

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол № 4 от 29 мая 2014 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): Современные расчетные методы химической термодинамики

Цель: обучение использованию современных методов химической термодинамики для решения научных и практических проблем.

Задачи обучения направлено на приобретение учащимися следующих знаний и навыков: (1) знание общих возможностей и ограничений методов термодинамики, теоретических оснований расчетных термодинамических методов, способов выбора необходимых исходных данных и путей использования результатов расчетов, (2) умение формулировать, ставить интересующую задачу термодинамически, то есть описывать интересующий объект, процесс или систему на языке термодинамических понятий и количественных соотношений, (3) умение решать несложные задачи и знать необходимые численные методы решения в более сложных случаях, оценивать достоверность результата.

2. Уровень высшего образования– подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки, **направленности:** Физическая химия, Химия твердого тела

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)».

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	З1 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной

исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
ПК-4 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	<p>31 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии</p> <p>312 (ПК-4) Знать возможности и ограничения термодинамических моделей и методов расчетов равновесий,</p> <p>313 (ПК-4) Знать математические основы расчетных методов, источники поиска необходимых исходных данных, перспективы и способы использования результатов термодинамических расчетов</p> <p>У3 (ПК-4) Уметь строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий</p> <p>У12 (ПК-4) Уметь описывать интересующий объект, процесс или систему на языке термодинамических понятий и количественных соотношений</p> <p>В5 (ПК-4) Владеть современными методами термодинамических расчетов с использованием программного обеспечения и баз термодинамических данных о свойствах веществ</p>
ПК-16 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	У4 (ПК-16) Уметь использовать диаграммы состояния, полученные экспериментально или с помощью расчетно-теоретических методов, при решении задач химии твердого тела

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 44 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 8 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 64 часа составляет самостоятельная работа аспиранта.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

В специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Физика», «Физическая химия».

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и	Всего
Тема 1. Основы термодинамического моделирования сложных систем и процессов	12	6					6	6		6
Тема 2. Методы описания гомогенных химических реакций	9	3					3	6		6
Тема 3. Характеристические функции и критерии равновесия	11	3					3	8		8
Тема 4. Расчеты равновесного состава. Формулировка задачи и численные решения	26	12				2	14	12		12
Тема 5. Обратные задачи химиче-	20	6				2	8	12		12

ской термодинамики										
Тема 6. Методы согласования и оптимизации термодинамических данных	20	6				2	8	12		12
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>	10					2	2			8
Итого	108	36				8	44	56		64

8. Образовательные технологии:

Проводятся лекции с использованием мультимедийной техники; лекции-демонстрации проблемного характера, посвященные практическим аспектам применения современных расчетных методов химической термодинамики.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и дополнительной литературы, а также из интернет-ресурсов. Дополнительные материалы (руководства к выполнению конкретных заданий) размещаются на сайте лаборатории химической термодинамики по адресу: <http://td.chem.msu.ru/study/specialcourses/>

10. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Л. Кауфман, Х. Бернштейн. Расчет диаграмм состояния с помощью ЭВМ. Пер. с англ. /под ред. И. Л. Аптекаря, А. Я. Шиняева. М: Мир, 1972, 328 С.
2. Г. Ф. Воронин. Основы термодинамики. М: МГУ, 1987, 192 С.
3. Г. Ф. Воронин. Расчеты фазовых и химических равновесий в сложных системах. В сб. " Физическая химия. Современные проблемы". Под ред. Я. М. Колотыркина. М: Химия, 1984, С. 112-143.
4. Машинный расчет парожидкостного равновесия многокомпонентных смесей. Пер. с англ. /под ред. В. М. Платонова. М: Химия, 1971, 216 с.

5. А. Д. Пелтон. Фазовые диаграммы. В сб. " Физическое металловедение". Т. 2. Пер. с англ. /под ред. О. В. Абрамова, А. В. Серебрякова. М: Металлургия, 1987, С. 50-98.
6. И. К. Карпов. Физико-химическое моделирование в геохимии. Новосибирск: Наука, 1981, 248 С.
7. Н. Ф. Степанов, М. Е. Ерлыкина, Г. Г. Филиппов. Методы линейной алгебры в физической химии. М: МГУ, 1976.
8. Н. Н. Калиткин. Численные методы. М: Наука, 1978, 512 С.
9. Математические проблемы фазовых равновесий. Новосибирск, Наука, 1983, 144 С.
10. Л. С. Палатник, А. И. Ландау. Фазовые равновесия в многокомпонентных системах. Харьков, издательство харьковского гос. университета, 1961, 408 С.

Дополнительная литература

Энциклопедия «Современное Естествознание». Т.1 Физическая химия. Раздел Химическая термодинамика. М., Наука-Флинта. 1999.я

Периодические издания

Г.Ф.Воронин. Выпуклые функции в термодинамике гетерогенных веществ. Журн. физ. химии. 2005, т. 79, № 12, с.2126-2139.

Г.Ф.Воронин. Заметки о качестве учебников по термодинамике. Вестн. Моск. Университета. Серия 2. Химия. 1997. т.38, № 2, с.138-133.

Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы:

ИВТАНТЕРМО <http://www.ihed.ras.ru>, <http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan/> .

NIST <http://www.nist.gov>

FACTSAGE <http://www.crct.polymtl.ca/fact/fact.htm>

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели: Воронин Геннадий Федорович, д.х.н., профессор, voronin@td.chem.msu.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.

2. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета.

• Образцы контрольных вопросов для текущего контроля усвоения материала (опрос на лекции):

1. Выразить химический состав гетерогенной системы (брутто-состав) через составы и количества входящих в нее фаз.
2. Какие преимущества дает аппроксимация зависимостей термодинамических функций растворов от состава ортогональными многочленами?
3. Пояснить физический смысл множителей Лагранжа при расчетах равновесий в газообразной смеси веществ.
4. Указать возможные наборы компонентов и независимых реакций в смеси газов O_2 , NO , NO_2 , H_2O и NH_3 .
5. Система содержит четыре вещества, между которыми возможна химическая реакция $A+BC=AB+C$. Указать число компонентов (независимых составляющих) в этой системе.
6. Существующие методы условной оптимизации позволяют эффективно находить в общем случае координаты локальных, но не глобальных экстремумов характеристических функций. Какие термодинамические выводы следуют из этого?
7. Может ли существовать несколько линейно независимых химических реакций, у которых одинаковые исходные вещества и продукты реакции, но различные стехиометрические коэффициенты?

• Образцы домашних заданий:

1. Показать, что энергия Гиббса и другие термодинамические потенциалы являются выпуклыми функциями экстенсивных переменных и вогнутыми функциями интенсивных переменных.
2. Доказать, что задача расчета химического равновесия в смеси идеальных газов имеет единственное решение.
3. Выполнить триангуляцию фазовых полей на диаграмме состояний квазитройной системы Y_2O_3 - BaO - CuO при 1000 К, основываясь на термодинамических свойствах фаз, опубликованных в Докл. АН СССР, 1991, Т. 319, N4, С. 899.

• Образцы вопросов для промежуточной аттестации – **зачета**:

1. Исходные понятия и постулаты термодинамики. Вариантность равновесия. Внешние и внутренние термодинамические переменные. Понятие о расчетах равновесий, типовые задачи. Термодинамические критерии равновесия. Вариации термодинамических переменных и функций, их роль в формулировании критериев равновесия. Граничный экстремум характеристических функций.
2. Компоненты и составляющие вещества (независимые, подвижные, инертные, действительные, возможные). Способы выражения химического и фазового состава отдельных фаз и термодинамической системы в целом. Запись характеристических функций с использованием соответствующих переменных.

3. Понятие модели термодинамической системы. Общие термодинамические модели, используемые при расчетах фазовых и химических равновесий, их возможности, ограничения, области применения. Модели закрытых и открытых систем. Примеры зависимости термодинамических функций двойных растворов от состава и температуры.
4. Методы расчета фазовых равновесий. Примеры равновесий в многофазных системах с индивидуальными соединениями, возможности их расчета с использованием энергий Гиббса и химических потенциалов компонентов.
5. Термодинамические модели фаз переменного состава. Равновесия стабильные и метастабильные. Параметры стабильности и параметры взаимодействия компонентов, способы их определения и применение при термодинамических расчетах. Модель под решеток, ее применение для описания термодинамических функций твердых растворов.
6. Диаграммы состояния термодинамических систем, общие и частные, методы их расчета. Основы построения фазовых диаграмм методом выпуклых оболочек.
7. Химические равновесия в гомогенных системах. Выражение стехиометрии и условий сохранения масс компонентов при химических реакциях в закрытой системе. Способы выбора компонентов и линейно-независимых реакций. Методы расчета равновесного состава.
8. Использование метода неопределенных множителей Лагранжа при расчетах равновесий. Физический смысл множителей Лагранжа. Понятие о сопряженных двойственных задачах выпуклого и линейного программирования.
9. Термодинамические данные, необходимые для расчетов равновесий, источники их получения, использование в термодинамических расчетах.
10. Понятие и примеры обратных задач химической термодинамики.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проходит по билетам, включающем 2 вопроса. Уровень знаний аспиранта по каждому вопросу на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае, если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено».

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине СОВРЕМЕННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О КОРРОЗИОННЫХ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ ПРИ СОЗДАНИИ И ЭКСПЛУАТАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ на основе карт компетенций выпускников

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Несистематические знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Сформированные и систематические знания о	Устный опрос в ходе зачета
У1(ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Умение использовать только отдельные методы	Ограниченное умение выбирать и использовать современные расчетные методы химической термодинамики	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение выбирать и применять современные расчетные методы химической термодинамики	Сформированное умение применять при решении практических задач современные расчетные методы химической термодинамики	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции
31 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Ограниченные представления о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Сформированные и систематические знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Устный опрос в ходе зачета

	1	2	3	4	5	
<i>312 (ПК-4) Знать</i> возможности и ограничения термодинамических моделей и методов расчетов равновесий	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Ограниченные представления о о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Сформированные и систематические знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Устный опрос в ходе зачета
<i>313 (ПК-4) Знать</i> математические основы расчетных методов, источники поиска необходимых исходных данных, перспективы и способы использования результатов термодинамических расчетов	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания математических основы расчетных методов, возможностей использования результатов расчета	Ограниченные знания математических основы расчетных методов, возможностей использования результатов расчета	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания математических основы расчетных методов, источников данных и возможностей использования результатов расчета	Сформированные знания математических основы расчетных методов, источников данных и возможностей использования результатов расчета	Устный опрос в ходе зачета
<i>У3 (ПК-4) Уметь</i> строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий	Отсутствие умений	Умеет строить термодинамические модели простых систем, но затрудняется использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий	Умеет строить термодинамические модели систем, но затрудняется использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий	Умеет строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий с небольшим количеством принципиальных ошибок	Умеет строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции, Домашние задания
<i>У12 (ПК-4) Уметь</i> описывать интересующий объект, процесс или систему на языке термодинамических понятий и количественных соотношений	Отсутствие умений	Описывает интересующий объект, процесс или систему на языке термодинамических понятий и количественных соотношений с грубыми смы-	Допускает ошибки при описании интересующего объекта, процесса или системы на языке термодинамических понятий и количественных соотношений	Допускает отдельные принципиальные ошибки при описании интересующего объекта, процесса или системы на языке термодинамических понятий и количественных соотношений	Умеет описывать интересующий объект, процесс или систему на языке термодинамических понятий и количественных соотношений	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции, Домашние задания

		словыми ошибками				
В5 (ПК-4) Владеть современными методами термодинамических расчетов с использованием программного обеспечения и баз термодинамических данных о свойствах веществ	Отсутствие навыков	Демонстрирует навыки использованием баз термодинамических данных о свойствах веществ, но не владеет программным обеспечением	Демонстрирует навыки использования современных методов термодинамических расчетов с использованием программного обеспечения и баз термодинамических данных о свойствах веществ, но допускает систематические ошибки	Демонстрирует навыки использования современных методов термодинамических расчетов с использованием программного обеспечения и баз термодинамических данных о свойствах веществ, но допускает отдельные ошибки	Демонстрирует сформированные навыки использования современных методов термодинамических расчетов с использованием программного обеспечения и баз термодинамических данных о свойствах веществ	Домашние задания
У4 (ПК-16) Уметь использовать диаграммы состояния, полученные экспериментально или с помощью расчетно-теоретических методов, при решении задач химии твердого тела	Отсутствие умений	Базовые навыки использования диаграмм состояний при решении задач химии твердого тела	Фрагментарные навыки использования диаграмм состояния, полученных экспериментально или с помощью расчетно-теоретических методов, при решении задач химии твердого тела	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы навыки использования диаграмм состояния, полученных экспериментально или с помощью расчетно-теоретических методов, при решении задач химии твердого тела	Сформированные навыки использования диаграмм состояния, полученных экспериментально или с помощью расчетно-теоретических методов, при решении задач химии твердого тела	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции, Домашние задания