

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

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«22» мая 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Термодинамическое моделирование фазовых равновесий

Уровень высшего образования:
Магистратура

Направление подготовки (специальность):
04.04.01 Химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Химия твердого тела

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 12.05.2020)

Москва 2020

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 / специальности 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры), утвержденного приказом МГУ от 30 августа 2019 года № 1033.

Год (годы) приема на обучение 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-2.М. Способен применять теоретические основы методов исследования, знание устройства и принципов работы современного оборудования для изучения строения и свойств твердых веществ и материалов; разрабатывать новые методики получения и обработки данных	СПК-2.М.4. Способен использовать результаты изучения состава, строения и свойств твердых веществ и материалов для построения диаграмм состояния–многокомпонентных систем	Знать: Современные математические и физические модели, используемые при описании свойств веществ Уметь: проводить критический анализ результатов экспериментальных исследований и отбирать данные для термодинамического моделирования свойств веществ Уметь: интерпретировать результаты математического моделирования свойств фаз Владеть: навыками физико-математического моделирования свойств веществ и процессов с их участием

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 42 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (19 часов занятия лекционного типа, 17 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – текущий контроль успеваемости, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 30 часов составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

Знать: основные определения, теоремы и методы математического анализа; общие положения, законы и теории неорганической химии, физической химии, кристаллохимии, химии твердого тела, основы термодинамики фазовых равновесий.

Уметь: интерпретировать диаграммы состояния, выполнять анализ, обобщение и систематизацию опубликованных данных, применять математические методы для решения химических задач.

Владеть: навыками физико-математического моделирования свойств химических объектов и процессов с их участием, навыками использования современной вычислительной техники и специализированного программного обеспечения в научно-исследовательской работе.

5. 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 т.п.	Всего
Тема 1. Термодинамика фазовых равновесий.	12	4	4				8	4		4
Тема 2. Термодинамические модели фаз.	22	6	5			2	13	8		8
Тема 3. Обобщающий расчет.	10	4	4				8	4		4
Тема 4. Основные модули программы ThermoCalc.	16	5	4				9	6		6
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	12			2		2	4	8		8
Итого	72	19	17	2		4	42	30		30

Содержание тем:

Тема 1. Термодинамика фазовых равновесий. Кривые $G(x, T)$ и фазовые диаграммы. Способы выбора стандартных состояний энтальпии и энергии Гиббса. Условия стабильности. Стабильные, метастабильные и другие «ограниченные» равновесия.

Тема 2. Термодинамические модели фаз. 1. Формальное («феноменологическое») описание зависимости термодинамических свойств от температуры и состава фаз. Одно- и многоподрешеточные модели фаз. Параметры стабильности и параметры взаимодействия. Построение модели многоподрешеточной фазы (интерметаллического соединения) по ее кристаллической структуре. Модели жидких фаз: квазихимическая и модифицированная квазихимическая теория, модель ассоциированных растворов и др. Влияние химического и магнитного упорядочения на термодинамические свойства фаз. Другие модели с явным учетом физических эффектов (физико-эмпирическое описание термодинамических свойств). Экстраполяционное предсказание свойств тройных и более сложных систем по описанию граничных двойных подсистем. Учет тройных и более сложных взаимодействий.

Тема 3. Обобщающий расчет (оптимизация данных, «computer assessment») двойных и более сложных систем. Понятие о возможностях современных методов неэмпирического (*ab initio*) расчета термодинамических свойств кристаллических веществ и их использовании в практике обобщающих расчетов.

Тема 4. Основные модули программы ThermoCalc. Основные модули программной системы: общее управление системой (SYS), работа с базами данных (DAT), работа с моделями фаз (GIBBS_ENERGY_SYSTEM), расчет равновесий (POLY), подбор параметров моделей фаз по экспериментальным данным (PARROT). Команды для расчета зависимостей свойств от состава (STEP) и фазовых диаграмм (MAP). Графическое представление результатов (постпроцессор в модуле POLY).

6. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций. На практических занятиях студенты знакомятся с работой отдельных модулей программного пакета ThermoCalc.

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

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По каждой теме указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов. Дополнительные материалы размещаются на сайте кафедры общей химии: www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. И. Ансара. Представление термодинамических свойств многокомпонентных сплавов. –В сб.: Диаграммы фаз в сплавах /под ред. Л. Беннета, Т. Массальски, Б. Гиссена. –М.: «Мир», 1986. с. 65–76, с. 142–150.
2. И. К. Карпов. Физико-химическое моделирование в геохимии. –Новосибирск: Наука, 1981. –248 С.

3. М. Рэнд. Количественные предсказания в физике твердого тела: характеристики, требуемые для расчетов фазовых диаграмм. – В сб.: Диаграммы фаз в сплавах /под ред. Л. Беннета, Т. Массальски, Б. Гиссена. –М.: «Мир», 1986. с. 65-76
4. Г. Ф. Воронин. Основы термодинамики. –М: МГУ, 1987. –192 С.

Дополнительная литература

1. 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.
 2. H. L. Lukas, S. G. Fries and B. Sundman. Computational Thermodynamics: The Calphad Method. – Cambridge University Press. New York. 2007. –313 С.
 3. M Dinsdale A. SGTE data for pure elements. CALPHAD. – 1991.– V. 15, No. 4. – P. 317-425
 4. Hillert M. SOME viewpoints on the use of a computer for calculating phase diagrams. 273-312, B. – 1981. – V. 103. – P. 31–40
 5. Hillert M. The compound energy formalism. J. of Alloys and Compounds. 2001. V. 320. – P. 161–176
 6. J-O Andersson, Thomas Helander, Lars Hdghmd, Pingfang Shi, Bo Sundman. THERMO-CALC & DICTRA, Computational Tools For Materials Science. CALPHAD. 2002. V. 26, No.2. – P. 273-312.
 7. N. Saunders and A. P. Miodownik. CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams): A Comprehensive Guide. – **PERGAMON**, Elsevier Science Inc. USA. 1998. –463 с.
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
 1. Thermo-Calc®-Academic (Version 4.0.0.4674) [electronic resource]. — Software package (235 Mb). — Thermo-Calc® Software AB. — Stockholm, 2009.
 2. Springer Materials Landolt-Börnstein Database: www.springermaterials.com/docs/index.html
 2. База данных «Термические Константы Веществ»: www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html
 3. База структурных и термодинамических данных для бинарных систем Pauling File.
 - Описание материально-технической базы.
Занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийным экраном и персональными компьютерами.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

к.х.н., в.н.с. Кузнецов Виктор Николаевич, vnk1999@mail.ru, 8(495)939-35-38.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Вопросы для экзамена:

1. Стандартные состояния для энергии Гиббса. «Скользящее» стандартное состояние и стандартное состояние в виде устойчивой формы элемента при ОК 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. Построить многоподрешеточную модель (перечислить подрешетки, указать заселенности, перечислить квазикомпоненты) для фазы со структурой, указанной преподавателем.
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. Предварительная подготовка экспериментальных данных для использования при подборе параметров модельного термодинамического описания (критический анализ данных).
8. Практическая работа с программной системой Thermo-Calc: выполнение расчета двойной системы или изотермического либо политермического разреза тройной по имеющемуся термодинамическому описанию (базе данных).

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

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

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: Современные математические и физические модели, используемые при описании свойств веществ	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на промежуточной аттестации
Уметь: интерпретировать результаты математического моделирования свойств фаз Уметь: проводить критический анализ результатов экспериментальных исследований и отбирать данные для термодинамического моделирования свойств веществ	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на промежуточной аттестации
Владеть: навыками физико-математического моделирования свойств веществ и процессов с их участием	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на промежуточной аттестации