

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): ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ

Краткая аннотация: В рамках дисциплины "Экспериментальные и теоретические методы исследования фазовых равновесий" аспиранты получают углубленное представление о современном физико-химическом анализе многокомпонентных систем. Излагаются современные подходы к экспериментальному определению фазовых равновесий и построению диаграмм состояния. Изучаются методы термодинамического моделирования и модели, лежащие в их основе. Рассматривается применения метода графов для представления, формализации и прогноза фазовых равновесий в многокомпонентных системах. Особо обсуждаются прикладные аспекты использования диаграмм состояния в современном материаловедении. Изучение теоретических аспектов дополняется самостоятельным выполнением домашних заданий.

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

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки, направленности: Неорганическая химия, 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-1 способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
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	31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности В2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
ПК-1 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) 02.00.01 Неорганическая химия	31 (ПК-1) Знать современное состояние науки в области неорганической химии У4 (ПК-1) Уметь использовать диаграммы состояния при решении задач современного материаловедения
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	31 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии У3 (ПК-4) Уметь строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий
ПК-16 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию	31 (ПК-16) Знать современное состояние науки в области химии твердого тела

диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.21 Химия твердого тела	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 66 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (54 часа занятия лекционного типа, 4 часа групповые консультации, 4 часа мероприятия текущего контроля успеваемости, 4 часа мероприятия промежуточной аттестации), 42 часов 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», «Аналитическая геометрия», «Линейная алгебра», «Физика», «Теория вероятности и математическая статистика», «Неорганическая химия», «Физическая химия», «Кристаллохимия», а также спецкурсы, посвященные диаграммам состояния многокомпонентных систем и методам физико-химического анализа.

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					Самостоятельная работа обучающегося, часы			
		из них					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. Методы и программы термодинамического моделирования в исследовании фазовых равновесий. Используемые модели и модельные допущения.	38	24		1		1	26	12		12
Тема 2. Современные экспериментальные методы построения диаграмм фазовых равновесий. Методы обработки экспериментальных данных, параметризация термодинамических моделей.	28	18		1		1	20	8		8
Тема 3. Метод графов для представления, формализации, анализа и прогноза фазовых равновесий в многокомпонентных системах	12	6		1		1	8	4		4
Тема 4. Прикладные аспекты использования диаграмм фазовых равновесий в материаловедении.	16	6		1		1	8	8		8
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>	14					4	4	10		10
Итого	108	54		4		8	66	42		42

8. Образовательные технологии:

Наряду с традиционными лекциями, для предметного ознакомления аспирантов с возможностями современного программного обеспечения проводятся лекции-демонстрации. В преподавании дисциплины используются результаты исследований, проведенных сотрудниками МГУ.

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

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень домашних заданий. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов. Аспиранты также снабжаются инструкциями по работе с приборами, используемыми в физико-химическом анализе. Дополнительные материалы (руководства к выполнению конкретных заданий) размещаются на сайте кафедры общей химии: www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html

10. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Н.А. Белов Диаграммы состояния тройных и четверных систем. М.: "МИСИС", 2007. 358 с.
2. Физические методы исследования неорганических веществ (под ред. Никольского А.Б.). М.: Академия, 2006, в 2 томах
3. Афиногенов Ю.П., Гончаров Е.Г., Семенова Г.В., Зломанов В.П. Физико-химический анализ многокомпонентных систем. М.: МФТИ, 2006. 332 с.
4. Емелина А.Л. Дифференциальная сканирующая калориметрия М.: МГУ, 2009, 42 с.
5. Криштал М.М., Ясников И.С., Полуниин В.И. и др. Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный микроанализ в примерах практического применения.– М.: Техносфера, 2009. – 208 с.

Дополнительная литература

1. Соколовская Е.М., Гузей Л.С. Металлохимия. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986. – 264 с.
2. Д. Брандон, У. Каплан Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля. М.: Техносфера, 2004. 384 с.
3. Документация к программной системе Thermo-Calc.
4. Николаев С.В., Керимов Э.Ю., Слюсаренко Е.М. Фазовые равновесия в четырехкомпонентных системах Ni-Re-W-V, Ni-Re-W-Nb, Ni-Re-W-Ta, Ni-Re-W-Cr и Ni-Re-W-Mo при 1375 К // Вестник МГУ. Серия 2. Химия. – 2013. – Т.54, № 4. – С. 234 – 241.
5. Николаев С.В., Керимов Э.Ю., Слюсаренко Е.М. Фазовые равновесия в четырехкомпонентной системе Ni-Nb-Mo-Re при 1375 К // Материаловедение. – 2013. – № 7. – С. 03 – 10.

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

- Сайт разработки системы CALPHAD: www.calphad.org

- Сайт международного сообщества по вычислительной термодинамике: www.openalphad.com

- Доступ к различным базам данных по материаловедению: materials.springer.com
- Сайт разработки и распространения программы Thermo-Calc: www.thermocalc.com
- База данных ИВТАНТЕРМО: www.ihed.ras.ru

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

Дунаев Сергей Федорович, д.х.н., профессор, dunaev@general.chem.msu.ru

Мешков Леонид Леонидович, д.х.н., профессор, lmesh@mail.ru

Кузнецов Виктор Николаевич, к.х.н., доцент, vnk1999@mail.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:
 1. Как описывается зависимость термодинамических свойств фаз от их состава и температуры?
 2. Охарактеризуйте влияние химического и магнитного упорядочения на термодинамические свойства фаз.
 3. Перечислите и кратко опишите способы учета тройных и более сложных взаимодействий.
 4. В чем состоят достоинства и в чем – недостатки кинетических методов построения диаграмм фазовых равновесий?
 5. Назовите основные положения, лежащие в основе метода графов.
 6. Как свойства исследуемых систем определяют режим термической обработки образцов?
 - Образцы домашних заданий:
 1. Самостоятельно постройте многоподрешеточную модель для заданной фазы
 2. Самостоятельно изучите инструкцию к программе Thermo-Calc
 3. Самостоятельно подберите набор экспериментальных данных для построения термодинамической модели заданной фазы
 4. Самостоятельно проведите обработку результатов, полученных методом диффузионных пар

5. Предскажите фазовые равновесия в четырехкомпонентной системе по данным о строении тройных изотерм, используя метод графов
6. Изучите по периодической литературе примеры использования диаграмм фазовых равновесий в процессах разработки новых материалов

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

1. Стандартные состояния для энергии Гиббса. «Скользящее» стандартное состояние и стандартное состояние в виде устойчивой формы элемента при 0 К и при стандартной температуре (stable elemental reference, SER).
2. Обобщенная модель Майера-Келли для описания температурной зависимости термодинамических свойств фазы фиксированного состава.
3. Многочлены Гуггенгейма-Редлиха-Кистера. Расчет парциальных свойств компонентов. Другие полиномиальные модели (ряды Маргулеса, ортогональные полиномы), их преимущества и недостатки. Температурная зависимость коэффициентов полиномов.
4. Многоподрешеточная модель. «Квазикомпоненты» (end-members) и параметры взаимодействия в подрешетках. Для указанной фазы с известной структурой построить многоподрешеточную модель (перечислить подрешетки, указать заселенности, перечислить квазикомпоненты).
5. Основные методы экстраполяционного предсказания термодинамических свойств тройной фазы по известным модельным описаниям граничных подсистем. Симметричные (модели Муггиану, Келера) и асимметричные (модели Тупа, Бонье и др.) модели, их преимущества и недостатки. Поправки на тройные взаимодействия.
6. Модели жидких фаз (модель ассоциированных растворов, модифицированная квазихимическая теория, модель двухподрешеточной ионной жидкости), их преимущества и недостатки в сравнении с формальным полиномиальным описанием.
7. Основные понятия метода графов. Алгоритм применения метода к прогнозированию фазовых равновесий в четырехкомпонентной системе.
8. Предварительная подготовка экспериментальных данных для использования при подборе параметров модельного термодинамического описания (критический анализ данных).
9. Порядок выполнения расчета двойной системы или изотермического либо политермического разреза тройной по имеющемуся термодинамическому описанию (базе данных) с использованием с программной системой Thermo-Calc.
10. Метод равновесных сплавов. Методика приготовления образцов сплавов и режимы их термической обработки. Достоинства и недостатки метода.

11. Общая характеристика кинетических методов. Метод диффузионных пар. Методика приготовления образцов и режимы их термической обработки.
12. Общая характеристика кинетических методов. Метод суперпозиции диффузионных зон. Метод гомогенизации. Методика приготовления образцов и режимы их термической обработки.
13. Методы термического анализа в построении диаграмм фазовых равновесий.
14. Особенности использования термических методов анализа для построения политермических сечений диаграмм фазовых равновесий.
15. Прогноз фазовых равновесий в четырехкомпонентной системе с использованием метода графов по данным о строении тройных изотерм (на конкретных примерах).
16. Диаграммы фазовых равновесий как основа для разработки современных функциональных материалов.

- Образцы практических контрольных заданий для промежуточной аттестации – **зачета**:

Задание 1. Предложите последовательность, в которой с применением метода графов прогнозируются фазовые равновесия в четырехкомпонентной системе, если известны диаграммы фазовых равновесий соответствующих тройных систем.

Задание 2. Найдите ошибки в предложенной фазовой диаграмме двойной системы и укажите возможные способы ее исправления.

Задание 3. Предложите алгоритм установления фазовых равновесий в заданной частично известной трехкомпонентной металлической системе методом диффузионных пар.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам; билет включает 2 вопроса: первый вопрос по методам моделирования фазовых равновесий (№№ 1 – 7), второй вопрос по экспериментальным методам определения диаграмм состояния и методам их прогнозирования (№№ 8–16), а также практическое контрольное задание (ПКЗ). Для подготовки ответа аспирант использует экзаменационные листы, которые сохраняются после приема экзамена в течение года. На каждого аспиранта заполняется протокол приема зачета, в который вносятся вопросы билетов и вопросы, заданные соискателю членами комиссии. Уровень знаний аспиранта по каждому вопросу оценивается на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае, если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено». Ведомость приема зачета подписывается членами комиссии.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине Экспериментальные и теоретические методы исследования фазовых равновесий 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	
В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие владения	Неполное и недостаточное владение отдельными методами экспериментального и теоретического исследования фазовых равновесий	Владение методами исследования фазовых равновесий, ограниченное шаблонными примерами и достаточное только в рутинных случаях	Довольно полное, но содержащее отдельные пробелы владения методами экспериментального и теоретического исследования фазовых равновесий, достаточное для решения большинства задач	Полностью сформированное систематическое и гибкое владение методами экспериментального и теоретического исследования фазовых равновесий	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета
З1 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о методах физико-химического анализа	Несистематические и неполные знания о методах физико-химического анализа	В целом систематические, но содержащие отдельные пробелы знания о методах физико-химического анализа, достаточные для самостоятельного использования этих методов	Сформированные и систематические знания о методах физико-химического анализа	Устный опрос в ходе зачета

	1	2	3	4	5	
<p>B2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований</p>	Отсутствие владения	Владение технологиями планирования только отдельных этапов физико-химического анализа	Ограниченное владение приемами планирования физико-химического анализа, достаточное только в простейших случаях	В целом успешное, но недостаточно гибкое владение приемами планирования физико-химического анализа.	Сформированное и гибкое владение технологиями планирования физико-химического анализа	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета
<p>У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования</p>	Отсутствие умений	Частичное и неполное умение выбирать и использовать методы физико-химического анализа	Умение выбирать и использовать методы физико-химического анализа, ограниченное шаблонными ситуациями	В целом достаточно полное и успешное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать методы физико-химического анализа	Сформированное умение гибко подбирать методы физико-химического анализа и максимально использовать их возможности	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета; выполнение домашних заданий
<p>З1 (ПК-1) Знать современное состояние науки в области неорганической химии</p>	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о роли и применении физико-химического анализа в неорганической химии	Ограниченные и неполные знания о роли и применении физико-химического анализа в неорганической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о роли и применении физико-химического анализа в неорганической химии, достаточные для самостоятельного использования расчетных и экспериментальных методов	Полностью сформированные и систематические знания о роли и применении физико-химического анализа в неорганической химии	Устный опрос в ходе зачета

	1	2	3	4	5	
<i>У4 (ПК-1)</i> Уметь использовать диаграммы состояния при решении задач современного материаловедения	Отсутствие умений	Фрагментарные навыки использования диаграммы состояния при решении задач современного материаловедения	Частично сформированное, но не систематическое умение использовать диаграммы состояния при решении задач современного материаловедения	В целом успешно сформированное умение использовать диаграммы состояния при решении задач современного материаловедения	Сформированное умение использовать диаграммы состояния при решении задач современного материаловедения	ПКЗ в ходе зачета
31 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о современном состоянии отдельных областей физической химии (в частности, методов физико-химического анализа)	Частично сформированное, но не систематические знания о современном состоянии отдельных областей физической химии (в частности, методов физико-химического анализа)	В целом успешно сформированное знание о современном состоянии различных областей физической химии (в частности, методов физико-химического анализа)	Сформированное знание о современном состоянии различных областей физической химии (в частности, методов физико-химического анализа)	Устный опрос в ходе зачета
<i>У3 (ПК-4)</i> Уметь строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий	Отсутствие умений	Фрагментарные навыки термодинамического моделирования систем малой размерности и расчета равновесий в таких системах	Частично сформированное, но не систематическое умение строить термодинамические модели систем разной размерности и рассчитывать фазовые равновесия	В целом успешно сформированное умение строить термодинамические модели систем разной размерности и рассчитывать фазовые равновесия	Сформированное умение строить термодинамические модели систем разной размерности и рассчитывать фазовые и химические равновесия	ПКЗ в ходе зачета

	1	2	3	4	5	
31 (ПК-16) Знать современное состояние науки в области химии твердого тела	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о роли и применении физико-химического анализа в химии твердого тела	Ограниченные и неполные представления о роли и применении физико-химического анализа в химии твердого тела	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о роли и применении физико-химического анализа в химии твердого тела, достаточные для самостоятельного использования расчетных и экспериментальных методов	Полностью сформированные и систематические знания о роли и применении физико-химического анализа в химии твердого тела	Устный опрос в ходе зачета
У4 (ПК-16) Уметь использовать диаграммы состояния, полученные экспериментально или с помощью расчетно-теоретических методов, при решении задач химии твердого тела	Отсутствие навыков использования фазовых диаграмм	Частичное и неполное умение использовать теоретические и экспериментальные диаграммы состояния при решении задач химии твердого тела	Успешное в простых случаях, но недостаточно полное и сформированное умение использовать теоретические и экспериментальные диаграммы состояния при решении задач химии твердого тела	Довольно полное и успешное, но иногда недостаточно гибкое умение использовать теоретические и экспериментальные диаграммы состояния при решении задач химии твердого тела	Сформированная и гибкая система умений использовать теоретические и экспериментальные диаграммы состояния при решении задач химии твердого тела, позволяющая успешно работать в этой области	Выполнение ПКЗ в ходе зачета