

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.7.1 «Математическое моделирование химических реакций»

по направлению подготовки: 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»

профиль: «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика»

«Квалификация выпускника: БАКАЛАВР

Выпускающая кафедра: ОХТ

Кафедра-разработчик рабочей программы: общей химической технологии

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «**Математическое моделирование химических реакций**» являются:

а) формирование знаний о закономерностях протекания во времени простых и сложных, обратимых и необратимых, гомогенных и гетерогенных, каталитических и т.д. реакций и построение их математических моделей.

б) обучение способам применения математических методов обработки экспериментальных данных.

в) подготовка студента к выполнению расчетов при составлении кинетической модели химической реакции.

2. Содержание дисциплины «Математическое моделирование химических реакций»

Элементы и составные части математической модели химической реакции

Кинетические модели простых реакций.

Кинетические модели сложных реакций.

Кинетические модели каталитических реакций

Кинетические модели фотохимических и радиохимических реакций.

Математическое моделирование цепных реакций

3. В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1) Знать:

а) Понятия: механизм химической реакции, скорость и константа скорости химической реакции, кинетические кривые, порядок реакции, энергия активации, математическая модель.

б) Научные основы влияния различных факторов на скорость химической реакции;

в) Кинетические закономерности протекания реакций простых типов с различными порядками.

г) Кинетические закономерности протекания сложных и обратимых реакций.

д) Кинетические закономерности протекания гомогенных и гетерогенных каталитических процессов, механизмы кислотно-основного, металлокомплексного и ферментативного катализа.

е) Механизм и кинетику реакций при воздействии на вещество света и частиц высоких энергий.

ж) Кинетические закономерности протекания цепных и разветвленно-цепных реакций

2) Уметь:

1. а) Применять различные способы обработки экспериментальных данных.

б) Определять порядок реакции по реагентам, скорость реакции, константу скорости и энергию активации.

в) Составить математическую модель простых, последовательных и параллельных реакций.

г) Определять константу равновесия обратимых реакций, исследовать комплексообразование и составить математическую модель равновесных процессов.

д) Составить математическую модель каталитического и радикально-цепного процесса.

е) На основании математической модели процесса вычислять концентрацию компонентов в любой момент времени.

3) Владеть:

а) Методами решения прямой и обратной задач химической кинетики процессов различной сложности.

Зав.каф. ОХТ



Х. Э. Харлампиди