

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
« 16 » июня 2021 г. № 8

**Рабочая программа дисциплины
ТЕРМОДИНАМИКА МАТЕРИАЛОВ**

Уровень высшего образования

Специалитет

Направление подготовки / специальность

04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Направленность образовательной программы

Органическая химия

Форма обучения

Очная

Нижегород
2021 год

Лист актуализации

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

4 июня 2021 г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2021-2022 учебном году на заседании кафедры физической химии.

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20__ -20__ учебном году на заседании кафедры _____

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20__ -20__ учебном году на заседании кафедры _____

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20__ -20__ учебном году на заседании кафедры _____

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

1. Место и цели дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Термодинамика материалов» относится к вариативной части Блока 1 ОПОП по направлению подготовки 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия (Б1.В.03.ДВ.05.02), является дисциплиной по выбору для освоения студентами очной формы обучения, специализирующимися по кафедре физической химии, на пятом году обучения в 9 семестре.

Для освоения дисциплины «Термодинамика материалов» обучающиеся используют знания, умения и виды деятельности, сформированные в процессе изучения базовых дисциплин «Физическая химия», «Физика», «Математика».

Цели и задачи освоения дисциплины «Термодинамика материалов»

Целью освоения дисциплины «Термодинамика материалов» является углубленное изучение термодинамики изолированных и открытых систем, теорий бинарных и многокомпонентных растворов, фазовых диаграмм; освоение термодинамической теории химических реакций, термодинамики поверхностных явлений; изучение общих принципов термодинамики в приложении к многокомпонентным системам (растворы, керамики, полимеры, металлы и сплавы).

Учебные задачи курса направлены на освоение студентами:

- фундаментальных законов химической термодинамики и их приложений к расчету фазовых равновесий;
- общих принципов термодинамики в приложении к многокомпонентным системам (растворам, керамикам, полимерам, металлам и сплавам);
- экспериментальных основ термодинамики фазовых равновесий и поверхностных явлений;
- методов построения и физико-химического анализа фазовых диаграмм однокомпонентных и многокомпонентных систем.

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

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции*	Результаты обучения по дисциплине**	
ПК-1-н. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области органической химии, и/или смежных с химией науках	ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	З1: Знать теоретические основы термодинамического описания и анализа фазовых диаграмм однокомпонентных и многокомпонентных систем. У1: Уметь использовать фундаментальные положения и законы химической термодинамики для решения расчетных и	ФОС «Термодинамика материалов»

		качественных задач. <i>В1: Владеть</i> навыками построения и физико-химического анализа фазовых диаграмм однокомпонентных и многокомпонентных систем.	
ПК-2-н. Способен проводить информационные исследования в области органической химии и/или смежных с химией науках	ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в информационных базах данных ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты поиска по тематике проекта в области органической химии и/или смежных с химией науках	<i>З1: Знать</i> основные теории термодинамики фазовых и межфазных равновесий, а также основные принципы термодинамического описания фазовых диаграмм однокомпонентных и многокомпонентных систем. <i>У1: Уметь</i> применять аппарат равновесной химической термодинамики для практических целей современного материаловедения. <i>В1: Владеть</i> навыками построения равновесных фазовых диаграмм по экспериментальным данным.	ФОС «Термодинамика материалов»
ПК-3-н. Способен на основе критического анализа результатов НИР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области органической химии и/или смежных с химией науках	ПК-3-н-1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными ПК-3-н-2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	<i>З1: Знать</i> калориметрические методы исследования фазовых переходов индивидуальных веществ и многокомпонентных систем. <i>У1: Уметь</i> интерпретировать ДСК-кривые и кривые термического анализа с целью описания фазового состояния индивидуальных веществ и многокомпонентных систем. <i>В1: Владеть</i> навыками физико-химического анализа фазовых диаграмм однокомпонентных и многокомпонентных систем.	ФОС «Термодинамика материалов»

<p>ПК-1-о. Способен организовывать работу коллектива по решению задач НИР в области органической химии, готовить нормативную и отчетную документацию.</p>	<p>ПК-1-о-1. Планирует и организует работу коллектива в рамках научных и научно-технических проектов</p> <p>ПК-1-о-2. Осуществляет оперативный контроль за выполнением работ и состоянием рабочих мест</p> <p>ПК-1-о-3. Анализирует результаты деятельности коллектива и вносит предложения по ее совершенствованию</p> <p>ПК-1-о-4. Разрабатывает, внедряет и осуществляет меры контроля за соблюдением подчиненными работниками производственной дисциплины, выполнением трудовых функций, регламентов, эксплуатационных инструкций</p> <p>ПК-1-о-5. Организует обучение подчиненных работников безопасным приемам и методам труда</p>	<p><i>З1: Знать</i> основные направления применения термодинамических характеристик и функций для создания перспективных материалов с заданным комплексом свойств.</p> <p><i>У1: Уметь</i> планировать и организовывать работу по оформлению отчетов НИР по фундаментальному комплексному термодинамическому исследованию материалов.</p> <p><i>В1: Владеть</i> навыками организации и планирования работ по экспериментальному и теоретическому исследованию фазовых диаграмм, представлению полученных результатов в виде отчетной документации.</p>	<p>ФОС «Термодинамика материалов»</p>

Окончательное завершение формирования компетенций, предусмотренных в рамках данной дисциплины, происходит при прохождении производственных практик и выполнения ВКР.

3. Структура и содержание дисциплины «Термодинамика материалов»

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная форма обучения
Общая трудоемкость	9 ЗЕТ
Часов по учебному плану	324
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	64
- занятия семинарского типа	96
- лабораторные занятия	96
-КСИРФ	2
самостоятельная работа	30
Промежуточная аттестация – экзамен	36

3.2. Структура дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе				
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них				Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Всего	
Раздел 1. Основы теории открытых и закрытых систем	18	12	–	–	12	6
Раздел 2. Бинарные растворы. Термодинамический формализм для бинарных металлических растворов	66	12	24	24	60	6
Раздел 3. Двойные фазовые диаграммы. Многокомпонентные растворы и фазовые диаграммы	70	16	24	24	64	6

Раздел 4. Поверхности и поверхностное натяжение. Адсорбция	66	12	24	24	60	6
Раздел 5. Статистические модели металлических растворов замещения и растворов внедрения	66	12	24	24	60	6
Контроль самостоятельной работы	2					
Промежуточная аттестация – экзамен	36					
Итого	324	64	96	96		30

Промежуточный контроль осуществляется при проведении экзамена.

3.3. Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Основы теории открытых и закрытых систем

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 МакКаллафа. Теории фазовых переходов I рода. λ -переходы; H- и G-переходы. Фазовые диаграммы индивидуальных веществ (воды, углерода, фуллерена C₆₀). Полиморфизм: энантиотропия, монотропия.

Раздел 2. Бинарные растворы. Термодинамический формализм для бинарных металлических растворов

Физико-химический анализ фазовых диаграмм двухкомпонентных систем. Системы с ограниченной взаимной растворимостью компонентов в твердой фазе. Системы, образующие химические соединения и твердые растворы. Сплавы металлов. Интерметаллические соединения. Соответствующие фазовые диаграммы.

Раздел 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.

Раздел 4. Поверхности и поверхностное натяжение. Адсорбция

Характерные величины межфазного натяжения. Поверхностные избыточные характеристики и положение поверхности раздела. Модель центральных атомов. Адсорбция в многокомпонентных растворах.

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

3.4. Лабораторный практикум

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ
1	2	Изучение фазовых равновесий в двухкомпонентных системах низкотемпературных органических веществ
2	1	Исследование полиморфизма в органических кристаллах
3	1	Возможности ДСК при изучении полиморфизма в фармакологических субстанциях

В соответствии с рабочей программой и тематическим планом изучение дисциплины проходит в виде аудиторной и самостоятельной работы студентов. Учебный процесс в аудитории осуществляется в форме лекций и практических занятий.

Рекомендуемые образовательные технологии: рейтинговая технология, технология интегративного, проблемного, инновационного, личностно-ориентированного, дифференцированного, индивидуального, развивающего обучения и гуманистического образования. Предусматривается чтение части лекций с использованием мультимедийных средств обучения.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа студентов включает работу в читальном зале библиотеки, в учебных кабинетах (лабораториях) и в домашних условиях, с доступом к ресурсам Интернет для подготовки к устному опросу.

К форме текущего контроля успеваемости дисциплины относятся экзамен.

5. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю), включающий

5.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Промежуточный контроль качества усвоения студентами содержания дисциплины проводится в виде экзамена, на котором определяются:

- уровень усвоения студентами основного учебного материала по дисциплине;

- уровень понимания студентами изученного материала;
- способности студентов использовать полученные знания для решения конкретных задач.

Экзамен проводится в устной форме в виде ответа обучающегося на экзаменационный билет, включающий 2 теоретических вопроса, на которые студент должен дать обстоятельный ответ.

Для проведения промежуточного контроля сформированности компетенции используются: ответ по билету на экзамене.

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	Шкала оценивания сформированности компетенций						
	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	Не зачтено		зачтено				
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок.	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько незначительных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений . Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки.	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания но не в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи . Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными незначительными недочетами, выполнены все задания в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценки при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	Превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно»
	Отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «отлично»
	Очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «очень хорошо»
	Хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «хорошо»
	Удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	Неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно», ни одна из компетенций не сформирована на уровне «плохо»
	Плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения.

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-1-н:

1. Термодинамика некоторых металлургических равновесий.
2. Термодинамические функции смещения.
3. Использование полиномов для выражения концентрационных зависимостей термодинамических функций.
4. Поверхностные избыточные характеристики и положение поверхности раздела.
5. Устойчивость фаз в однокомпонентных системах.
6. Общая термодинамическая характеристика фазовых диаграмм.
7. Условия равновесия в гетерогенной системе.
8. Многокомпонентные растворы.
9. Полиморфизм: энантиотропия, монотропия.

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-2-н:

1. Случай одновременно протекающих реакций.
2. Координаты состава и стандартные состояния при изменении активности.
3. Расчет однокомпонентных фазовых диаграмм.
4. Расчет многокомпонентных фазовых диаграмм.
5. Решение уравнения Гиббса-Дюгема.
6. Равновесная форма кристалла. Диаграммы Вульфа.
7. Характерные величины межфазного натяжения.

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-3-н:

1. Модель центральных атомов.
2. Модель центральных атомов для бинарного раствора внедрения.
3. Модель центральных атомов для многокомпонентного раствора внедрения.
4. Адсорбция в многокомпонентных растворах.
5. Полиморфизм в системах пептидов и аминокислот.

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-1-о:

1. Фазовая диаграмма фуллерена C_{60} .
2. Тройные фазовые равновесия.
3. Четырехфазные равновесия.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Теоретическая подготовка к практическим занятиям и промежуточной аттестации может осуществляться по следующим литературным источникам:

6.1. Основная литература

1. Еремин, В.В. Основы общей и физической химии [Электронный ресурс]: Учебное пособие / В.В. Еремин, А.Я. Борщевский. – Долгопрудный: Интеллект, 2012. – 848 с. Режим доступа: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=365086>.
2. Борщевский, А.Я. Физическая химия. Том 1. Общая и химическая термодинамика [Электронный ресурс]: Учебник / А.Я. Борщевский. – М.: ИНФРА-М, 2017. – 606 с. Режим доступа: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=543133>.
3. Карякин, Н.В. Основы химической термодинамики [Текст]: Учебное пособие / Н.В. Карякин. – М.: Академия, 2003. – 462 с.
4. Пригожин, И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур [Текст]: Учебник / И. Пригожин, Д. Кондепуди. – М.: Мир, 2002. – 461 с.
5. Эткинс, П. Физическая химия [Текст]: Учебник / П. Эткинс, Дж. де Паула. – М.: Мир, 2007. – 494 с.

6.2. Дополнительная литература

1. Путилов, К.А. Термодинамика [Текст]: Учебное пособие / К.А. Путилов. – М.: Наука, 1971. – 375 с.
2. Сталл, Д. Химическая термодинамика органических соединений [Текст]: Учебное пособие / Д. Сталл, Э. Вестрам, Г. Зинке. – М.: Мир, 1971. – 807 с.

6.3. Рекомендуемая литература

1. Люпис, К. Химическая термодинамика материалов [Текст]: Монография / К. Люпис. – М.: Металлургия, 1989. – 503 с.
2. Русанов, А.И. Фазовые равновесия и поверхностные явления [Текст]: Монография / А.И. Русанов. – Л.: Химия, 1967. – 388 с.
3. Сторонкин, А.В. Термодинамика гетерогенных систем [Текст]: Монография / А.В. Сторонкин. – Л.: ЛГУ, 1967. – 447 с.
4. Жуков, А.А. Геометрическая термодинамика сплавов железа [Текст]: Учебное пособие / А.А. Жуков. – М.: Металлургия, 1979. – 232 с.
5. Лебедев, В.А. Термохимия сплавов редкоземельных и актиноидных элементов [Текст]: Справочное издание / В.А. Лебедев, В.И. Кобер, Л.Ф. Ямщиков. – Челябинск: Металлургия, 1989. – 336 с.

6.4. Интернет-ресурсы

<http://elibrary.ru>.
<http://link.springer.com>.
<http://www.sciencedirect.com>.
<http://pubs.acs.org>.
<http://pubs.rsc.org>.
<http://www.uspkhim.ru>.
<http://webbook.nist.gov>.
<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl>.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе ZNANIUM.COM, доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС ZNANIUM.COM содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства «Лань», доступ к которой также предоставлен студентам. ЭБС Издательства «Лань» включает в себя электронные версии книг издательства «Лань» и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства «Лань» обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Материально-техническое обеспечение лекционных и семинарских занятий: видеопроектор, ноутбук, переносной экран, проектор, доска.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО ННГУ. Приказ ННГУ от 13.05.2020г. № 275-ОД «О введении в действие образовательного стандарта высшего образования – специалитет по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Автор:

доктор химических наук, профессор _____ Маркин А.В.

Рецензент:

доктор химических наук, профессор,

заведующий кафедрой химии твердого тела

химического факультета _____ Сулейманов Е.В.

Заведующий кафедрой физической химии

доктор химических наук, профессор _____ Маркин А.В.