

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением Ученого совета ННГУ

протокол от

31 августа 2021 г. № 11

Рабочая программа дисциплины
Химическая термодинамика материалов

Направление подготовки
04.06.01 «Химические науки»

Направленность подготовки
02.00.01 «Неорганическая химия»; 02.00.02 «Аналитическая химия»; 02.00.03 «Органическая химия»; 02.00.04 «Физическая химия»; 02.00.06 «Высокомолекулярные соединения»; 02.00.08 «Химия элементоорганических соединений»

Квалификация выпускника
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения
Очная

Нижний Новгород
2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре основной образовательной программы (ООП)

Дисциплина «Химическая термодинамика материалов» относится к числу общепрофессиональных дисциплин, является дисциплиной выбора и изучается на 3 году обучения, в 5 семестре.

Данная дисциплина находится в логической и содержательно-методической взаимосвязи с курсами физической химии, неорганической химии, органической химии, спецкурса по избранным главам химической термодинамики, спецкурса по химии твердого тела.

Для успешного освоения дисциплины аспирант должен:

- знать теоретические основы построения и анализа фазовых диаграмм однокомпонентных и многокомпонентных систем;
- владеть практическими навыками построения модельных фазовых диаграмм и методов определения избыточных функций смещения;
- проводить самостоятельное описание фазовых поверхностей и их физико-химических свойств.

Изучение дисциплины «Химическая термодинамика материалов» как предшествующей составляет основу дальнейшей подготовки аспиранта к сдаче кандидатского экзамена по специальности, а также сформирует общие фундаментальные представления о методах построения и физико-химического анализа фазовых диаграмм однокомпонентных и многокомпонентных систем.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ООП (компетенциями выпускников)

Таблица 1

Планируемые результаты обучения по дисциплине

Код формируемой компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций
ОПК-1 завершающий	З1 Знать: современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности. У1 Уметь: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования. В1 Владеть: навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований. В2 Владеть: навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов. В3 Владеть: навыками представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности.
ПК-1 завершающий	З1 Знать: перспективы и проблемы развития химии; фундаментальные основы химии, а также наук о материалах. З2 Знать: приоритетные направления научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития науки,

	<p>технологий и техники в Российской Федерации.</p> <p><i>У1 Уметь:</i> прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной тем.</p> <p><i>У2 Уметь:</i> проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки.</p> <p><i>В1 Владеть:</i> навыками организации самостоятельной научно-исследовательской работы в научно-исследовательской организации.</p> <p><i>В2 Владеть:</i> навыками взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях.</p>
--	---

3. Структура и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, всего 72 часа, из которых 18 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов занятия семинарского типа), 54 часа составляет самостоятельная работа обучающегося.

Таблица 2

Структура дисциплины

Наименование раздела дисциплины	Всего, часов	В том числе					Самостоятельная работа обучающегося, часов
		Контактная работа, часов					
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Консультации	Всего	
Основы теории открытых и закрытых систем	4	-	4	-	-	4	12
Бинарные растворы. Термодинамический формализм для бинарных металлических растворов	4	-	4	-	-	4	12
Двойные фазовые диаграммы. Многокомпонентные растворы и фазовые диаграммы	3	-	3	-	-	3	9
Поверхности и поверхностное натяжение. Адсорбция	3	-	3	-	-	3	9
Статистические модели металлических растворов замещения и растворов внедрения	4	-	4	-	-	4	12
Аттестация по дисциплине: зачет							
Итого	72	-	18	-	-	18	54

Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Форма проведения занятия	Форма текущего контроля*
1.	Основы теории открытых и закрытых систем	<p>Фундаментальное уравнение Гиббса. Химический потенциал. Фазовые равновесия и физические превращения; особенности термодинамического описания. Фаза – строгий термодинамический подход. Фазовые переходы индивидуальных веществ: концепции и классификации. Феноменологическая классификация Эренфеста, классификация Мак-Каллафа. Теории фазовых переходов I рода. λ-переходы; H- и G-переходы. Фазовые диаграммы индивидуальных веществ (воды, углерода, фуллерена C₆₀). Полиморфизм: энантиотропия, моноотропия.</p>	Семинары, самостоятельная работа обучающегося	Опрос
2.	Бинарные растворы. Термодинамический формализм для бинарных металлических растворов	<p>Физико-химический анализ фазовых диаграмм двухкомпонентных систем. Системы с ограниченной взаимной растворимостью компонентов в твердой фазе. Системы, образующие</p>	Семинары, самостоятельная работа обучающегося	Опрос

		химические соединения и твердые растворы. Сплавы металлов. Интерметаллические соединения. Соответствующие фазовые диаграммы		
3.	Двойные фазовые диаграммы. Многокомпонентные растворы и фазовые диаграммы	Использование полиномов для выражения концентрационных зависимостей термодинамических функций. Расчет многокомпонентных фазовых диаграмм. Треугольник Гиббса и Розебома. Объемная диаграмма состояния, способы построения и методы анализа. Ограниченная взаимная растворимость трех жидкостей.	Семинары, самостоятельная работа обучающегося	Опрос
4.	Поверхности и поверхностное натяжение. Адсорбция	Характерные величины межфазного натяжения. Поверхностные избыточные характеристики и положение поверхности раздела. Модель центральных атомов. Адсорбция в многокомпонентных растворах	Семинары, самостоятельная работа обучающегося	Опрос
5.	Статистические модели металлических растворов замещения и растворов внедрения	Метод ячеек в статистической термодинамике жидкостей. Статистическое описание идеальных и неидеальных растворов (без вывода). Точечные дефекты кристаллических решеток. Вакансии. Междоузельные частицы. Равновесные и неравновесные дефекты решеток. Модель центральных атомов для	Семинары, самостоятельная работа обучающегося	Опрос

		бинарного раствора внедрения. Модель центральных атомов для многокомпонентного раствора внедрения.		
--	--	--	--	--

4. Образовательные технологии

Для достижения планируемых результатов обучения, в дисциплине используются различные образовательные технологии:

информационно-развивающие технологии (самостоятельное изучение литературы, применение новых информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая использование технических и электронных средств информации);

деятельностные практико-ориентированные технологии (анализ, сравнение методов проведения химических и физико-химических исследований, выбор метода, в зависимости от объекта исследования в конкретной ситуации и его практическая реализация);

развивающие проблемно-ориентированные технологии (учебные дискуссии, коллективная мыслительная деятельность, решение задач повышенной сложности).

5. Формы организации и контроля самостоятельной работы обучающихся

Целью самостоятельной работы является овладение навыками работы с литературой (в читальном зале библиотеки, с доступом к ресурсам Интернет), более углубленное изучение отдельных разделов дисциплины при выполнении индивидуальных заданий. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия.

Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме индивидуальных заданий.

Итоговый контроль проводится в виде зачета.

Контрольные вопросы к зачету

1. Устойчивость фаз в однокомпонентных системах.
2. Условия равновесия в гетерогенной системе.
3. Случай одновременно протекающих реакций.
4. Термодинамика некоторых металлургических равновесий.
5. Термодинамические функции смешения.

6. Решение уравнения Гиббса – Дюгема.
7. Использование полиномов для выражения концентрационных зависимостей термодинамических функций.
8. Координаты состава и стандартные состояния при изменении активности.
9. Общая характеристика фазовых диаграмм.
10. Расчет фазовых диаграмм.
11. Тройные и четырехфазные равновесия.
12. Расчет многокомпонентных фазовых диаграмм.
13. Равновесная форма кристалла. Диаграммы Вульфа.
14. Характерные величины межфазного натяжения.
15. Поверхностные избыточные характеристики и положение поверхности раздела.
16. Адсорбция в многокомпонентных растворах.
17. Модель центральных атомов.
18. Многокомпонентные растворы.
19. Модель центральных атомов для бинарного раствора внедрения.
20. Модель центральных атомов для многокомпонентного раствора внедрения.

6. Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине

6.1. Перечень компетенций выпускников образовательной программы с указанием результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы их формирования

Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования приведен в приложении 1.

6.2. Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине. Описание шкал оценивания

Уровень освоения учебной дисциплины обучающимися определяется следующими оценками: «зачтено», «не зачтено».

Оценка «зачтено» предполагает:

- хорошее знание основных терминов и понятий курса;
- последовательное изложение материала;
- умение формулировать некоторые обобщения по теме вопросов;
- достаточно полные ответы на вопросы при сдаче зачета;
- умение использовать фундаментальные понятия из базовых естественнонаучных и общепрофессиональных дисциплин при ответе на зачете.

Оценка «не зачтено» предполагает:

- неудовлетворительное знание основных терминов и понятий курса;
- отсутствие логики и последовательности в изложении материала;
- неумение формулировать отдельные выводы и обобщения по теме вопросов;
- неумение использовать фундаментальные понятия из базовых естественнонаучных и общепрофессиональных дисциплин при ответах на зачете.

6.3. Примеры типовых контрольных заданий или иных материалов, необходимых для оценки результатов обучения, характеризующих сформированность компетенций.

Уровни освоения дисциплины оцениваются согласно требованиям, изложенным в паспорте каждой из указанных компетенций, где указаны критерии оценивания результатов обучения и Планируемые результаты обучения.

Контрольные вопросы:

1. Устойчивость фаз в однокомпонентных системах (ПК-1).
2. Условия равновесия в гетерогенной системе (ПК-1).
3. Случай одновременно протекающих реакций (ПК-1).
4. Термодинамика некоторых металлургических равновесий (ПК-1).
5. Термодинамические функции смешения (ПК-1).
6. Решение уравнения Гиббса – Дюгема (ПК-1).
7. Использование полиномов для выражения концентрационных зависимостей термодинамических функций (ОПК-1).
8. Координаты состава и стандартные состояния при изменении активности (ПК-1).
9. Общая характеристика фазовых диаграмм (ОПК-1).
10. Расчет фазовых диаграмм (ОПК-1).
11. Тройные и четырехфазные равновесия (ОПК-1).
12. Расчет многокомпонентных фазовых диаграмм (ОПК-1).
13. Равновесная форма кристалла. Диаграммы Вульфа (ПК-1).
14. Характерные величины межфазного натяжения (ОПК-1).
15. Поверхностные избыточные характеристики и положение поверхности раздела (ПК-1).
16. Адсорбция в многокомпонентных растворах (ОПК-1).
17. Модель центральных атомов (ПК-1).
18. Многокомпонентные растворы (ПК-1).
19. Модель центральных атомов для бинарного раствора внедрения (ПК-1).
20. Модель центральных атомов для многокомпонентного раствора внедрения (ПК-1).

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

а) основная литература:

1. Бажин Н.М., Пармон В.Н. Начала физической химии. – М.: НИЦ ИНФРА-М, 2015. – 332 с.
3. Карякин Н.В. Основы химической термодинамики. – М.: Академия, 2003. – 462 с.
3. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. – М.: Химия, 1975. – 583 с.

б) дополнительная литература:

1. Русанов А.И. Лекции по термодинамике поверхностей. – СПб.: Лань, 2013. – 240 с.
2. Даниэльс Ф., Олберти Р.А. Физическая химия. – М.: Мир, 1978. – 645 с.
3. Воронин Г.Ф. Основы термодинамики. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 191 с.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. <http://webbook.nist.gov>;
2. <http://www.chem.msu.ru>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

- помещения для проведения занятий: лекционного типа, семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования и помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ННГУ;
- материально-техническое обеспечение, необходимое для реализации дисциплины, включая лабораторное оборудование;
- лицензионное программное обеспечение: *Windows, Microsoft Office*

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (уровень подготовки кадров высшей квалификации).

Автор

Д.х.н., доцент _____Маркин А.В.

Рецензент _____Князев А.В.

Заведующий кафедрой физической химии

химического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского _____Маркин А.В.

Программа рекомендована на заседании кафедры физической химии от «__» _____ 2021 года, протокол № ____.

Программа одобрена на заседании Методической комиссии химического факультета от 27 августа 2021, протокол № 1.

Карты компетенций, в формировании которой участвует дисциплина

Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения				
	1	2	3	4	5
ОПК 1					
ЗНАТЬ: современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	В целом успешные, но не систематические представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	Сформированные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности
УМЕТЬ: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Фрагментарное использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но не систематическое использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	Сформированное умение выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи
ВЛАДЕТЬ: навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	В целом успешное, но не систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	Успешное и систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации

ВЛАДЕТЬ: навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	В целом успешное, но не систематическое применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	Успешное и систематическое применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов
ВЛАДЕТЬ: навыками представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	В целом успешное, но не систематическое применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	Успешное и систематическое применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности
ПК 1					
ЗНАТЬ: перспективы и проблемы развития химии; фундаментальные основы химии, а также наук о материалах	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах	Неполные знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах	Сформулированные, но содержащие отдельные пробелы знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах	Полные и систематические знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах
ЗНАТЬ: приоритетные направления научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития науки, технологий	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития	Неполные знания о знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития	Сформулированные, но содержащие отдельные проблемы знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также	Полные и систематические знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также приоритетные

и техники в Российской Федерации		науки, технологий и техники в Российской Федерации	науки, технологий и техники в Российской Федерации	приоритетные направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации	направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации
УМЕТЬ: прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	Отсутствие умений	Частично освоенное умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	В целом успешное, но не систематическое умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	Успешное и систематическое умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме
УМЕТЬ: проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	Отсутствие умений	Частично освоенное умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	В целом успешное, но не систематическое умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	Успешное и систематическое умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки
ВЛАДЕТЬ: навыками организации самостоятельной научно-исследовательской работы в научно-	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков организации самостоятельной научно-исследовательской	В целом успешное, но не систематическое применение навыков организации самостоятельной научно-	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы применение навыков организации самостоятельной научно-	В целом успешное и систематическое применение навыков организации самостоятельной научно-исследовательской работы

исследовательской организации		работы в научно-исследовательской организации	исследовательской работы в научно-исследовательской организации	исследовательской работы в научно-исследовательской организации	в научно-исследовательской организации
ВЛАДЕТЬ: навыками взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	В целом успешное, но не систематическое применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	В целом успешное и систематическое применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях