее, систематическое и глубокое знание учебного материала, свободно выполняет практические задания, свободно оперирует знаниями, умениями, применяет их в ситуациях повышенной сложности.

– на оценку **«хорошо»** (4 балла) – обучающийся демонстрирует средний уровень сформированности компетенций: основные знания, умения освоены, но допускаются незначительные ошибки, неточности, затруднения при аналитических операциях, переносе знаний и умений на новые, нестандартные ситуации.

– на оценку **«удовлетворительно»** (3 балла) – обучающийся демонстрирует пороговый уровень сформированности компетенций: в ходе контрольных мероприятий допускаются ошибки, проявляется отсутствие отдельных знаний, умений, навыков, обучающийся испытывает значительные затруднения при оперировании знаниями и умениями при их переносе на новые ситуации.

– на оценку **«неудовлетворительно»** (2 балла) – обучающийся демонстрирует знания не более 20% теоретического материала, допускает существенные ошибки, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.

– на оценку **«неудовлетворительно»** (1 балл) – обучающийся не может показать знания на уровне воспроизведения и объяснения информации, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.