

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 12.09.2021 20:41:03
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84

Рабочая программа дисциплины
ТЕОРИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ТОНКОГО
ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

Направление подготовки
18.03.01 Химическая технология

Направленность программы бакалавриата
Химическая технология органических веществ

Профессиональный модуль
Химическая технология тонкого органического синтеза

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Зав. кафедрой		Рамш С.М.

Рабочая программа дисциплины «Теория химико-технологических процессов тонкого органического синтеза» обсуждена на заседании кафедры химической технологии органических красителей и фототропных соединений
протокол от «__» _____ 201_ № __

Заведующий кафедрой

С.М. Рамш

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии
протокол от «__» _____ 201_ № __

Председатель

М.В. Рутто

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления		Профессор В.И. Крутиков
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	04
2 Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	06
3 Объем дисциплины	07
4 Содержание дисциплины.....	08
4.1 Разделы дисциплины и виды занятий.....	08
4.2 Занятия лекционного типа.....	10
4.3 Занятия семинарского типа.....	15
4.3.1 Семинары, практические занятия	15
4.4 Самостоятельная работа обучающихся.....	16
4.4.1 Вопросы для самостоятельного изучения.....	16
4.4.2 Темы контрольных работ	21
4.4.2.1 Темы контрольной работы №1.....	21
4.4.2.2 Темы контрольной работы №2.....	21
4.4.2.3 Темы контрольной работы №3.....	21
4.4.3 Темы индивидуальных творческих задач в виде реферата.....	22
5 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	22
6 Фондооценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	23
7 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	25
8 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	26
9 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	33
10 Перечень информационных технологий и программного обеспечения, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	34
10.1 Информационные технологии.....	34
10.2 Программное обеспечение.....	34
10.2.1 Специальное программное обеспечение.....	34
10.2.2 Универсальное программное обеспечение.....	34
11 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	35
12 Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	36
Приложение 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по дисциплине «Теории химико-технологических процессов тонкого органического синтеза».....	37

1 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

<i>Коды компетенции</i>	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОПК-3	готовность использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> – основные типы органических реакций и реагентов; – теорию элементарных и неэлементарных реакций; – механизмы основных типов органических реакций. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> – применять полученные знания для установления механизма химического процесса, изучения и расчета его кинетических, термодинамических и активационных параметров, выбора типа реактора, подбора и оптимизации основных параметров процесса (концентрации, температуры, степени конверсии, селективности), расчета производительности реактора и получения других «предпроектных» данных, необходимых для проектирования производств тонкого органического синтеза и научных исследований в области органической химии и химической технологии органических веществ. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> – методами и навыками расчета основных характеристик материального баланса реакции; – методами и навыками термодинамического расчета химических равновесий простых и сложных реакций.
ПК-16	способность планировать и проводить физические и химические	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> – теорию гомогенного и

<i>Коды компетенции</i>	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
	эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	<p>гетерогенного катализа;</p> <ul style="list-style-type: none"> – основные закономерности протекания гетерофазных реакций; – основы химической кинетики гомогенных реакций в растворах, гомогенно-каталитических, ферментативных, радикально-цепных, гетерогенно-каталитических, гетерофазных реакций; – связь между равновесием и динамикой химического процесса; – основные типы химических реакторов; – температурные зависимости скоростей простых реакций; – особенности кинетики и методы исследования сложных реакций; – селективность гетерофазных и гетерогенно-каталитических процессов; – теоретические основы расчета и оптимизации простых и сложных реакций. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> – применять полученные знания для управления химико-технологическими процессами тонкого органического синтеза, регулирования и оптимизации их параметров в производственных условиях. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> – экспериментальными методами получения и обработки кинетических данных; – методами и навыками изучения и расчета кинетики простых гомогенных реакций в периодических (статических) и непрерывных (динамических) условиях; – методами и навыками расчета и оптимизации простых и

<i>Коды компетенции</i>	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
		сложных реакций; – методами и навыками управления химико-технологическими процессами тонкого органического синтеза в соответствии с технологическими регламентами, регулирования и оптимизации параметров химико-технологических процессов в производственных условиях, предотвращения и ликвидации последствий нештатных и аварийных ситуаций на производстве.
ПК-20	готовность изучать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования	Умеет: – работать с учебной, научно-технической и справочной литературой по органической химии и технологии органических веществ для качественного освоения данной дисциплины, выполнения курсовых работ и проектов по специальности, выполнения ВКР, а также для соответствия стандартам профессиональной деятельности.

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина Б1.В.ДВ.01.01.04 «Теория химико-технологических процессов тонкого органического синтеза» принадлежит к числу дисциплин по выбору (ДВ) вариативной части (В) блока Б1 ООП по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология», направленность подготовки «Химическая технология органических веществ». Изучается на 5 семестре III курса.

В методическом аспекте дисциплина базируется на следующих дисциплинах учебного плана:

- Б1.Б.05 «Математика»,
- Б1.Б.07 «Физика»,
- Б1.Б.08 «Общая и неорганическая химия»,
- Б1.В.02 «Органическая химия»,
- Б1.Б.09.02 «Физико-химические методы анализа»,
- Б1.В.01 «Физическая химия»,
- Б1.Б.11 «Процессы и аппараты химической технологии»,
- Б1.В.07 «Системный анализ химических технологий»,
- Б1.Б.12 «Общая химическая технология».

Дисциплина Б1.В.ДВ.01.01.04 «Теория химико-технологических процессов тонкого органического синтеза» рассматривается как связующее звено между указанными

математическими, естественнонаучными и профессиональными дисциплинами – с одной стороны, и дисциплинами профессионального цикла Б1.В.ДВ.01.01.01 «Химия и технология органических красителей», Б1.В.ДВ.01.01.02 «Введение в фотохимию», Б1.В.ДВ.01.01.03 «Строение и реакционная способность гетероароматических соединений», Б1.В.ДВ.01.01.05 «Химия и технология тонкого органического синтеза», Б1.В.ДВ.01.01.06 «Основы проектирования и оборудование предприятий органического синтеза», Б1.В.ДВ.01.01.08 «Применение продуктов тонкого органического синтеза»– с другой.

Полученные в рамках изучения данной дисциплины знания будут необходимы студентам при изучении указанных дисциплин профессионального цикла, при подготовке, выполнении и защите курсовых работ и проектов, выпускной квалификационной работы, при решении научно-исследовательских, проектно-конструкторских и производственно-технологических задач в будущей профессиональной деятельности.

3 Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	5/180
Контактная работа с преподавателем:	72
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в том числе	36
семинары, практические занятия	36
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	-
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	72
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	3 Кр, Реферат
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Экзамен (36)

4 Содержание дисциплины

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1. Механизмы и кинетика органических реакций						
1.1	Введение	2	2			ОПК-3 ПК-16, ПК-20
1.2	Механизмы реакций тонкого органического синтеза	4	2		12	ОПК-3 ПК-16, ПК-20
1.3	Кинетические уравнения и модели	4	4		12	ОПК-3 ПК-16, ПК-20
2. Количественное исследование, математическое описание, расчет и оптимизация процессов тонкого органического синтеза						
2.1	Материальный баланс реакции и его характеристики	2	–		6	ОПК-3 ПК-16, ПК-20
2.2	Равновесие и скорость реакции	2	–		6	ОПК-3 ПК-16, ПК-20
2.3	Идеальные химические реакторы	4	–		6	ОПК-3 ПК-16, ПК-20
2.4	Термодинамические расчеты химических равновесий	4	6		6	ОПК-3 ПК-16, ПК-20
2.5	Исследование простых реакций	2	6		6	ОПК-3 ПК-16, ПК-20
2.6	Основы расчета и оптимизации простых реакций	4	5		6	ОПК-3 ПК-16, ПК-20
2.7	Исследование сложных реакций	4	5		6	ОПК-3 ПК-16, ПК-20

2.8	Основы расчета и оптимизации сложных реакций	4	6		6	ОПК-3 ПК-16, ПК-20
	<i>Итого</i>	36	36		72	

4.2. Занятия лекционного типа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1. Механизмы и кинетика органических реакций			
1	<p>1.1 Введение</p> <p>1.1.1 Классификация органических реакций и реагентов Гомо- и гетерофазные реакции, гомо- и гетерогенные реакции. Простые и сложные реакции. Понятие о механизме реакции. Элементарные и неэлементарные реакции. Типы элементарных реакций. Типичные реагенты. Основные типы механизмов органических реакций. Электроотрицательность атомов и групп. Поляризация связей в органических молекулах. Дипольный момент и степень поляризации. Индуктивный эффект и эффект поля. Полуколичественная оценка индуктивного эффекта. Мезомерный эффект. Правило резонанса. Классификация структурных единиц и типы резонанса. Передача полярного эффекта и эффекта сопряжения в ароматических молекулах.</p> <p>1.1.2 Основы теории элементарных реакций Теория соударений. Уравнение Аррениуса. Энергия активации. Теория переходного состояния. Свободная энергия, энтропия и энтальпия активации.</p> <p>1.1.3 Неэлементарные реакции Принцип стационарности (метод стационарного состояния) Боденштейна-Семенова. Лимитирующая (скоростьопределяющая) стадия неэлементарной реакции. Молекулярность и порядок реакции. Наблюдаемые (кажущиеся, эффективные) константы скорости и термодинамические параметры активации неэлементарных реакций.</p> <p>1.1.4 Корреляционные уравнения Природа электронных эффектов заместителей. Суммарное электронное воздействие заместителей в органических молекулах на их физико-химические свойства и реакционную способность. Уравнение Гаммета как частный случай принципа линейности свободных энергий. Реакционная серия. Константа реакции ρ и σ-константа заместителя.</p>	2	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. ча сы	Инновационная форма
	Множественность наборов (шкал) σ -констант. Многопараметровые корреляционные уравнения.		
1	<p>1.2. Механизмы органических реакций</p> <p>1.2.1 Реакции замещения Нуклеофильное замещение. Электрофильное замещение. Радикальное замещение.</p> <p>1.2.2 Реакции присоединения Электрофильное присоединение. Реакции радикального присоединения. Нуклеофильное присоединение.</p> <p>1.2.3 Реакции отщепления (элиминирования) Нуклеофильное (вызванное основанием) элиминирование. Электрофильное (индуцируемое кислотой) элиминирование. Радикальные реакции элиминирования.</p> <p>1.2.4 Реакционноспособные частицы (интермедиаты) Карбокатионы. Карбанионы. Свободные радикалы. Карбены. Нитрены.</p> <p>1.2.5 Каталитические реакции</p> <p>1.2.5.1 Гомогенно-каталитические реакции. Кислотный и основной катализ, электрофильный и нуклеофильный катализ, металлокомплексный катализ, ферментативный катализ.</p> <p>1.2.5.2 Гетерогенно-каталитические реакции. Основные характерные черты и механизмы гетерогенно-каталитических реакций. Теории гетерогенного катализа. Области протекания гетерогенного каталитического процесса. Методы исследования гетерогенно-каталитических реакций.</p> <p>1.2.6 Гетерофазные реакции Массопередача при отсутствии химической реакции. Области протекания гетерофазного процесса.</p>	4	
1	<p>1.3. Кинетические уравнения и модели</p> <p>1.3.1 Реакции в растворах Методы построения кинетических моделей гомогенных реакций. Кинетика гомогенно-каталитических реакций. Кинетика ферментативных реакций. Особенности кинетики кислотно-основного катализа. Функции кислотности. Многостадийные реакции.</p> <p>1.3.2 Кинетика радикально-цепных реакций Кинетика неразветвленных цепных реакций.</p>	4	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. ча сы	Инновационная форма
	<p>Кинетика разветвленных цепных реакций.</p> <p>1.3.3 Основы кинетики гетерогенно-каталитических реакций</p> <p>Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в статических условиях. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в потоке. Кинетические модели гетерогенно-каталитических реакций.</p> <p>1.3.4 Кинетика гетерофазных реакций</p> <p>1.3.5 Экспериментальные методы химической кинетики и основы обработки кинетических данных</p> <p>Медленные химические реакции. Методы изучения быстрых реакций. Неизотермические методы изучения кинетики. Обработка результатов кинетического эксперимента.</p>		
<p>2. Количественное исследование, математическое описание, расчет и оптимизация процессов тонкого органического синтеза</p>			
2	<p>2.1 Материальный баланс реакции и его характеристики</p> <p>Стехиометрия и материальный баланс реакции. Независимые реакции и ключевые вещества. Степень конверсии реагента, выход продукта и селективность сложной реакции.</p>	2	
2	<p>2.2 Равновесие и скорость реакции</p> <p>Константа равновесия. Скорость гомогенной реакции. Скорость гетерогенно-каталитической реакции.</p>	2	
2	<p>2.3 Идеальные химические реакторы</p> <p>Идеальный периодический реактор. Непрерывный реактор идеального вытеснения. Непрерывный реактор полного (идеального) смешения.</p>	4	
2	<p>2.4 Термодинамические расчеты химических равновесий</p> <p>Расчет констант равновесий. Экспериментальное изучение равновесий. Расчет равновесий простых и сложных реакций.</p>	4	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. ча сы	Инновационная форма
2	<p>2.5 Исследование простых реакций 2.5.1 Кинетика простых гомогенных реакций с кинетическими уравнениями простого типа Кинетика простых необратимых реакций в периодических (статических) условиях: интегральные методы определения порядка реакции, основные кинетические зависимости. Кинетика простых необратимых реакций, протекающих в реакторе идеального вытеснения (в потоке): основные кинетические зависимости. Обратимые реакции. Дифференциальные методы исследования простых реакций.</p> <p>2.5.2 Кинетика гомогенных простых реакций с кинетическими уравнениями сложного типа Реакции с кинетическими уравнениями, содержащими несколько членов. Реакции с многочленным знаменателем в кинетическом уравнении. Реакции с более сложной кинетикой. Применение вычислительной техники для нахождения параметров кинетических уравнений.</p> <p>2.5.3 Исследование температурной зависимости скорости простой реакции</p>	2	
2	<p>2.6 Основы расчета и оптимизации простых реакций Удельная производительность и выбор реактора. Выбор температуры, концентраций и степени конверсии. Применение экономических критериев оптимизации.</p>	4	
2	<p>2.7 Исследование сложных реакций Особенности кинетики сложных реакций. Метод маршрутов. Параллельные реакции и методы их исследования. Последовательные реакции и методы их исследования. Последовательно-параллельные реакции. Исследование сложных систем последовательных и параллельных реакций. Особенности селективности гетерофазных и гетерогенно-каталитических процессов.</p>	4	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. ча сы	Инновационная форма
2	<p>2.8. Основы расчета и оптимизации сложных реакций</p> <p>Расчет состава продуктов и селективности по кинетическим данным. Влияние концентраций, соотношения реагентов и степени конверсии на селективность. Влияние типа реактора и способа введения реагентов на селективность, выбор типа реактора и способа введения реагентов. Влияние температуры на селективность, выбор температуры. Применение экономических критериев для оптимизации сложных реакций.</p>	4	

4.3 Занятия семинарского типа

4.3.1 Семинары, практические занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Классификация типов реакций и реагентов. Рассмотрение примеров. Решение задач	1	Слайд-презентация, групповая дискуссия.
	Корреляционные уравнения Рассмотрение примеров. Решение задач	1	
	Реакции замещения Рассмотрение примеров. Решение задач	2	
	Реакции присоединения Рассмотрение примеров. Решение задач	2	Контрольная работа 1
	Реакции отщепления (элиминирования) Рассмотрение примеров. Решение задач	2	
2	Кинетика и механизмы гомогенно-каталитических реакций Рассмотрение примеров. Решение задач	2	Слайд-презентация, групповая дискуссия.
	Кинетика радикально-цепных реакций Рассмотрение примеров. Решение задач	2	
	Кинетика и механизмы гетерогенно-каталитических реакций Рассмотрение примеров. Решение задач	2	Контрольная работа 2
	Кинетика гетерофазных реакций Рассмотрение примеров. Решение задач	2	
	Экспериментальные методы химической кинетики и основы обработки кинетических данных Рассмотрение примеров. Решение задач	2	
	Термодинамические расчеты химических равновесий Рассмотрение примеров. Решение задач	2	
	Кинетика простых гомогенных реакций с кинетическими уравнениями простого типа Рассмотрение примеров. Решение задач	2	
	Кинетика простых гомогенных реакций с кинетическими уравнениями сложного типа Рассмотрение примеров. Решение задач	2	
3	Температурная зависимость скорости простой реакции Рассмотрение примеров. Решение задач	3	Слайд-презентация, групповая дискуссия.
	Основы расчета и оптимизации простых реакций Рассмотрение примеров. Решение задач	3	
	Исследование сложных реакций Рассмотрение примеров. Решение задач	3	Контрольная работа 3
	Основы расчета и оптимизации сложных реакций Рассмотрение примеров. Решение задач	3	

4.4 Самостоятельная работа обучающихся

4.4.1 Вопросы для самостоятельного изучения

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1 Механизм и кинетика органических реакций			
1.2 Механизмы органических реакций			
1	1.2.1 Реакции замещения Нуклеофильное замещение в алифатическом ряду. Электрофильное замещение в алифатическом ряду. Радикальное замещение в алифатическом ряду. Нуклеофильное замещение в ароматическом ряду. Электрофильное замещение в ароматическом ряду. Радикальное замещение в ароматическом ряду.	6	
2	1.2.2 Реакции присоединения Электрофильное присоединение. Доказательства механизма. Понятие о стереоселективности и стереоспецифичности. Спектр механизмов на примере реакции бромирования алкенов. Нуклеофильное присоединение. Сопряженное присоединение (винилология). 1,2-Присоединение. Стереохимия нуклеофильного присоединения. Свободнорадикальное присоединение. Стадии процесса. Стереохимия свободнорадикального присоединения. Циклические механизмы присоединения. Присоединение к сопряженным диеновым системам. Понятие о кинетическом и термодинамическом контроле реакции. Ориентация и реакционная способность в реакциях присоединения. Принцип Белла–Эванса–Поляни. Постулат Хэммонда. Правило Марковникова. Присоединение галогеноводородов к алкенам и алкинам. Гидратация двойных и тройных связей. Гидратация алленов. Присоединение спиртов и фенолов к алкенам, алкинам и кетенам. Присоединение карбоновых кислот, сероводорода и тиолов, бисульфита натрия, аммиака и аминов. Реакция Михаэля. Присоединение алканов и алкенов к двойной связи. Механизмы на примере присоединения алканов. Реакции гидрокарбосилирования, гидроформилирования, аминометилирования алкенов. Присоединение синильной кислоты к алкенам и алкинам. Гидрирование двойных и тройных связей. Классы катализаторов. Типичные восстанавливающие реагенты (системы).	6	

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. ча сы	Форма контроля
	<p>Стереоселективность восстановления. Механизм гетерогенно-каталитического гидрирования. Механизм гомогенного гидрирования. Гидрирование ароматических соединений. Восстановление ароматических соединений по Берчу. Влияние природы заместителя в фенильном кольце на ориентацию двойных связей в образующемся продукте гидрирования. Принцип наименьшего движения Хайна. Галогенирование двойных и тройных связей. Механизмы. Присоединение галогенов к алленам и кетенам. Присоединение гипогалогеновых кислот и гипогалогенидов, хлористого нитрозила и нитрилхлорида. Присоединение алкилгалогенидов к алканам и алкенам. Присоединение арилгалогенидов к алкенам. Присоединение ацилгалогенидов. Эпоксидирование алкенов. Фотоокисление диенов. Понятие о синглетном и триплетном кислороде. 1,3-Диполярное присоединение. Типы 1,3-диполей. Реакция Дильса–Альдера. Реагенты. Стереохимия. Реакционная способность реагентов. Механизм реакции Дильса–Альдера. Принцип сохранения орбитальной симметрии. Правило орбитальной симметрии. Применение принципа сохранения орбитальной симметрии к реакциям циклоприсоединения [4 + 2] и [2 + 2] с помощью метода граничных орбиталей. Супра- и антартаповерхностный способ образования σ-связей.</p>		
3	<p>1.2.3 Реакции отщепления (элиминирования) Реакции β-элиминирования в растворах. Механизмы. Стереохимия. Спектр механизмов реакций β-элиминирования. Позиционная ориентация двойной связи в реакциях β-элиминирования. Правило Зайцева. Правило Гофмана. Пространственная ориентация двойной связи. Влияние субстрата, атакующего основания, уходящей группы и среды на реакционную способность в реакциях β-элиминирования (активность в целом, спектр механизмов, тип реакции (элиминирование/замещение)). Пиролитическое элиминирование. Ориентация двойной связи. Правило Бредта. Пиролиз сложных эфиров карбоновых кислот. β-Элиминирование в растворах: расщепление четвертичных аммонийгидроксидов, ориентация двойной связи.</p>	6	

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
	Дегидратация спиртов. Способы осуществления процесса. Механизм. Ориентация двойной связи. Понятие о принципе микроскопической обратимости. Расщепление простых эфиров. Дегидрогалогенирование алкилгалогенидов. Получение алкинов.		
4	1.2.4 Реакционноспособные частицы (интермедиаты) Карбокатионы. Стабильность и структура. Оценка относительной устойчивости карбокатионов. Способы получения карбокатионов. Реакции карбокатионов. Перегруппировки. Катионная полимеризация. Алкилирование по Фриделю–Крафтсу. Процесс Фриделя–Крафтса с карбокатионным механизмом. Карбанионы. Стабильность и строение. Способы получения карбанионов. Реакции карбанионов. Свободные радикалы. Строение и устойчивость. Способы получения. Реакции свободных радикалов. Ион-радикалы. Карбены. Строение. Способы получения. Реакции карбенов. Присоединение к двойной связи. Реакции внедрения. Димеризация. Перегруппировки. Образование свободных радикалов. Нитрены. Получение. Реакции: внедрение, присоединение.	6	Устный опрос №1 Контрольная работа №1
1.3 Кинетические уравнения и модели			
5	1.3.3 Основы кинетики гетерогенно-каталитических реакций Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в статических условиях. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в потоке. Кинетические модели гетерогенно-каталитических реакций.	6	
6	1.3.4 Кинетика гетерофазных реакций	6	
2 Количественное исследование, математическое описание, расчет и оптимизация процессов тонкого органического синтеза			
2.1 Материальный баланс реакции и его характеристики			
7	Стехиометрия и материальный баланс реакции. Независимые реакции и ключевые вещества. Степень конверсии реагента, выход продукта и селективность сложной реакции.	6	

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2.2 Равновесие и скорость реакции			
8	Константа равновесия. Скорость гомогенной реакции. Скорость гетерогенно-каталитической реакции.	6	Устный опрос №2 Контрольная работа №2
2.3 Идеальные химические реакторы			
9	Идеальный периодический реактор. Непрерывный реактор идеального вытеснения. Непрерывный реактор полного (идеального) смешения.	4	
2.4 Термодинамические расчеты химических равновесий			
10	Расчет констант равновесий. Экспериментальное изучение равновесий. Расчет равновесий простых и сложных реакций.	4	
2.5 Исследование простых реакций			
11	2.5.2 Кинетика гомогенных простых реакций с кинетическими уравнениями сложного типа. Реакции с кинетическими уравнениями, содержащими несколько членов. Реакции с многочленным знаменателем в кинетическом уравнении. Реакции с более сложной кинетикой. Применение вычислительной техники для нахождения параметров кинетических уравнений.	4	
2.6 Основы расчета и оптимизации простых реакций			
12	Удельная производительность и выбор реактора. Выбор температуры, концентраций и степени конверсии. Применение экономических критериев оптимизации.	4	
2.7 Исследование сложных реакций			
13	Особенности кинетики сложных реакций. Метод маршрутов. Параллельные реакции и методы их исследования. Последовательные реакции и методы их исследования. Последовательно-параллельные реакции. Исследование сложных систем последовательных и параллельных реакций. Особенности селективности гетерофазных и гетерогенно-каталитических процессов.	4	

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. ча сы	Форма контроля
2.8 Основы расчета и оптимизации сложных реакций			
14	Расчет состава продуктов и селективности по кинетическим данным. Влияние концентраций, соотношения реагентов и степени конверсии на селективность. Влияние типа реактора и способа введения реагентов на селективность, выбор типа реактора и способа введения реагентов. Влияние температуры на селективность, выбор температуры. Применение экономических критериев для оптимизации сложных реакций.	4	Устный опрос №3 Контрольная работа №3

По изученным разделам дисциплины студенты выполняют 3 контрольные работы и подготавливают индивидуальное творческое задание в виде реферата.

4.4.2 Темы контрольных работ

Каждая контрольная работа содержит 1 теоретический вопрос и 1 тестовую задачу. Контрольные работы охватывают следующие разделы дисциплины:

4.4.2.1 Темы контрольной работы №1

«Влияние структурных факторов и реакционной среды на физико-химические свойства и реакционную способность органических молекул.

Реакционноспособные частицы и механизмы органических реакций».

В задании приводится один теоретический вопрос на проверку знаний по следующим разделам:

1. Природа электронных и стерических эффектов заместителей.
2. Уравнение Гаммета и другие соотношения линейности свободных энергий.
3. Механизмы реакций замещения, присоединения и элиминирования.
Влияние структурных факторов и реакционной среды на природу превращений органических субстратов.
4. Реакционноспособные частицы (карбокатионы, карбанионы, свободные радикалы, ион-радикалы, карбены, нитрены): структура и стабильность, способы генерирования и основные реакции.

а также одна задача на проверку умений и навыков по указанным разделам дисциплины.

Перечень теоретических вопросов приведен ниже в разделе 6.

4.4.2.2 Темы контрольной работы №2

«Реакции в растворах. Каталитические реакции. Гетерофазные реакции. Свободно-радикальные реакции».

В задании приводится один теоретический вопрос на проверку знаний по следующим разделам:

1. Кинетические уравнения и модели.
2. Гомогенно-каталитические реакции: механизмы, кинетические уравнения и модели.
3. Гетерогенно-каталитические реакции: механизмы, кинетические уравнения и модели.
4. Кинетика гетерофазных реакций.
5. Механизмы свободно-радикальных реакций.
6. Кинетические уравнения и модели свободно-радикальных реакций.

а также одна задача на проверку умений и навыков по указанным разделам дисциплины.

Перечень теоретических вопросов приведен ниже в разделе 6.

4.4.2.3 Темы контрольной работы №3

«Расчеты химических равновесий. Исследование, расчет и оптимизация количественных закономерностей химических процессов».

В задании приводится один теоретический вопрос на проверку знаний по следующим разделам:

1. Расчет равновесий простых и сложных реакций.
2. Расчет равновесий жидкофазных реакций.
3. Исследование, расчет и оптимизация простых реакций.
4. Исследование, расчет и оптимизация сложных реакций.

а также одна задача на проверку умений и навыков по указанным разделам дисциплины.

Перечень теоретических вопросов приведен ниже в разделе 6.

4.4.3 Темы индивидуальных творческих задач в виде реферата

Индивидуальное творческое задание в виде реферата выполняется на заданную тему. Тематика индивидуальных творческих заданий (рефератов) охватывает следующие разделы учебной дисциплины, вынесенные на самостоятельную подготовку (раздел 4.4.1):

1. Реакции замещения.
2. Реакции присоединения.
3. Реакции отщепления (элиминирования).
4. Реакционноспособные частицы (интермедиаты).
5. Основы кинетики гетерогенно-каталитических реакций.
6. Кинетика гетерофазных реакций.
7. Материальный баланс реакции и его характеристики.
8. Равновесие и скорость реакции.
9. Идеальные химические реакторы.
10. Термодинамические расчеты химических равновесий.
11. Кинетика гомогенных простых реакций с кинетическими уравнениями сложного типа.
12. Основы расчета и оптимизации простых реакций.
13. Исследование сложных реакций.
14. Основы расчета и оптимизации сложных реакций.

5 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ (ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>.

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена.

К сдаче экзамена допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля, т. е. получившие положительные оценки за три контрольные работы и реферат.

Экзамен предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуется вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков).

При сдаче экзамена студент получает один вопрос из перечня вопросов и две задачи из перечня типовых задач, время подготовки студента к устному ответу – до 45 мин.

Пример варианта экзаменационного билета:

<p style="text-align: center;">Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет) Кафедра химической технологии органических красителей и фототропных соединений Факультет химической и биотехнологии Учебная дисциплина «Теория химико-технологических процессов органического синтеза»</p> <p style="text-align: center;">Экзаменационный билет №1</p> <p>1. Электроотрицательность атомов и групп. Поляризация связей в органических молекулах. Дипольный момент и степень поляризации.</p> <p>2. Изобразите всеми известными Вам способами распределение π-электронного облака в нитрогруппе.</p> <p>3. Расположите в ряд по увеличению значения r_{Ka} следующие соединения и дайте объяснения: бензойная кислота, п-нитробензойная кислота, п-хлорбензойная кислота, п-метоксибензойная кислота п-диметиламинобензойная кислота.</p> <p>Заведующий кафедрой _____ С.М. Рамш</p>
--

Контрольные вопросы по дисциплине, используемые при текущем контроле успеваемости (контрольные работы) и промежуточной аттестации (вопросы к экзамену)

1. Гомо- и гетерофазные реакции, гомо- и гетерогенные реакции. Простые и сложные реакции. Элементарные и неэлементарные реакции. Типы элементарных реакций. Классификация реагентов. Типы механизмов реакций.

2. Теория соударений. Уравнение Аррениуса. Энергия активации. Теория переходного состояния. Свободная энергия, энтропия и энтальпия активации.
3. Принцип стационарности (метод стационарного состояния) Боденштейна-Семенова. Лимитирующая (скоростьопределяющая) стадия неэлементарной реакции. Молекулярность и порядок реакции. Наблюдаемые (кажущиеся, эффективные) константы скорости и термодинамические параметры активации неэлементарных реакций.
4. Природа электронных эффектов заместителей. Уравнение Гаммета как частный случай принципа линейности свободных энергий. Реакционная серия. Константа реакции ρ и σ -константа заместителя. Множественность наборов (шкал) σ -констант. Многопараметровые корреляционные уравнения.
5. Нуклеофильное замещение. Электрофильное замещение. Радикальное замещение.
6. Электрофильное присоединение. Реакции радикального присоединения. Нуклеофильное присоединение.
7. Нуклеофильное (вызванное основанием) элиминирование. Электрофильное (индуцируемое кислотой) элиминирование. Радикальные реакции элиминирования.
8. Карбокатионы. Карбанионы. Свободные радикалы. Карбены. Нитрены.
9. Кислотный и основной катализ, электрофильный и нуклеофильный катализ, металлокомплексный катализ, ферментативный катализ.
10. Основные характерные черты и механизмы гетерогенно-каталитических реакций. Теории гетерогенного катализа. Области протекания гетерогенного каталитического процесса. Методы исследования гетерогенно-каталитических реакций.
11. Массопередача при отсутствии химической реакции. Области протекания гетерофазного процесса
12. Методы построения кинетических моделей гомогенных реакций. Кинетика гомогенно-каталитических реакций. Кинетика ферментативных реакций. Особенности кинетики кислотно-основного катализа. Функции кислотности. Многостадийные реакции.
13. Кинетика неразветвленных цепных реакций. Кинетика разветвленных цепных реакций.
14. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в статических условиях. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в потоке. Кинетические модели гетерогенно-каталитических реакций.
15. Кинетика гетерофазных реакций
16. Медленные химические реакции. Методы изучения быстрых реакций. Неизотермические методы изучения кинетики. Обработка результатов кинетического эксперимента.

17. Стехиометрия и материальный баланс реакции. Независимые реакции и ключевые вещества. Степень конверсии реагента, выход продукта и селективность сложной реакции.

18. Константа равновесия. Скорость гомогенной реакции. Скорость гетерогенно-каталитической реакции.

19. Идеальный периодический реактор. Непрерывный реактор идеального вытеснения. Непрерывный реактор полного (идеального) смешения.

20. Расчет констант равновесий. Экспериментальное изучение равновесий. Расчет равновесий простых и сложных реакций.

21. Кинетика простых необратимых реакций в периодических (статических) условиях: интегральные методы определения порядка реакции, основные кинетические зависимости. Кинетика простых необратимых реакций, протекающих в реакторе идеального вытеснения (в потоке): основные кинетические зависимости. Обратимые реакции. Дифференциальные методы исследования простых реакций.

22. Реакции с кинетическими уравнениями, содержащими несколько членов. Реакции с многочленным знаменателем в кинетическом уравнении. Реакции с более сложной кинетикой. Применение вычислительной техники для нахождения параметров кинетических уравнений.

23. Исследование температурной зависимости скорости простой реакции

24. Удельная производительность и выбор реактора. Выбор температуры, концентраций и степени конверсии. Применение экономических критериев оптимизации.

25. Особенности кинетики сложных реакций. Метод маршрутов. Параллельные реакции и методы их исследования. Последовательные реакции и методы их исследования. Последовательно-параллельные реакции. Исследование сложных систем последовательных и параллельных реакций. Особенности селективности гетерофазных и гетерогенно-каталитических процессов.

26. Расчет состава продуктов и селективности по кинетическим данным. Влияние концентраций, соотношения реагентов и степени конверсии на селективность. Влияние типа реактора и способа введения реагентов на селективность, выбор типа реактора и способа введения реагентов. Влияние температуры на селективность, выбор температуры. Применение экономических критериев для оптимизации сложных реакций.

7 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Потехин, В.М. Основы теории химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки / В.М. Потехин, В.В. Потехин. – СПб.:Лань, 2014. – 896 с.
2. Рамш, С.М. Теория химико-технологических процессов тонкого органического синтеза. Ч. 1. Механизмы реакций тонкого органического синтеза[Электронный ресурс] / С.М. Рамш, Е.С. Храброва. – СПб.:СПбГТИ (ТУ), 2016. – 328 с. – Доступ из локальной сети ФГБОУ «СПбГТИ (ТУ)».

б) дополнительная литература:

1. Тимофеев, В.С. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза / В.С. Тимофеев, Л.А. Серафимов, А.В. Тимошенко. – М.: Высшая школа, 2010. – 408 с.
2. Кутепов, А.М. Общая химическая технология / А.М. Кутепов, Т.И. Бондарева, М.Г. Беренгартен. – М.: ВШ, 2003. – 528 с.

в) вспомогательная литература:

1. Хайлов, В.С. Введение в технологию органического синтеза / В.С. Хайлов, Б.Б. Бранд. – Л.: Химия, 1969. – 560 с.
2. Лебедев, Н.Н. Теория технологических процессов основного органического и нефтехимического синтеза / Н.Н. Лебедев, М.Н. Манаков, В.Ф. Швец. – М.: Химия, 1984. – 478 с.
3. Марч, Дж. Органическая химия. В 4-х т. / Дж. Марч. – М.: Мир, 1987-1988.
4. Сайкс, П. Механизмы реакций в органической химии. Вводный курс / П. Сайкс. – М.: Химия, 2000. – 176 с.
5. Бочкарев, В.В. Оптимизация технологических процессов органического синтеза: учебное пособие / В.В. Бочкарев. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. – 185 с.
6. Квитко, И.Я. Методические указания к практическим занятиям «Химия и технология мономеров»: методические указания / И.Я. Квитко. – СПб., СПбГТИ (ТУ), 1983. – 39 с.
7. Квитко, И.Я. Химия и технология мономеров: методические указания / И.Я. Квитко. – СПб., СПбГТИ (ТУ), 1986. – 43 с.
8. Квитко, И.Я. Основы химии и технологии органических веществ. Препаративные методы исследования: методические указания / И.Я. Квитко. – СПб., СПбГТИ (ТУ), 1993. – 40 с.
9. Исаакс Н. Практикум по физической органической химии / Н. Исаакс. – М.: Мир, 1972. – 290 с.

8 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Учебный план, РПД и учебно-методические материалы:
<http://media.technolog.edu.ru>.

Электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

Сайт фундаментальной библиотеки СПбГТИ(ТУ): <http://bibl.lti-gti.ru>.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать следующие универсальные Интернет-ресурсы для химика-технолога.

Специализированные системы и сайты для поиска учебной и научной информации по химии и химической технологии:

<http://www.acscinf.org/>

<http://www.acscinf.org/content/chemical-information-literacy>

<http://scholar.google.ru>

<http://scienceresearch.com>

<http://www.nature.com>

www.chemweb.com

<http://www.iupac.org/>

http://en.wikibooks.org/wiki/Chemical_Information_Sources

<http://www.chem.vsu.ru/content/links.html> (обширная сводка химических сайтов «Химия в сети Internet»)

<http://www.doaj.org/> (Directory of open access journals)

<http://www.chemport.ru/> (сайт для химиков)

<http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html> («линки» для химиков, University of Liverpool), не работает в настоящее время

<http://geogr.isu.ru/leos/index.php> (СИС «Химический ускоритель»), не работает в настоящее время

<http://chemexpress.fatal.ru/Navigator.html> («Химический навигатор»), не работает в настоящее время

<http://www.organic-chemistry.org/>

<http://www.chem.sc.edu/faculty/morgan/resources/links.html>

<http://www.chem.ucla.edu/chempointers.html>

Справочники, энциклопедии:

ULLMANN'S Encyclopedia of Industrial Chemistry

<http://eu.wiley.com/WileyCDA/Section/id-407379.html>

http://media.wiley.com/assets/5018/03/Ullmanns2011_Contents.pdf

<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/14356007>

Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology

<http://eu.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302479.html?query=Kirk-Othmer>

Справочник химика 21. Химия и химическая технология. On-line ресурс

<http://chem21.info/map/>

List of academic databases and search engines

https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_academic_databases_and_search_engines

Базы данных по химии:

Базы данных Chemical Abstracts Service

<http://www.cas.org/expertise/cascontent/> (поиск с помощью поискового инструмента «SciFinder»)

<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/9780470749418>

<http://www.cas.org/products/scifinder/system-requirements-web>

<http://www.cas.org/training/scifinder>

Базы данных STN-International

http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/onlin_db.htm

<http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/clusters.htm>

<http://www.cas.org/support/stngen/dbss/index.html>

<https://stnweb.cas.org/>

<http://www.stn-international.com/index.php?id=123>

<http://www.stn-international.de/index.php?id=123>

<https://stneasy.cas.org/html/english/login1.html?service=STN>

Базы данных ELSEVIER/REAXYS (Beilstein & Gmelin)

<https://www.elsevier.com/solutions/reaxys>

<https://www.reaxys.com/reaxys/session.do>

(поиск с помощью поискового инструмента «ReaxysChemistryDiscoveryEngine»)

Базы данных ScienceDirect (Elsevier)

<http://www.sciencedirect.com/science>

<http://www.scopus.com/home.url>

<http://www.mendeley.com/features/>

Базы данных Web of Science (Thomson Reuters)

<http://webofscience.com>

ChemBioFinder.com (PerkinElmer Informatics, Chembridge.com)

<http://chembiofinder.cambridgesoft.com/chembiofinder/Forms/Home/ContentArea/Home.aspx>

Базы данных Royal Society of Chemistry ChemSpider (бесплатная, the database contains information on more than 40 million molecules from over 500 data sources)

<http://www.chemspider.com>

The Cambridge Structural Database

<http://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/csd/>

Базы данных MEDLINE (PubChem databases)

http://wwwcf2.nlm.nih.gov/nlm_eresources/eresources/search_database.cfm

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/help.html>

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/search/search.cgi>

<http://www.hubmed.org/>

<http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/databases/medline.htm>

<http://www.disser.ru/library/31/188.htm>

<http://voliadis.ru/pubmed-tips>

Базы спектральных данных органических соединений

<http://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/ENTRANCE.cgi>

Базы данных ВИНТИ

<http://www2.viniti.ru/>

Термические константы веществ

<http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html>

The Merck Index OnlineSM

<http://library.dialog.com/bluesheets/html/bl0304.html>

http://www.dmoz.org/Science/Chemistry/Chemical_Databases/

<http://www.emolecules.com/> (Find [Suppliers and Information](#) for over 8 Million Unique Chemicals!)

<http://cds.dl.ac.uk/> (the Chemical Database Service)

<http://library.dialog.com/bluesheets/html/bls0016.html#SB0016> (Databases by Subject Category: Science-Chemistry)

<http://www.crct.polymtl.ca/FACT/index.php> (Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics)

http://www.google.ru/Top/Science/Chemistry/Chemical_Databases/

<http://chem-v.narod.ru/data.htm> (сводка баз данных)

Патентные базы:

European Patent Office. Espacenet – Patent search

<http://www.epo.org/searching/free/espacenet.html>

<http://worldwide.espacenet.com/advancedSearch?locale=en> EP

The US Patent and Trademark Office

<http://www.uspto.gov/>

<http://www.google.com/googlebooks/uspto.html>

<http://www.google.com/googlebooks/uspto-patents-pair.html>

<http://www.us-patent-search.com/>

Google Patents

<http://www.google.com/patents>

ФГУФИПС

http://www1.fips.ru/wps/wcm/connect/content_ru/ru/inform_resources/inform_retrieval_system

Химические библиотеки:

Библиотека химического факультета МГУ

<http://www.chem.msu.ru/rus/library/welcome.html>

Электронная библиотека учебных материалов по химии МГУ

<http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html>

Зарубежные журналы через Интернет МГУ

<http://www.chem.msu.ru/rus/library/licenced.html>

Научная библиотека им. М. Горького СПбГУ, электронные ресурсы по химии

<http://cufts.library.spbu.ru/CRDB/SPBGU/browse/facets/subject/5>

Информационно-библиотечный центр им. С.И. Сулименко РХТУ им. Д.И. Менделеева, электронные информационные ресурсы

<http://lib.muctr.ru/page/117>

Научная электронная библиотека

<http://elibrary.ru/defaultx.asp>

Поиск_электронных_книг

<http://www.poiskknig.ru/>

Научная литература в Интернете

<http://www.scintific.narod.ru/literature.htm>

Электронная библиотека по химии и технике
<http://rushim.ru/books/books.htm>

Книги по химии и химической технологии
<http://www.chemport.ru/index.php?cid=29>

НИЦ СПбГТУРП. Химия и химическая технология. Более 1000 наименований учебников и монографий
<http://www.nizrp.narod.ru/chem.htm>

Библиотеки общего профиля:

Российская государственная библиотека
<http://www.rsl.ru>

Российская национальная библиотека
<http://www.nlr.ru>

Государственная публичная научно-техническая библиотека России
<http://www.gpntb.ru>

Библиотека по естественным наукам РАН
<http://www.benran.ru/>

Библиотека РАН (БАН)
<http://www.rasl.ru/>

Фундаментальная библиотека СПбГТИ (ТУ)
<http://bibl.lti-gti.ru/>

Библиотека Конгресса США
<http://www.loc.gov/index.html>

Британская библиотека
<http://portico.bl.uk>

Электронная библиотека диссертаций РГБ
<http://www.diss.rsl.ru>

Издательства научно-технической литературы:

Elsevier
http://www.elsevier.com/wps/find/homepage.cws_home
<http://health.elsevier.ru/>
<http://elsevierscience.ru/>

Wiley-VCH
<http://www.chemistryviews.org/view/0/index.html>
<http://onlinelibrary.wiley.com/?CRETRY=1&SRETRY=0>

Springer

<http://www.springerlink.com/>
<http://www.springerlink.com/home/main.mpx>

Хемоинформатика (статья в Википедии):

<https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A5%D0%B5%D0%BC%D0%BE%D0%B8%D0%BD%D1%84%D0%BE%D1%80%D0%BC%D0%B0%D1%82%D0%B8%D0%BA%D0%B0>

Разработчики программных продуктов по химии, молекулярная графика (Chem-Soft):

Advanced Chemistry Development Inc. (ACD/Labs)
<http://www.acdlabs.com/home/>

CambridgeSoft Corporation
<http://www.cambridgesoft.com/>

DassaultSystèmes/BIOVIA/Accelrys/Symyx/MDL
<http://accelrys.com/>

ChemAxon
<https://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch>
<https://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch>

World Index of Molecular Visualization Resources
www.molvisindex.org
<http://molvis.sdsc.edu/visres/index.html>

Mercury – Crystal Structure Visualisation
http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/mercury_csd/

<http://jmol.sourceforge.net/> (Molecular graphic: Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D)

<http://openrasmol.org/> (Home Page for RasMol and OpenRasMol Molecular Graphics Visualisation Tool)

<http://edchemistry.tripod.com/graphics.htm> (visualization and animations in chemistry)

Вычислительная химия:

Hypercube, Inc.
<http://www.hyper.com/>

Разработчики программных продуктов по химической технологии (Chem-Engineering):

Process Systems Enterprise
<http://www.psenterprise.com/>

Invensys SimSci-Esscor
<http://iom.invensys.com/EN/Pages/SimSci-Esscor.aspx>

Aspentech

<http://www.aspentech.com/Company/About-AspenTech/>
http://www.aspentech.com/corporate/press/media_kit.aspx

Aspentech HYSYS

<http://www.aspentech.com/core/asp-hysys.aspx>

Математические вычисления и инженерная графика:

PTC Mathcad

<http://www.ptc.com/product/mathcad/>

Autodesk (Autocad)

<http://www.autodesk.com/products/autodesk-autocad/overview>

АСКОМ (КОМПАС)

<http://edu.ascon.ru/download/>
<http://kompas.ru/>

Химические общества, организации, союзы:

Am. Chem. Soc.

<http://www.acs.org/content/acs/en.html>

RSC

<http://www.rsc.org/>

РХО им. Д.И. Менделеева

<http://www.chemsoc.ru/>
<http://www.chemsoc.ru/regions/Spb/index.php>

IUPAC

<http://old.iupac.org/index.html>
http://goldbook.iupac.org/structure_search.html

Производители химической и фармацевтической продукции:

<http://www.chemicalinfo.ru/>
<http://rccnews.ru/Rus/About/>

Стандарты:

Росстандарт

<http://www.gost.ru/wps/portal/pages.Main>

<http://www.technormativ.ru/>

Роспромтест

<http://www.rospromtest.ru/>

Центр по экономическим классификациям

<http://www.okpd.org/index.htm>

NIST

<http://nist.gov/>

<http://webbook.nist.gov/>

<http://webbook.nist.gov/chemistry/>

Электронно-библиотечные системы (электронные ресурсы), предлагаемые библиотекой СПбГТИ (ТУ):

<http://bibl.lti-gti.ru/main.html>

9 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Все виды занятий по дисциплине «Теории химико-технологических процессов органического синтеза» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТО:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТО СПбГТИ (ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок организации и проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

Рабочей программой дисциплины «Теория химико-технологических процессов тонкого органического синтеза» предусмотрена самостоятельная работа студентов в объеме 72 часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления и расширения знаний по дисциплине и предусматривает:

чтение студентами рекомендованной основной, дополнительной и вспомогательной литературы, в том числе для усвоения теоретического материала дисциплины, вынесенного на самостоятельное изучение;

подготовку к лекциям и практическим занятиям;

подготовку к контрольным работам (ответы на контрольные вопросы и решение тестовых задач);

работу с рекомендованными Интернет-источниками научно-технической информации;

интерактивное обучение с использованием рекомендованных электронных учебных пособий, доступных программно-обучающих модулей и телекоммуникационных технологий *onlinedоступа* к соответствующим программным продуктам и обучающим системам, в том числе с помощью компьютерных симуляций;

выполнение индивидуального творческого задания (реферата).

Планирование времени на самостоятельную работу лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Материал, законспектированный на лекциях или полученный в виде раздаточных материалов, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в спискерекомендованной литературы. По каждому из вопросов для самостоятельного изучения следует сначала прочитать рекомендованную литературу, а затем составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания, являющихся основополагающими в этом вопросе и необходимых для усвоения последующих разделов дисциплины. В случае возникновения трудностей при самостоятельном усвоении материала рекомендуется составить перечень непонятных вопросов и обратиться за консультацией к преподавателю.

10 Перечень информационных технологий и программного обеспечения, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

10.1 Информационные технологии

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование следующих информационных технологий и возможностей компьютерного класса кафедры:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;

поиск учебной и научной информации по данной дисциплине на специализированных ресурсах(сайтах) сети Интернет с помощью технологий удаленного доступа (сетевых технологий) и специализированных поисковых систем (инструментов) (см. раздел 8);

взаимодействие с обучающимися посредством электронной почты, мессенджеров и других сетевых технологий.

10.2 Программное обеспечение

10.2.1 Специальное программное обеспечение:

1. Специальные программные средства и технологии (программные продукты) важнейших информационно-поисковых систем по химии и химической технологии, доступные в режиме *online* на соответствующих сайтах, указанных в разделе 8: поисковый инструмент БД CAS«SciFinder», поисковый инструмент БД ELSEVIER/REAXYS«ReaxysChemistryDiscoveryEngine», поисковые инструменты БД ScienceDirect, Scopus, Web of Science, STN International, ВИНТИ, Роспатента, TheUSPatentandTrademarkOffice, EuropeanPatentOffice, MEDLINE (PubChem), CambridgeStructuralDatabase.
2. Программа представление структурных данных «Mercury» (бесплатная версия с сайта CCDC (см. раздел 8).
3. БД Beilstein, CambridgeStructuralDatabase на электронных носителях (кафедра физики СПбГТИ (ТУ), проф. Беляков А.В.).
4. Учебный пакет «STN-Mentor» системы STN International на электронных носителях (кафедра системного анализа СПбГТИ (ТУ), доц. Ананченко И.В.).
5. ИПС «Web ИРБИС» для поиска библиографической информации на сайте ФБ СПбГТИ (ТУ).
6. Электронно-библиотечные системы (электронные ресурсы), предлагаемые на сайте ФБ СПбГТИ (ТУ).

10.2.2 Универсальное программное обеспечение:

1. Стандартные программные продукты «MICROSOFTOFFICE».

2. Компьютерная молекулярная графика: бесплатно распространяемые (no fee, free, trial versions) на соответствующих сайтах (см. ниже) пакеты программ «ACD/Labs» («ACD/ChemSketch»), «MDL/ISIS» / «Symyx» / «Accelrys» / «BIOVIA» / Dassault Systèmes («ISISDraw» и более поздние версии этого продукта – «SymyxDraw», «AccelrysDraw», «BIOVIADraw»), «ChemOffice» («ChemDraw») и т. п. – от разработчиков программных продуктов по химии.

11 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для проведения занятий по дисциплине «Теории химико-технологических процессов тонкого органического синтеза» имеется необходимая материально-техническая база: лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным проектором; специализированный компьютерный класс, с подключенными периферийными устройствами и оборудованием, выходом в Интернет и локальную сеть СПбГТИ (ТУ); компьютерное (*hardware*) и программное (*software*) обеспечение для проведения семинарских и практических занятий, а также для самостоятельной работы по дисциплине; Фундаментальная библиотека с читальными залами, оснащенными компьютерами, с выходом в Интернет и локальную сеть СПбГТИ (ТУ).

Наименование и марка оборудования	Назначение и краткая характеристика оборудования	Год ввода в эксплуатацию
Проектор Acer X113PH_800×600	Презентация иллюстративных материалов	2016
Компьютерный класс кафедры, компьютеры PC, 15 шт.	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2017
Ноутбук MSIGP72 6QF-273RUCi7-6700HQ 2.6/17.3"FHD/GTX960/W10/8G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_Blac	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2016
Ноутбук AsusX756UVCi3-6100U 2.3/17.3"/GT920MX/W10/4G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_brown_	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2016
Ноутбук AsusX756UVCi3-6100U 2.3/17.3"/GT920MX/W10/4G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_brown_	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2016

НоутбукAsus X751MAPQCN3530	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2014
НоутбукAsus X751MAPQCN3530	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2014
Компьютер KEY HM Pro H-505- 4G1000_Ci5-4570	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2014
Компьютер KEY HM Pro H-505- 4G1000_Ci5-4570	Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.	2014
Общеинститутские серверы	Кабельное сетевое соединение. Широкополосное проводное подключение к локальной сети, выход в Интернет.Кабельная технология Ethernet, скорость 100 Мбит в сек.	
Общеинститутские серверы	Беспроводное сетевое соединение. Беспроводное подключение к локальной сети, выход в Интернет. Беспроводная технология WiFi, скорость 50 Мбит в сек.	

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с «Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ)», утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Теории химико-технологических процессов тонкого органического
синтеза»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования

Компетенции		
Индекс	Формулировка	Этап формирования
ОПК-3	Готовность использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире	промежуточный
ПК-16	Способность планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	промежуточный
ПК-20	Готовность изучать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 1	Знает: – основные типы органических реакций и реагентов; – теорию элементарных и неэлементарных реакций; – механизмы основных типов органических реакций.	Правильные ответы на вопросы №1-8 к экзамену	ОПК-3

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 2	<p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – применять полученные знания для выбора типа реактора, подбора и оптимизации основных параметров процесса (концентрации, температуры, степени конверсии, селективности), расчета производительности реактора и получения других «предпроектных» данных, необходимых для проектирования производств тонкого органического синтеза и научных исследований в области органической химии и химической технологии органических веществ. <p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – методами и навыками расчета основных характеристик материального баланса реакции; – методами и навыками термодинамического расчета химических равновесий простых и сложных реакций. 	Правильные ответы на вопросы №17, 19, 24, 26 к экзамену	ОПК-3
	<p>Знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> – теорию гомогенного и гетерогенного катализа; – основные закономерности протекания гетерофазных реакций; – основы химической кинетики гомогенных реакций в растворах, гомогенно-каталитических, ферментативных, радикально-цепных, гетерогенно-каталитических, гетерофазных реакций; – связь между равновесием и динамикой химического процесса; – температурные зависимости скоростей простых реакций; – особенности кинетики и методы исследования сложных реакций; – селективность гетерофазных и гетерогенно-каталитических процессов; – теоретические основы расчета и оптимизации простых и сложных реакций; – основные типы химических реакторов. <p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – применять полученные знания для управления химико-технологическими 	Правильные ответы на вопросы №9-16, 18, 20-23, 25 к экзамену	ПК-16

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
	<p>процессами тонкого органического синтеза, регулирования и оптимизации их параметров в производственных условиях.</p> <p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – экспериментальными методами получения и обработки кинетических данных; – методами и навыками изучения и расчета кинетики простых гомогенных реакций в периодических (статических) и непрерывных (динамических) условиях; – методами и навыками расчета и оптимизации простых и сложных реакций; – методами и навыками управления химико-технологическими процессами тонкого органического синтеза в соответствии с технологическими регламентами, регулирования и оптимизации параметров химико-технологических процессов в производственных условиях, предотвращения и ликвидации последствий нештатных и аварийных ситуаций на производстве. 		
	<p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – работать с учебной, научно-технической и справочной литературой по органической химии и технологии органических веществ для качественного освоения данной дисциплины, выполнения курсовых работ и проектов по специальности, выполнения ВКР, а также для соответствия стандартам профессиональной деятельности. 	Правильные ответы на вопросы №1-26 к экзамену	ПК-20

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД. Порядок проведения зачетов и экзаменов:

промежуточная аттестация проводится в форме экзамена, результатом экзамена является оценка «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» и «неудовлетворительно».

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

а) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ОПК-3:

1. Гомо- и гетерофазные реакции, гомо- и гетерогенные реакции. Простые и сложные реакции. Элементарные и неэлементарные реакции. Типы элементарных реакций. Классификация реагентов. Типы механизмов реакций.
2. Теория соударений. Уравнение Аррениуса. Энергия активации. Теория переходного состояния. Свободная энергия, энтропия и энтальпия активации.
3. Принцип стационарности (метод стационарного состояния) Боденштейна-Семенова. Лимитирующая (скоростьюопределяющая) стадия неэлементарной реакции. Молекулярность и порядок реакции. Наблюдаемые (кажущиеся, эффективные) константы скорости и термодинамические параметры активации неэлементарных реакций.
4. Природа электронных эффектов заместителей. Уравнение Гаммета как частный случай принципа линейности свободных энергий. Реакционная серия. Константа реакции ρ и σ -константа заместителя. Множественность наборов (шкал) σ -констант. Многопараметровые корреляционные уравнения.
5. Нуклеофильное замещение. Электрофильное замещение. Радикальное замещение.
6. Электрофильное присоединение. Реакции радикального присоединения. Нуклеофильное присоединение.
7. Нуклеофильное (вызванное основанием) элиминирование. Электрофильное (индуцируемое кислотой) элиминирование. Радикальные реакции элиминирования.
8. Карбокатионы. Карбанионы. Свободные радикалы. Карбены. Нитрены.
17. Стехиометрия и материальный баланс реакции. Независимые реакции и ключевые вещества. Степень конверсии реагента, выход продукта и селективность сложной реакции.
19. Идеальный периодический реактор. Непрерывный реактор идеального вытеснения. Непрерывный реактор полного (идеального) смешения.
24. Удельная производительность и выбор реактора. Выбор температуры, концентраций и степени конверсии. Применение экономических критериев оптимизации.
26. Расчет состава продуктов и селективности по кинетическим данным. Влияние концентраций, соотношения реагентов и степени конверсии на селективность. Влияние типа реактора и способа введения реагентов на селективность, выбор типа реактора и способа введения реагентов. Влияние температуры на селективность, выбор температуры. Применение экономических критериев для оптимизации сложных реакций.

б) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-16:

9. Кислотный и основной катализ, электрофильный и нуклеофильный катализ, металлокомплексный катализ, ферментативный катализ.
10. Основные характерные черты и механизмы гетерогенно-каталитических реакций. Теории гетерогенного катализа. Области протекания гетерогенного каталитического процесса. Методы исследования гетерогенно-каталитических реакций.
11. Массопередача при отсутствии химической реакции. Области протекания гетерофазного процесса
12. Методы построения кинетических моделей гомогенных реакций. Кинетика гомогенно-каталитических реакций. Кинетика ферментативных реакций. Особенности кинетики кислотно-основного катализа. Функции кислотности. Многостадийные реакции.
13. Кинетика неразветвленных цепных реакций. Кинетика разветвленных цепных реакций.
14. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в статических условиях. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в потоке. Кинетические модели гетерогенно-каталитических реакций.
15. Кинетика гетерофазных реакций

16. Медленные химические реакции. Методы изучения быстрых реакций. Неизотермические методы изучения кинетики. Обработка результатов кинетического эксперимента.

18. Константа равновесия. Скорость гомогенной реакции. Скорость гетерогенно-каталитической реакции.

20. Расчет констант равновесий. Экспериментальное изучение равновесий. Расчет равновесий простых и сложных реакций.

21. Кинетика простых необратимых реакций в периодических (статических) условиях: интегральные методы определения порядка реакции, основные кинетические зависимости. Кинетика простых необратимых реакций, протекающих в реакторе идеального вытеснения (в потоке): основные кинетические зависимости. Обратимые реакции. Дифференциальные методы исследования простых реакций.

22. Реакции с кинетическими уравнениями, содержащими несколько членов. Реакции с многочленным знаменателем в кинетическом уравнении. Реакции с более сложной кинетикой. Применение вычислительной техники для нахождения параметров кинетических уравнений.

23. Исследование температурной зависимости скорости простой реакции

25. Особенности кинетики сложных реакций. Метод маршрутов. Параллельные реакции и методы их исследования. Последовательные реакции и методы их исследования. Последовательно-параллельные реакции. Исследование сложных систем последовательных и параллельных реакций. Особенности селективности гетерофазных и гетерогенно-каталитических процессов.

в) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-20:

1. Гомо- и гетерофазные реакции, гомо- и гетерогенные реакции. Простые и сложные реакции. Элементарные и неэлементарные реакции. Типы элементарных реакций. Классификация реагентов. Типы механизмов реакций.

2. Теория соударений. Уравнение Аррениуса. Энергия активации. Теория переходного состояния. Свободная энергия, энтропия и энтальпия активации.

3. Принцип стационарности (метод стационарного состояния) Боденштейна-Семенова. Лимитирующая (скоростьопределяющая) стадия неэлементарной реакции. Молекулярность и порядок реакции. Наблюдаемые (кажущиеся, эффективные) константы скорости и термодинамические параметры активации неэлементарных реакций.

4. Природа электронных эффектов заместителей. Уравнение Гаммета как частный случай принципа линейности свободных энергий. Реакционная серия. Константа реакции ρ и σ -константа заместителя. Множественность наборов (шкал) σ -констант. Многопараметровые корреляционные уравнения.

5. Нуклеофильное замещение. Электрофильное замещение. Радикальное замещение.

6. Электрофильное присоединение. Реакции радикального присоединения. Нуклеофильное присоединение.

7. Нуклеофильное (вызванное основанием) элиминирование. Электрофильное (индуцируемое кислотой) элиминирование. Радикальные реакции элиминирования.

8. Карбокатионы. Карбанионы. Свободные радикалы. Карбены. Нитрены.

9. Кислотный и основной катализ, электрофильный и нуклеофильный катализ, металлокомплексный катализ, ферментативный катализ.

10. Основные характерные черты и механизмы гетерогенно-каталитических реакций. Теории гетерогенного катализа. Области протекания гетерогенного каталитического процесса. Методы исследования гетерогенно-каталитических реакций.

11. Массопередача при отсутствии химической реакции. Области протекания гетерофазного процесса

12. Методы построения кинетических моделей гомогенных реакций. Кинетика гомогенно-каталитических реакций. Кинетика ферментативных реакций. Особенности кинетики кислотно-основного катализа. Функции кислотности. Многостадийные реакции.

13. Кинетика неразветвленных цепных реакций. Кинетика разветвленных цепных реакций.

14. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в статических условиях. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций в потоке. Кинетические модели гетерогенно-каталитических реакций.

15. Кинетика гетерофазных реакций

16. Медленные химические реакции. Методы изучения быстрых реакций. Неизотермические методы изучения кинетики. Обработка результатов кинетического эксперимента.

17. Стехиометрия и материальный баланс реакции. Независимые реакции и ключевые вещества. Степень конверсии реагента, выход продукта и селективность сложной реакции.

18. Константа равновесия. Скорость гомогенной реакции. Скорость гетерогенно-каталитической реакции.

19. Идеальный периодический реактор. Непрерывный реактор идеального вытеснения. Непрерывный реактор полного (идеального) смешения.

20. Расчет констант равновесий. Экспериментальное изучение равновесий. Расчет равновесий простых и сложных реакций.

21. Кинетика простых необратимых реакций в периодических (статических) условиях: интегральные методы определения порядка реакции, основные кинетические зависимости. Кинетика простых необратимых реакций, протекающих в реакторе идеального вытеснения (в потоке): основные кинетические зависимости. Обратимые реакции. Дифференциальные методы исследования простых реакций.

22. Реакции с кинетическими уравнениями, содержащими несколько членов. Реакции с многочленным знаменателем в кинетическом уравнении. Реакции с более сложной кинетикой. Применение вычислительной техники для нахождения параметров кинетических уравнений.

23. Исследование температурной зависимости скорости простой реакции

24. Удельная производительность и выбор реактора. Выбор температуры, концентраций и степени конверсии. Применение экономических критериев оптимизации.

25. Особенности кинетики сложных реакций. Метод маршрутов. Параллельные реакции и методы их исследования. Последовательные реакции и методы их исследования. Последовательно-параллельные реакции. Исследование сложных систем последовательных и параллельных реакций. Особенности селективности гетерофазных и гетерогенно-каталитических процессов.

26. Расчет состава продуктов и селективности по кинетическим данным. Влияние концентраций, соотношения реагентов и степени конверсии на селективность. Влияние типа реактора и способа введения реагентов на селективность, выбор типа реактора и способа введения реагентов. Влияние температуры на селективность, выбор температуры. Применение экономических критериев для оптимизации сложных реакций.

К экзамену допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля, т. е. получившие положительные оценки за три контрольные работы и реферат. При сдаче экзамена студент получает один вопрос из перечня, приведенного выше, и две задачи.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы – до 45 мин.

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТО СПбГИ (ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок организации и проведения зачетов и экзаменов.