



ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Перший (бакалаврський)</i>
Галузь знань	<i>16 Хімічна та біоінженерія</i>
Спеціальність	<i>161 Хімічні технології та інженерія</i>
Освітня програма	<i>Для всіх освітніх програм спеціальності 161 Хімічні технології та інженерія</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>3 курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>3 кредитів</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік письмовий</i>
Розклад занять	<i>Лекція 2 години на тиждень (1 пара), практичні заняття 2 години на 2 тижні (1 пара) за розкладом на rozklad.kpi.ua</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектори: <i>к.т.н., доцент Супрунчук Володимир Ілліч , телеграм: 0965901376</i> Практичні заняття: <i>к.т.н., доцент Супрунчук Володимир Ілліч , телеграм: 096501376</i>
Розміщення курсу	Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance); доступ за запрошенням викладача

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Кредитний модуль «Теоретичні основи хімічної технології» займає важливе місце у формуванні професійного світогляду сучасного фахівця з хімічної технології. Окрім вивчення фізико – хімічного обґрунтування процесів хімічної технології неорганічних речовин є нагальна потреба в ранньому ознайомленню студентів молодших курсів бакалаврату з типовими фізико – хімічними, тепловими і механічними процесами в технології неорганічних речовин. Визначення маршрутів ізотермічної та політермічної кристалізації в дво-, три- та чотирикомпонентних системах. Розрахунок робочого об'єму технологічного реактору в ізотермічних та адіабатичних умовах технологічного процесу. На цій стадії навчання студенти, які паралельно вивчають дисципліни «Фізична хімія» і «Процеси та апарати хімічної технології», мають можливість наочно пересвідчитися в практичному прикладанні теоретичних знань та умінь до реальних об'єктів і до вирішення ряду реальних проблем їхньої майбутньої спеціальності.

Предмет дисципліни: *фізико-хімічні закономірності хімічних процесів та їх використання для обґрунтування технологічних режимів виробництва неорганічних речовин та водоочищення. Вивчення методів розрахунків: рівноважного виходу газофазних реакцій, фізико-хімічних величин реальних газів, необхідних для корекції рівноважного виходу і складання матеріального і теплового балансів; особливість розрахунків нейтралізаційно-осаджувальних процесів*

виробництва неорганічних речовин та водоочищення з використанням водних розчинів. Обґрунтування маршрутів ізотермічної та політермічної кристалізації в системах різної компонентності та використання кінетичних рівнянь для розрахунку робочого об'єму реактора, обчислення оптимальної температури процесу.

Метою дисципліни є формування у студентів здатностей:

- опанування студентами специфічних методів термодинамічного аналізу процесів хімічної технології неорганічних речовин,
- глибоке розуміння суті перетворення сировини в цільову продукцію
- правильне оцінювання спеціалістам-експлуатаційниками коливання значень оптимальних технологічних режимів, не допускаючи їх перехід у фазу, що важко регулюється і попереджуючи таким чином несанкціоновані зупинки виробництва, а тим паче аварійні ситуації.
- методів моделювання маршрутів та технологічних режимів галургійних процесів ізотермічної кристалізації при виробництві добрив та солей з використанням діаграм розчинення одно-, дво-, трьох- та чотирьохкомпонентних систем;
- методів підготовки кінетичних рівнянь та експериментальних даних для розрахунків робочих об'ємів реакторів; методів розрахунків оптимальних значень технологічних режимів процесів виробництва неорганічних речовин.

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

ЗНАННЯ:

- сукупності фізико-хімічних властивостей реактантів, які впливають на перебіг технологічного процесу та інтервалу зміни їх значень при індивідуальному та сукупному варіюванні параметрів технологічного процесу;
- сукупності фізико-хімічних властивостей процесів, на яких ґрунтуються технологічні режими виробництва та інтервали і напрямки їх зміни при індивідуальному та сукупному варіюванні параметрів технологічного процесу; методів обґрунтування та розрахунку значень технологічних режимів процесів хімічної технології неорганічних речовин.
- Процеси ХТНР, що базуються на системах послідовно-паралельних в більшості оборотних реакцій за участю газів, рідких, твердих речовин та їх різноманітних сполук, які здійснюються в присутності інертних домішок при нестехіометричному співвідношенні реактантів та наявності у вихідній реакційній суміші продуктів реакції.
- Технологічні режими процесів ХТНР характеризуються наявністю рециклів, з широким інтервалом зміни температури, тиску, співвідношення компонентів реакційної суміші гідрогену та газодинамічних умов на різних стадіях процесу.
- Складний взаємовплив як складу реакційної суміші так і технологічних режимів проведення процесу на якість цільової продукції потребує від спеціалістів напряму „Хімічна технологія неорганічних речовин” глибоких знань суті перетворень сировини в якісну продукцію та вміння проводити обґрунтування та розрахунки значень технологічних режимів в умовах дефіциту вихідних даних, а також здійснювати специфічний аналіз впливу параметрів процесу на підвищення ступенів перетворення вихідної сировини, зменшення питомих енерговитрат та поліпшення екологічних характеристик виробництва;

уміння:

- обчислити значення величин, що характеризують ступінь глибини проходження технологічного процесу стосовно кожного компоненту з використанням стехіометричних закономірностей;
- обчислити значення термодинамічних величин, що використовуються для розрахунку матеріального та теплового балансу процесу, в тому числі в реальних газових системах та при дефіциті довідкових даних;
- складати різними методами розрахункові рівняння для обчислення рівноважного виходу цільового продукту стосовно конкретного процесу ХТНР за участю газової фази; складати розрахункові рівняння для обґрунтування технологічних режимів проведення нейтралізаційно-осаджувальних та хемо-абсорбційних процесів ХТНР;
- визначати розрахунковими методами значення технологічних режимів, що відповідають максимальному ступеню перетворення вихідної сировини та максимальній енерготехнологічності процесу;
- визначення режимів та маршрутів проведення технологічних процесів ХТНР, що ґрунтуються на фазовій рівновазі в багатокомпонентних системах;
- трансформування перемінних кінетичних рівнянь для використання їх в розрахунку робочого об'єму технологічних реакторів; обчислення робочого об'єму реактора, що працює в ізотермічних, адіабатичних або політермічних умовах з використанням кінетичних рівнянь і (або) експериментальних даних;
- обчислення температурного режиму проведення процесу і знати інженерні методи його підтримування та стабілізації; використання спеціальних методів розрахунку робочого об'єму реакторів для гетерогенно-каталітичних процесів ХТНР.

досвід: застосовувати:

- основні фізико-хімічні методи аналізу й оцінки стану хіміко-технологічних систем;
- сучасні уявлення про механізм і принципи хімічних перетворень речовин і перетворення енергії в них;
- базові уявлення про ознаки, параметри, характеристики, властивості гомогенних та гетерогенних систем, розчинів електролітів і неелектролітів у хімічних технологіях неорганічних речовин
- використовувати математичний апарат для освоєння теоретичних основ і практичного використання методів фізико-хімічних досліджень;
- здатність використовувати в галузі теорії й практики хімічних досліджень для освоєння теоретичних основ і методів хімічної технології;
- використовувати знання і уміння в галузі природничо-наукових дисциплін для теоретичного освоєння загально професійних дисциплін і рішення практичних завдань хімічної технології: використовувати набуті знання і уміння для обґрунтування технологічних режимів.

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Зазначається перелік дисциплін, знань та умінь, володіння якими необхідні студенту для успішного засвоєння дисципліни:

Вища математика	Системи алгебраїчних рівнянь. Звичайні диференціальні рівняння та їх системи. Матриці та матричні перетворення.
Фізична хімія	Термодинаміка та кінетика хімічних процесів
Фізика	Молекулярна фізика

Дисципліни, які базуються на результатах навчання: дисципліни циклу професійної підготовки, в рамках яких передбачена обробка та аналіз результатів експериментальних досліджень, оцінка похибок при виконанні інженерних розрахунків та застосування чисельних методів для вирішення практичних занять.

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Матеріальний і тепловий баланс процесів ХТНР. Стехіометричні розрахунки процесів ХТНР.

Вступ. Мета і задачі дисципліни ТОХТНР. Специфіка процесів ХТНР. Класифікація процесів ХТНР по типу реакцій. Хімічна концепція процесів ХТНР. Вимоги до хіміко-технологічних систем ХТНР.

Матеріальний та тепловий (енергетичний) баланс хіміко-технологічного процесу. Фізико-хімічні величини і поняття, що використовуються для розрахунку теплового балансу процесу. Фізична теплота речовини. Теплота хімічної реакції, розчинення, нейтралізації, згоряння, фазового переходу. Розрахунок матеріального та теплового балансу в системах із самочинним розділенням матеріальних потоків.

Тема 2. Обґрунтування та розрахунок термодинамічних режимів проведення процесів ХТНР за участю газової фази

Величини, що характеризують ступінь проходження технологічного процесу. Розрахунок ступенів перетворення з використанням понять: кількість речовини (моль), об'ємно-молекулярна концентрація, молярна частка, об'ємна частка, парціальний тиск. Розрахунок ступеня перетворення в системах зі змінною кількістю молів.

Стехіометричний закон. Поняття глибини проходження реакції (міра реакції). Рівняння зв'язку між кількістю реагуючих компонентів вихідної сировини і продуктів реакції. Взаємозв'язок між ступенями перетворення вихідної сировини та продуктів реакції в стехіометричній та нестехіометричній суміші. Границі зміни значення ступеня перетворення компонентів реакції.

Термодинамічні умови проведення процесів ХТНР. Термодинамічний аналіз – перший етап створення нових та удосконалених діючих систем ХТНР. Реалізація умов ізольованої, закритої та відкритої термодинамічної системи в умовах промислового виробництва ХТНР. Обчислення термодинамічних величин при дефіциті довідкових даних. Порівняльні методи обчислення термодинамічних величин.

Умови термодинамічної та хімічної рівноваги. Константа рівноваги як кількісна характеристика глибини проходження технологічного процесу. Рівняння ізотерми хімічної реакції. Роль стандартної температури і стандартного тиску при обчисленні енергії Гіббса і константи хімічної рівноваги.

Тема 3. Реальні гази в процесах ХТНР

Рівноважний вихід цільового продукту як критерій досконалості технологічного процесу. Концентраційні умови проведення газофазних процесів ХТНР. Методи обчислення рівноважного виходу цільового продукту, які використовуються в практиці проектування та експлуатації процесів ХТНР. Вихідні дані для розрахунку рівноважного виходу. Вибір базового компоненту. Вибір типу концентрації для складання розрахункового рівняння. Визначення рівноважної концентрації реактантів та рівноважної суми концентрацій реактантів через базовий компонент. Узгодження одиниці стандартного тиску константи рівноваги з одиницею тиску в реакторі.

Методика складання розрахункових рівнянь з використанням поняття ступеня перетворення. Методика складання розрахункового рівняння з використанням поняття міри

реакції. Матеріальний баланс атомів елементів – складових частин реактантів при здійсненні хімічного процесу.

Складання часткових матеріальних балансів атомів елементів в стані рівноваги хімічного процесу. Система рівнянь часткових матеріальних балансів атомів елементів і концентраційного виразу константи рівноваги. Умови рішення системи рівнянь (приклад). Методика складання розрахункового рівняння з використанням стехіометричного балансу кількості молів реактантів в стані рівноваги. Визначення рівноважного складу реакційної суміші в системах без і зі зміною кількості молів в ході процесу.

Процеси ХТНР, які проводяться при високому тиску. Рівняння стану реальних газів і межі їх застосування в технологічних розрахунках. Використання рівнянь стану реальних газів для розрахунку властивостей суміші реальних газів. Закон відповідних станів і його застосування для розрахунку властивостей реальних газів. Приведені параметри газів. Критичні параметри газів. Псевдокритичні параметри суміші газів. Псевдоприведені параметри суміші газів. Коефіцієнт стисливості газів, ступінь стисливості газів і їх взаємозв'язок.

Термодинамічні властивості реальних газів і їх залежність від температури та тиску. Диференціальні рівняння термодинаміки, що використовуються для розрахунку властивостей реальних газів. Параметри технологічних процесів і незалежні змінні диференціальних рівнянь термодинаміки. Залежність ентальпії, ентропії, внутрішньої енергії, теплоємності реальних газів від тиску і температури. Взаємозв'язок ізобарної та ізохорної теплоємності реальних газів.

Дроселювання реальних газів. Диференціальний коефіцієнт дроселювання. Температура інверсії. Розрахунок зміни температури дроселювання реальних газів. Використання T-S, T-i, T-V діаграм для визначення коефіцієнтів дроселювання та температури інверсії. Ізоентропійне розширення реального газу. Коефіцієнт ізоентропійного розширення газу. Розрахунок зміни температури газу при ізоентропійному розширенні. Розрахунок значення термодинамічних функцій реальних газів методом інтегрування диференціальних рівнянь термодинаміки.

Тема 4. Обґрунтування та розрахунок режимів проведення процесів ХТНР у водних розчинах

Складні послідовні та послідовно-паралельні оборотні (рівноважні) процеси в ХТНР. Принцип незалежності складних паралельних та послідовно-паралельних реакцій. Вихідні дані для розрахунку складних оборотних процесів. Вибір базових рівнянь та базових компонентів для розрахунку рівноважної суміші реактантів складних процесів. Системи алгебраїчних рівнянь утворених за принципом незалежності складних оборотних процесів. Використання понять ступінь перетворення, міра реакції та стехіометричного балансу молів реактантів для складання системи розрахункових рівнянь складних оборотних процесів.

Використання часткових матеріальних балансів атомів елементів для складання системи розрахункових рівнянь складних оборотних процесів. Особливості розрахункових рівнянь для оборотних процесів за участю твердої фази.

Процеси ХТНР, які здійснюються за участю водних розчинів, термодинамічне обґрунтування технологічних параметрів їх проведення. Поняття, які використовуються для складання розрахункових рівнянь, що кількісно описують характеристики процесів у розчинах. Вплив кислотності (активності іонів водню) на здійснення процесів у розчинах. Умова рівноваги (умова закону діючих мас) і використання її для складання розрахункових рівнянь. Умова матеріального балансу за іонами в розчині. Рівняння матеріального балансу за іонами водню в розчині.

Складання розрахункових рівнянь для обчислення концентрації іонно-молекулярних часток в розчині в разі самочинного установаження рівноваги в розчині. Рівноважні перетворення у водних розчинах при наявності твердої фази. Добуток розчинності (ДР) як кількісний фактор рівноваги в розчині в присутності твердої фази. Використання умов рівноваги, матеріального балансу за центральним атомом та іонами водню в складанні розрахункових рівнянь для

обчислення розчинності твердої фази в умовах примусової та самочинно установленної рівноважної концентрації іонів водню в розчині. Умова електронейтральності в розчині і використання її для складання рівняння матеріального балансу за іонами водню.

Обчислення розчинності твердої фази в технологічних розчинах в присутності однойменних іонів. Сульфатний режим одержання ЕФК. Аналіз нейтралізаційно-осаджувальних методів переробки фосфатвмісної сировини. Рівноважні процеси за участю газової фази та водного розчину. Абсорбційна ємність поглинача при перебігу хімічної реакції в розчині.

Тема 5. Моделювання маршрутів технологічних процесів з використанням фазових діаграм

Технологічні процеси ХТНР, що ґрунтуються на фазових рівновагах. Технологічні проблеми, які вирішуються при аналізі фазових діаграм.

Моделювання процесів ізотермічної та політермічної (ізогідричної) кристалізації у двохкомпонентних системах різного типу. Ізотерма упарювання. Політерма кристалізації. Маршрут і перебіг процесів і їх моделі на діаграмах розчинності. Визначення складу твердої фази, що кристалізується. Визначення складу насиченого розчину, рівноважного з твердою фазою. Розрахунок твердої фази, що утворюється при ізотермічній та політермічній кристалізації з використанням правила важеля.

Визначення температури упарювання для одержання твердої фази заданого складу. Визначення температурного інтервалу ізогідричної кристалізації для одержання максимальної кількості чистої солі та суміші солей заданого складу.

Моделювання процесів ізотермічної та політермічної кристалізації в чотирьохкомпонентних системах. Зображення чотирьохкомпонентних простих та взаємних систем. Проекції чотирьохкомпонентних систем: водна та сольова. Концентраційна система вираження складу чотирьохкомпонентних систем. Визначення ступеня упарювання для одержання чистої солі та суміші солей заданого складу. Використання методик матеріального балансу для кількісних розрахунків.

Моделювання процесу конверсії солей в чотирьохкомпонентній взаємній системі. Визначення маршруту процесів кристалізації при розчиненні суміші нестабільної пари солей в ізотермічних умовах. Політерма розчинності та її зображення на сольовій проекції. Політермічна кристалізація. Модель циклічного процесу та визначення його параметрів за допомогою діаграми розчинності чотирьохкомпонентної взаємної системи.

Тема 6. Кінетичний аналіз технологічних процесів та розрахунок робочого об'єму технологічних реакторів

Технічна кінетика та її завдання. Основні поняття і визначення швидкості ХТП. Константа швидкості, порядок реакції. Кінетична крива. Типи кінетичних кривих.

Зміна концентраційних перемінних в кінетичних рівняннях простих, оборотних і складних реакцій в системі без і зі зміною об'єму, (або кількості молів) при перебігу процесу. Перетворення кінетичних рівнянь до вигляду, придатного для розрахунку хімічного реактору.

Особливості гетерогенно-каталітичних процесів ХТНР. Квазігомогенна модель твердого каталізатора. Лімітуюча стадія процесу. Внутрішньодифузійна стадія гетерогенно-каталітичного процесу і її особливості. Ступінь використання внутрішньої поверхні.

Реакторне обладнання технологічних процесів ХТНР. Ідеальні моделі реакторів (P13, P1B) та їх промислова метаморфоза. Кінетика реакцій у відкритих хімічних системах. Характеристичні рівняння реакторів і їх використання для розрахунку робочого об'єму реакторів ХТНР. Обґрунтування технологічних режимів проведення процесів ХТНР. Температурний режим процесів ХТНР (ізотермічний, адіабатичний, політермічний). Рівняння адіабати технологічного реактора. Розрахунок робочого об'єму ізотермічного, адіабатичного, політермічного реакторів з використанням кінетичних рівнянь.

Оптимальна температура проведення процесів ХТНР. Лінія оптимальних температур проведення процесу і її розрахунок з використанням кінетичних констант хімічної реакції.

Розрахунок лінії оптимальних температур проведення процесу з використанням поняття рівноважної температури. Інженерні методи підтримання оптимальної температури (проміжне охолодження, байпасування холодної реакційної суміші і ін). Границі використання методів.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

Базова:

1. Астрелін І.М., Теорія процесів виробництв неорганічних речовин. / Запольський А.К., Супрунчук В.І. і ін. [Текст]- К.: Вища школа, 1992.-399с.
2. Лобойко О.Я. Теоретичні основи технології неорганічних виробництв/Гринь Г.І., Товажнянський Л.Л. [Текст]-Харків:Видавництво «Підручник НТУ «ХПІ»», 2017.-152с.
3. Солтис М.П., Закордоский В.П., Теоретичні основи процесів хімічної технології [Текст]- Львів: Видавництво ЛНУ ім.Івана Франка,2003.-430с.
4. Теоретичні основи технології неорганічних виробництв:підруч./О.Я.Лобойко, Г.І. Гринь, Л.Л. Товажнянський та ін.; за ред.О.Я. Лобойка та Л.Л. Товажнянського.- Харків:Вид-во «Підручник НТУ»ХПІ».2017.152 с.

Додаткова

5. Позин М.Е., Зинюк Р.Ю. Физико-химические основы неорганической технологии. [Текст]- Санкт-Петербург:Химия, 1993.-440 с.
6. Батлер Дж.Н. Ионные равновесия. Математическое описание. [Текст]-Л.:Химия,1973.-448 с.
7. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. [Текст]-М.:Химия,1975.-584 с.
8. Киреев В.А. Методы химических расчетов в термодинамике химических реакций. [Текст]-М.:Химия,1977.-360 с.
9. Викторов М.М. Методы вычисления физико-химических величин и прикладные расчеты [Текст].-Л.:Химия,1977.-360 с.
10. Жоров Ю.М. Термодинамика химических процессов.-М.:Химия,1985.-464 с.
11. И.П.Мухленов Расчеты химико-технологических процессов./под ред. И.П.Мухленова. [Текст].--Л.:Химия,1982.-248 с.
12. Методические указания к проведению самостоятельной работы по курсу „Теоретические основы ХТНВ”./сост. Супрунчук В.И. [Текст].--К.:КПИ,1990.-59 с.
13. Хемосорбционные процессы [Текст] - М:Химия, 1989. - 240 с.
1. Бретшнайдер С. Общие основы химической технологии [Текст] / Бретшнайдер С., Ка4вецкий В., Лейко Я. и др. / Пер с польского под ред. П.Г. Романкова. - Л.:Химия, 1977. - 504 с.
14. Левеншпиль О. Инженерное оформление химических процессов [Текст] - М.:Химия, 1969. - 612 с.
16. Аксельрод Ю.В. Газожидкостные Рамм В.М. Абсорбция газов [Текст] -М: Химия, 1975. - 655 с.
17. Смирнов Н.Н., Волжинский А.И. Химические реакторы в примерах и задачах [Текст] - Л.: Химия, 1982.- 248 с.

Інформаційні ресурси

Дистанційний курс <http://tnr.xtf.kpi.ua/r/dis/>. Google G Suite for Education. Режим доступу: Google Classroom

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні заняття

Вичитування лекцій з дисципліни проводиться паралельно з виконанням студентами практичних занять та розглядом ними питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені на платформі Sikorsky-distance [9]. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

№	Дата	Опис заняття
1	лютого 2022 р.	Мета і задачі дисципліни ТОХТНР. Специфіка процесів ХТНР. Класифікація процесів ХТНР по типу реакцій. Хімічна концепція процесів ХТНР
2	лютого 2022 р.	Матеріальний та тепловий (енергетичний) баланс хіміко-технологічного процесу. Фізико-хімічні величини і поняття, що використовуються для розрахунку матеріального та теплового балансу процесу. Фізична теплота речовини. Тепловий ефект та ентальпія хімічної реакції, розчинення, нейтралізації, згорання, фазового переходу.
3	лютого 2022р.	Величини, що характеризують ступінь проходження технологічного процесу. Розрахунок ступенів перетворення з використанням понять: кількість речовини (моль), об'ємно-молекулярна концентрація, молярна частка, парціальний тиск. Розрахунок ступеня перетворення в системах зі змінною кількістю моль. Стехіометричний закон. Поняття глибини проходження реакції (міра реакції). Рівняння зв'язку між кількістю реагуючих компонентів вихідної сировини і продуктів реакціїГраниці зміни значення ступеня перетворення компонентів реакції.
4	лютого 2022 р.	Термодинамічні умови проведення процесів ХТНР. Термодинамічний аналіз – перший етап створення нових та удосконалених діючих систем ХТНР. Реалізація умов ізольованої, закритої та відкритої термодинамічної системи в умовах промислового виробництва ХТНР. Обчислення термодинамічних величин при дефіциті довідкових даних. Умови термодинамічної та хімічної рівноваги. Константа рівноваги як кількісна характеристика глибини проходження технологічного процесу. Рівняння ізотерми хімічної реакції.
5	березня 2022 р.	Рівноважний вихід цільового продукту як критерій досконалості

		<i>технологічного процесу. Концентраційні умови проведення газофазних процесів ХТНР. Методи обчислення рівноважного виходу цільового продукту, які використовуються в практиці проектування та експлуатації процесів ХТНР. Вихідні дані для розрахунку рівноважного виходу. Вибір базового компоненту. Вибір типу концентрації для складання розрахункового рівняння. Визначення рівноважної концентрації реактантів та рівноважної суми концентрацій реактантів через базовий компонент.</i>
6	<i>березня 2022 р.</i>	<i>Методика складання розрахункових рівнянь з використанням поняття ступеня перетворення. Методика складання розрахункового рівняння з використанням поняття міри реакції.. Складання часткових матеріальних балансів атомів елементів в стані рівноваги хімічного процесу. Система рівнянь часткових матеріальних балансів атомів елементів і концентраційного виразу константи рівноваги. Умови рішення системи рівнянь (приклад). Методика складання розрахункового рівняння з використанням стехіометричного балансу кількості молів реактантів в стані рівноваги..</i>
7	<i>березня 2022 р.</i>	<i>Складні послідовні та послідовно-паралельні оборотні (рівноважні) процеси в ХТНР. Принцип незалежності складних паралельних та послідовно-паралельних реакцій. Вихідні дані для розрахунку складних оборотних процесів. Вибір базових рівнянь та базових компонентів для розрахунку рівноважної суміші реактантів складних процесів. Системи алгебраїчних рівнянь утворених за принципом незалежності складних оборотних процесів.</i>
8	<i>березня 2022 р.</i>	<i>Використання понять ступінь перетворення, міра реакції та стехіометричного балансу молів реактантів для складання системи розрахункових рівнянь складних оборотних процесів Використання часткових матеріальних балансів атомів елементів для складання системи розрахункових рівнянь складних оборотних процесів. Особливості розрахункових рівнянь для оборотних процесів за участю твердої фази.</i>
9	<i>квітня 2022 р</i>	<i>Процеси ХТНР, які проводяться при високому тиску. Рівняння стану реальних газів і межі їх застосування в технологічних розрахунках. Використання рівнянь стану реальних газів для розрахунку властивостей суміші реальних газів. Закон відповідних станів і його застосування для розрахунку властивостей реальних газів. Приведені параметри газів. Критичні параметри газів. Псевдокритичні параметри суміші газів. Псевдоприведені параметри суміші газів.</i>
10	<i>квітня 2022 р</i>	<i>Термодинамічні властивості реальних газів і їх залежність від температури та тиску. Диференціальні рівняння термодинаміки, що використовуються для розрахунку властивостей реальних газів. Параметри технологічних процесів і незалежні змінні диференціальних рівнянь термодинаміки. Залежність ентальпії, ентропії, внутрішньої енергії, теплоємності реальних газів від тиску і температури.</i>

11	Квітня 2022 р	Дроселювання реальних газів. Диференціальний коефіцієнт дроселювання. Температура інверсії. Розрахунок зміни температури дроселювання реальних газів. Використання T-S, T-i, T-V діаграм для визначення коефіцієнтів дроселювання та температури інверсії. Ізоентропійне розширення реального газу. Коефіцієнт ізоентропійного розширення газу. Розрахунок зміни температури газу при ізоентропійному розширенні.
12	квітня 2022 р	Процеси ХТНР, які проводяться при високому тиску. Рівняння стану реальних газів і межі їх застосування в технологічних розрахунках. Використання рівнянь стану реальних газів для розрахунку властивостей суміші реальних газів. Закон відповідних станів і його застосування для розрахунку властивостей реальних газів. Приведені параметри газів. Критичні параметри газів. Псевдокритичні параметри суміші газів. Псевдоприведені параметри суміші газів.
13	Травня 2022 р	Складання розрахункових рівнянь для обчислення концентрації іонно-молекулярних часток в розчині в разі самочинного устанавлення рівноваги в розчині. Рівноважні перетворення у водних розчинах при наявності твердої фази. Добуток розчинності (ДР) як кількісний фактор рівноваги в розчині в присутності твердої фази. Використання умов рівноваги, матеріального балансу за центральним атомом та іонами водню в складанні розрахункових рівнянь для обчислення розчинності твердої фази в умовах примусової та самочинноустановленої рівноважної концентрації іонів водню в розчині.
14	травня 2022 р	Обчислення розчинності твердої фази в технологічних розчинах в присутності одноіменних іонів. Сульфатний режим одержання ЕФК. Аналіз нейтралізаційно-осаджувальних методів переробки фосфатвмісної сировини. Рівноважні процеси за участю газової фази та водного розчину.
15	травня 2022 р.	Маршрути ізотермічної та політермічної (ізогідричної) кристалізації в дво-та трикомпонентних системах різного типу. Обчислення матеріального балансу кристалізації.
16	травня 2022 р.	Маршрути ізотермічної кристалізації у взаємних чотирикомпонентних системах. Розрахунок матеріального балансу кристалізації. Політермічна кристалізація. Обґрунтування конверсійного перетворення солей з використанням діаграми розчинності чотирикомпонентної взаємної системи. Розрахунок матеріального балансу кристалізації.
17	Червня 2022 р.	Перетворення кінетичних рівнянь з використанням поняття ступеня перетворення. Оптимальна температура проведення технологічного процесу, який ґрунтується на оборотній ізотермічній реакції. Розрахунок оптимальної температури з використанням кінетичних констант реакції. Розрахунок оптимальної температури з використанням поняття рівноважної температури.
18	Червня 2022 р.	Розрахунок робочого об'єму ізотермічного, адіабатичного та

		політермічного реактора з використанням ідеальних моделей реакторів (P13, P13-H, P1B). Розрахунок реакторів гетерогенних процесів
--	--	--

Практичні заняття

Основні завдання циклу практичних занять з кредитного модуля "Теоретичні основи хімічної технології" є закріплення теоретичних знань, що набуті на лекціях та при самостійній роботі, для вирішення конкретних практичних завдань та прикладів з фахового напрямку. Для цього на практичних заняттях детально вивчаються: розрахунки фізико-хімічні властивостей компонентів сировини, готового продукту при різних температурах та тисках; обґрунтування та розрахунок значення технологічних параметрів; обчислення оптимальних режимів проведення процесів.

Тиждень	Тема	Опис запланованої роботи
1	Стехіометричні розрахунки. Взаємозв'язок ступенів перетворення та кількості сировини і продуктів за стехіометричними рівняннями. Розрахунок рівноважного виходу продукту газофазної реакції з використанням понять ступінь перетворення	Відповідно до отриманого індивідуального завдання опанувати використання математичного виразу стехіометричного закону для стехіометричних розрахунків. Опанувати використання математичного виразу стехіометричного закону для складання рівнянь розрахунку рівноважного значення степеня перетворення Продемонструвати розрахунки викладачу.
2	Розрахунок рівноважного виходу продукту газофазної реакції з використанням поняття міра реакції. Розрахунок рівноважного виходу продукту газофазної реакції з використанням методу балансу кількості атомів елементів речовин компонентів реакції.	Відповідно до отриманого індивідуального завдання Опанувати використання математичного виразу стехіометричного закону для складання рівнянь розрахунку рівноважного значення міри реакції .Опанувати методику складання розрахункового рівняння з використанням балансу кількості атомів Продемонструвати розрахунки викладачу.
3	Розрахунок рівноважного виходу продукту газофазної реакції з використанням методу балансу кількості атомів елементів речовин компонентів реакції Обчислення ентальпії газових компонентів сировини і продуктів хіміко-технологічного процесу при зміні температури і тиску реального газу.	Відповідно до отриманого індивідуального завдання Опанувати методику складання розрахункового рівняння кількості молів речовини. Опанувати використання диференціальних рівнянь термодинаміки для обчислення ентальпії реального газу Продемонструвати розрахунки викладачу.

4	Обчислення ентропії газових компонентів сировини і продуктів хіміко-технологічного процесу при зміні температури і тиску реального газу.	Відповідно до отриманого індивідуального завдання опанувати використання диференціальних рівнянь термодинаміки для розрахунку ентропії реального газу Продемонструвати розрахунки викладачу.
5	Розрахунок внутрішньої енергії газових компонентів сировини і продуктів хіміко-технологічного процесу при зміні температури і тиску реального газу.	Відповідно до отриманого індивідуального завдання провести розрахунок внутрішньої енергії газових компонентів сировини і продуктів хіміко-технологічного процесу при зміні температури і тиску реального газу Продемонструвати розрахунки викладачу.
6	Обчислення теплоємності газових компонентів сировини і продуктів хіміко-технологічного процесу при зміні температури і тиску реального газу. Обчислення значення константи рівноваги газофазного ХТП за участю реального газу. Розрахунок зміни температури при дроселюванні реального газу. Розрахунок зміни температури при ізоентропійному розширенні ідеального та реального газу.	Відповідно до отриманого індивідуального завдання Опанувати використання диференціальних рівнянь термодинаміки для розрахунку теплоємності реального газу. Опанувати методику використання коефіцієнту фугітивності для обчислення константи рівноваги. : Опанувати методику інтегрування рівняння зміни температури при дроселюванні реального газу. Опанувати методику використання диференціальних рівнянь термодинаміки для розрахунку зміни температури в ізоентропійному процесі Продемонструвати розрахунки викладачу.
7	Обчислення іонного складу технологічного розчину у випадку примусового і контролюємого установлення кислотності технологічного розчину. Розрахунок іонного складу технологічного розчину при самочинному установленні рівноваги в розчині. Розрахунок іонного складу технологічного розчину у випадку примусового і контрольованого установленні кислотності технологічної системи в присутності твердої фази. Обчислення іонного складу технологічної системи при розчиненні твердого компоненту в розчині з одноіменним катіоном або аніоном при самочинному встановленні рівноваги	Відповідно до отриманого індивідуального завдання Опанувати методику використання добутку розчинності для складання розрахункових рівнянь. Опанувати методику використання балансу за іонами водню для складання розрахункового рівняння визначення розчинності твердої фази Опанувати методику використання балансу за центральним атомом для розрахунку розчинності твердої фази в присутності стороннього катіону або аніону для визначення розчинності твердої фази . Опанувати методику використання матеріального балансу за іонами водню для визначення розчинності твердої фази при самочинному встановленні рівноваги Продемонструвати розрахунки викладачу.

8	Виявлення маршрутів ізотермічної та політермічної (ізогідричної) кристалізації в дво-, три- та чотирикомпонентних системах. Розрахунок матеріального балансу кристалізації	Відповідно до отриманого індивідуального завдання провести Розрахунок матеріального балансу кристалізації. Продемонструвати розрахунки викладачу.
9	Перетворення кінетичних рівнянь з використанням поняття ступеня перетворення. Розрахунок оптимальної температури. Розрахунок робочого об'єму ізотермічного, адіабатичного, політермічного реактора з використанням кінетичних рівнянь та експериментальних кінетичних даних	Відповідно до отриманого індивідуального завдання провести Розрахунок робочого об'єму ізотермічного, адіабатичного, політермічного реактора з використанням кінетичних рівнянь та експериментальних кінетичних даних. Продемонструвати розрахунки викладачу.

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, оформлення звітів з комп'ютерних практикумів, виконання розрахункової роботи, підготовка до захисту практичних завдань та розрахункової роботи, підготовка до екзамену. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид СРС	Кількість годин на підготовку
Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, оформлення звітів з комп'ютерних практикумів	2 – 3 години на тиждень
Виконання розрахункової роботи	12 годин
Підготовка до КР (повторення матеріалу)	4 години
Підготовка до екзамену	30 годин

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

У звичайному режимі роботи університету лекції та комп'ютерні практикуми проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, комп'ютерні практикуми – у комп'ютерних класах. У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський. Відвідування лекцій та комп'ютерних практикумів є обов'язковим.

На початку кожної лекції проводиться опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів (Google Forms, menti.com, Kahoot тощо). Перед початком чергової теми лектор може надсилати питання із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою та підвищення зацікавленості.

Правила здачі практичних робіт та розрахункової роботи:

1. До захисту допускаються студенти, які правильно виконали розрахунки (при неправильно виконаних розрахунках їх слід усунути).

2. Здача відбувається за графіком, зазначеним у п.5 за індивідуальними завданнями.
3. Після перевірки завдання викладачем на здачі роботи виставляється загальна оцінка і робота вважається захищеною.
4. Несвоєчасні захист і виконання роботи без поважної причини штрафуються відповідно до правил призначення заохочувальних та штрафних балів.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

1. Несвоєчасне виконання комп'ютерного практикуму без поважної причини штрафуються 1 балом;
2. Несвоєчасний захист роботи без поважної причини штрафуються 1 балом;
3. За кожний тиждень запізнення з поданням розрахункової роботи на перевірку нараховується 1 штрафний бал (але не більше 5 балів).
4. За модернізацію робіт нараховується від 1 до 6 заохочувальних балів;
5. За виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з дисципліни нараховується від 1 до 6 заохочувальних балів;
6. За активну роботу на лекції нараховується до 0,5 заохочувальних балів (але не більше 10 балів на семестр).

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

1. Поточний контроль: опитування на практичних заняттях, КР, захист РР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.
3. Семестровий контроль: письмовий залік.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

1. Рейтинг студента з кредитного модуля розраховується виходячи із 100-бальної шкали, з них 60 бали складає стартова шкала. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:

- роботу на практичних заняттях (6 тем занять);
- написання контрольної роботи (МКР);
- виконання розрахункової роботи (РР).

2. Критерії нарахування балів:

2.1. Робота на практичному занятті:

- бездоганна робота – 5 балів;
- є певні недоліки у підготовці та/або виконанні роботи – 4 бали;
- є недоліки у підготовці та/або виконанні роботи – 2 бали.

Робота не виконана або не захищена – 0 балів.

Виконання роботи:

- робота виконана повністю і вірно протягом відведеного часу – **3 бали**;
- робота виконана майже повністю і вірно протягом відведеного часу або має не принципові неточності – 2,3 балів;

- робота виконана більше ніж наполовину протягом відведеного часу – 1,5 балів;
- робота виконана протягом відведеного часу менше, ніж наполовину, результати роботи містять грубі помилки, відсутність виконання роботи – 0 балів.

Якість захисту роботи:

- студент вірно і повністю виконав всі надані до захисту завдання (відповів на запитання) – **2 бали**;
- студент вірно виконав всі надані для захисту завдання, але допустив несуттєві неточності – 1,5 бали;
- студент при виконанні завдання (відповідях на запитання) допустив ряд суттєвих неточностей – 1 бал;
- студент при виконанні завдання (відповідях на запитання) допустив суттєві неточності – 0 балів.

2.2. Модульний контроль.

Ваговий бал – **9 балів**. Оцінювання роботи проводиться за наступною шкалою:

- повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 9 – 8,1 балів;
- достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), або повна відповідь з незначними неточностями – 8,0 – 6,8 балів;
- неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 6,7 – 5,4 балів;
- незадовільна відповідь (не відповідає вимогам на «задовільно») – 0 балів.

2.3. Розрахункова робота.

Ваговий бал – **16 балів**. Оцінювання роботи проводиться за наступною шкалою:

- творчо виконана робота, виконані всі вимоги до роботи – 16 – 14,4 балів;
- роботу виконано з незначними недоліками, виконані майже всі вимоги до роботи, або є несуттєві помилки – 14,3 – 12 балів;
- роботу виконано з певними помилками, є недоліки щодо виконання вимог до роботи і певні помилки – 11,9 – 9,6 балів;
- роботу не зараховано (завдання не виконане або є грубі помилки) – 0 балів.

3. Умовою отримання позитивної оцінки з календарного контролю є виконання всіх запланованих на цей час робіт (на час календарного контролю). На **першому календарному контролі** (8-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше $0,5 \cdot 21^1 = 10$ балів. На **другому календарному контролі** (14-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше $0,5 \cdot 42^2 = 21$ балу і зарахована розрахункова робота.

4. На **екзамені** студенти виконують письмову контрольну роботу. Кожне завдання містить два теоретичних запитання (завдання) і одне практичне. Кожне запитання (завдання) оцінюється за такими критеріями:

Кожне теоретичне питання оцінюється у 13 балів, а практичне – 14 балів ().

Система оцінювання теоретичних питань:

- «відмінно», повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 13–11,7 балів;
- «добре», достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності) – 11,6 – 9,8 балів;
- «задовільно», неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки) – 9,7– 7,8 балів;
- «незадовільно», незадовільна відповідь – 0 балів.

Система оцінювання практичного запитання:

- «відмінно», повне безпомилкове розв'язування завдання – 14–12,6 балів;

¹ Максимальна кількість балів, яку може набрати студент протягом 8 тижнів.

² Максимальна кількість балів, яку може набрати студент протягом 14 тижнів.

- «добре», повне розв'язування завдання з несуттєвими неточностями – 12,5 –10,3 балів;
- «задовільно», завдання виконане з певними недоліками – 10,2–8,8 балів;
- «незадовільно», завдання не виконано – 0 балів.

Максимальна сума балів, яку студент може набрати протягом семестру, складає 60 балів:

$$RC = r_{пр} + r_{мкр} + r_{рр} = 35+9+16= 60 \text{ балів}$$

Умовою допуску до екзамену є зарахування всіх комп'ютерних практикумів, написання МКР, виконання та захист розрахункової роботи та кількість рейтингових балів не менше 30.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

- Вимоги до оформлення розрахункової роботи, перелік запитань та заліку наведені у http://tnr.kpi.ua/images/Navch_Metod_Dokum/teoriya-procesiv-virobnictv-neorganichnih-rechovin.-kompleks-navchalno-metodichnogo-zabezpechennya-disciplini.pdf

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено доцентами кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології:

к.т.н. доц. Супрунчуком В.І.

Ухвалено кафедрою технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології (протокол № 19 від 30.06.2021)¹

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 10 від 23.06.2021 р.)

¹ Силабус спочатку погоджується метод. Комісією, а потім Ухвалюється кафедрою.