

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева  
Российской академии наук  
(ИМХ РАН)**

УТВЕРЖДАЮ

Директор  
Чл.-корр. РАН



И.Л. Федюшкин

«04» *сентября* 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ  
«ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА»**

Б1.В.ОД.3 «Вариативная часть»; раздел «Обязательные дисциплины» основной профессиональной образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации **04.06.01 Химические науки**

Направленность (профиль) **02.00.04 «Физическая химия»**

Форма обучения **очная**

**Нижний Новгород**

**2015**

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 г. № 869.

Разработчики:

Заведующий лабораторией НССХ, д.х.н. Кетков С.Ю.

Программа принята на заседании ученого совета ИМХ РАН

Протокол № 10 от « 24 » июня 2015 г.

Ученый секретарь, к.х.н.



К.Г. Шальнова

## **1. Цели и задачи освоения дисциплины**

### Цели дисциплины:

Знакомство с основами термодинамики изолированных и открытых систем, теорией бинарных и многокомпонентных растворов, фазовым диаграммам; освоение термодинамической теории химических реакций, термодинамики поверхностных явлений.

### Задачи дисциплины:

- изучение общих принципов термодинамики в приложении к многокомпонентным системам (растворы, керамики, полимеры, металлы и сплавы).

## **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Настоящая дисциплина представляет собой обязательную дисциплину в разделе Вариативная часть основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» по специальности 02.00.04 – *Физическая химия*.

Требования к «входным» знаниям, умениям и готовностям обучающегося, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

- знание теоретических основ построения и анализа фазовых диаграмм однокомпонентных и многокомпонентных систем;
- владение практическими навыками построения модельных фазовых диаграмм и методов определения избыточных функций смешения, описания фазовых поверхностей и их физико-химических свойств.

## **3. Требования к результатам освоения дисциплины**

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

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;

ОПК-1 - способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий;

ПК-1 - углубленное знание теоретических и методологических основ физической химии, умение проводить анализ и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель исследования наиболее актуальных проблем физической химии.

ПК-2 способность ставить и решать инновационные задачи, связанные с разработкой новых химических технологий, изучением свойств веществ с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний, аналитических методов и сложных моделей в условиях неопределенности, умение работать с аппаратурой, выполненной на базе микропроцессорной техники и персональных компьютеров для решения практических задач физической химии;

ПК-3 - умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии элементоорганических и высокомолекулярных соединений;

**Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:**

*Знать:* экспериментальные основы термодинамики фазовых равновесий и поверхностных явлений;

*Уметь:* определять избыточные функции смешения и другие физико-химические параметры;

*Владеть:* методами построения и физико-химического анализа фазовых диаграмм однокомпонентных и многокомпонентных систем;

**4. Структура и содержание дисциплины**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц (144 часов).

Дисциплина изучается в 3 и 4 семестре (2 год обучения). Дисциплина состоит из 5 разделов.

4.1. Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)					Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных				Сам. работа
				Лекц.	Лаб./сем.	Прак.		

Химическая термодинамика	144	72	71	-	-	2	71	Зачет
--------------------------	-----	----	----	---	---	---	----	-------

#### 4.2. Содержание дисциплины

##### 4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы и трудоемкость (в часах)				Самостоят. работа
		Лек.	Лаб./сем.	Прак.	КСР	
1.	Основы теории открытых и закрытых систем	14	-	-	-	14
2.	Бинарные растворы. Термодинамический формализм для бинарных металлических растворов	14	-	-	-	14
3.	Двойные фазовые диаграммы. Многокомпонентные растворы и фазовые диаграммы	14	-	-	-	14
4.	Поверхности и поверхностное натяжение. Адсорбция	14	-	-	1	14
5.	Статистические модели металлических растворов замещения и растворов внедрения	13	-	-	1	15

##### 4.2.2. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий (лекции, семинары и т.д.)
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 Мак-Каллафа. Теории фазовых переходов I рода. $\lambda$ -	Лекции, самостоятельная работа

		переходы; H- и G-переходы. Фазовые диаграммы индивидуальных веществ (воды, углерода, фуллерена C <sub>60</sub> ). Полиморфизм: энантиотропия монотропия.	
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	Лекции, самостоятельная работа
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.	Лекции, самостоятельная работа
4.	Поверхности и поверхностное натяжение. Адсорбция	Характерные величины межфазного натяжения. Поверхностные избыточные характеристики и положение поверхности раздела. Модель центральных атомов. Адсорбция в многокомпонентных растворах	лекции, самостоятельная работа
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	лекции, самостоятельная работа

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

## 5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции, семинары и практические работы.
2. Лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей (слайды подготовлены с помощью программного пакета Microsoft Office PowerPoint) и проекционного оборудования.
3. Проведение практических работ в научной лаборатории, участие обучаемых в научной работе и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

## 6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

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 подготовке к практическим занятиям, лекциям, при выполнении индивидуальных заданий. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций

- а) Выбранная форма контроля знаний: зачет
- б) 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 смещения.
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.

в) критерии оценок выполнения задания:

Зачтено	Знание основного содержания разделов дисциплины, допускаются неточности, нарушения в последовательности изложения материала. Правильное применение теоретических знаний для решения практических задач. Допускаются незначительные ошибки в решении расчетных задач.
Незачтено	Не знает значительной части основного содержания разделов дисциплины. Имеющихся знаний недостаточно для освоения дисциплин последующих курсов. Не может решать простые основные расчетные и качественные задачи.

## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Льюис К. Химическая термодинамика материалов. М.: Metallurgy, 1989.
2. Эткинс П.. Физическая химия. Т. 1. М.: Мир. 1980. 580 с.
3. Пригожин И., Кондепуди Д.. Современная термодинамика. М.: Мир. 2002. 461 с.4.
4. Сталл Д., Вестрам Э., Зинке Г.. Химическая термодинамика органических соединений. М.: Мир. 1971. 580 с.
5. Карякин Н.В. Основы химической термодинамики. М.: Академия. 2003.

б) дополнительная литература:

1. Русанов А.И. Фазовые равновесия и поверхностные явления. Л.: Химия, 1967.
2. Сторожин Т.А. Термодинамика гетерогенных систем. Л.: ЛГУ, 1967.
3. Жуков А.А. Геометрическая термодинамика сплавов железа. М.: Metallurgy, 1979.
4. Лебедев В.А., Кобер В.И., Ямшилов Л.Ф. Термохимия сплавов редкоземельных и актиноидных металлов (Справочник). Челябинск: Metallurgy, 1989.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

<http://webbook.nist.gov>;

<http://www.chem.msu.ru>

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины



Современный компьютер, мультимедиапроектор, экран, доска, специализированный пакет программ.