

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«30» мая 2014 г..

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Экспериментальные и теоретические методы исследования фазовых
равновесий**

Уровень высшего образования:
Подготовка кадров высшей квалификации

Направление подготовки (специальность):

04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) ОПОП:

Физическая химия 02.00.04

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 19.05.2014)

Москва 2014

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» на основе Образовательного стандарта, самостоятельно установленного МГУ имени М.В.Ломоносова (далее – ОС МГУ), утвержденного Приказом № 552 от 23.06.2014 г. по МГУ с учетом изменений в ОС МГУ, внесенных Приказом №831 по МГУ от 31.08.2015 г.

Год (годы) приема на обучение 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019, 2019/ 2020

1. 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, **направленность:** Физическая химия.

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)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-1: Способность проводить комплексные исследования структурных, термодинамических и кинетических характеристик систем разной природы с использованием современных экспериментальных методов	Уметь использовать диаграммы состояния при решении задач современного материаловедения Уметь строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий 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 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
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: <i>зачет</i>	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., Полунин 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

- Материально-техническое обеспечение: занятия проводятся в обычной аудитории с возможностью подключения техники для демонстрации презентаций и выходом в сеть ИНТЕРНЕТ.

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 приведены в п.5.
 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 Туа, 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.

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)

Оценка Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач