

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
общей и неорганической химии

наименование кафедры, отвечающей за реализацию дисциплины

Семенов В. Н.



подпись, расшифровка подписи

29.04.2022г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.01.02 Равновесие и устойчивость термодинамических систем

Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация: Физическая химия

3. Квалификация выпускника: Магистр

4. Форма обучения: Очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: общей и неорганической химии

6. Составители программы: к. х. н. Наумов Александр Владимирович

(ФИО, ученая степень, ученое звание)

7. Рекомендована:

Научно-методическим советом химического факультета 19.04.2022,
протокол № 3

(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола,

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2023/2023

Семестр(ы): 2

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины являются:

освещение современного состояния теории термодинамической устойчивости применительно к задачам химического и фазового равновесия

Задачи учебной дисциплины:

рассмотрение термодинамической теории равновесия и устойчивости; изучение элементарных топологических методов в теории фазовых равновесий

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Б1.В.ДВ.01.01

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПКВ-1	Способен проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности.		ПКВ-1.1 ПКВ-1.2	<p>Знать: Как проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности.</p> <p>Уметь: Проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности.</p> <p>Владеть: Сбором, систематизацией и критическим анализом научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности.</p>
ПКВ-2	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии.		ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<p>Знать: Как планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии.</p> <p>Уметь: Планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии.</p> <p>Владеть: Планированием работы и выбором адекватных методов решения научно-исследовательских задач в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии.</p>
ПКВ-3	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ		ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	<p>Знать: Как на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии.</p> <p>Уметь: На основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать</p>

в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии.			перспективы их практического применения и продолжения работ в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии. Владеть: На основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оцениванием перспектив их практического применения и продолжения работ в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии.
---------------------------------------------------------------------------------------	--	--	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.(в соответствии с учебным планом) — 4/144.

Форма промежуточной аттестации(зачет/экзамен) зачет с оценкой

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		№ семестра	№ семестра	...
Аудиторные занятия		2		
в том числе:	лекции	18		
	практические			
	лабораторные	38		
Самостоятельная работа		88		
в том числе: курсовая работа (проект)				
Форма промежуточной аттестации (экзамен – __ час.)				
Итого:		144		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	Аналитический аппарат классической термодинамики	Понятие термодинамической системы. Основные соотношения. Постулат аддитивности и уравнения Гиббса–Дюгема. Преобразования Лежандра. Характеристические функции	
1.2	Аппарат парциальных молярных функций	Отношение эквивалентности. Проективные модели пространства составов. Парциальные молярные функции. Теорема о функции на симплексе	
1.3	Общие условия равновесия	Понятие термодинамического равновесия. Необходимое и достаточное условие равновесия. Условия экстремума	
1.4	Равновесие и устойчивость систем со стехиометрическими связями	Стехиометрия химических реакций как алгебра свободного модуля. Стехиометрическое многообразие. Необходимое условие химического равновесия. Устойчивость химического равновесия. Парциальные молярные функции систем со стехиометрическими связями. Проблема полноты базиса компонентов	
1.5	Равновесие и устойчивость гетерогенных систем	Необходимое условие гетерогенного равновесия. Достаточное условие равновесия, условия устойчивости (I рода). Свойства термодинамического потенциала на	

		пространстве составов. Стабильность и метастабильность (устойчивость II рода). Понятие фазы по Гиббсу	
1.6	Основная задача геометрической термодинамики	Пространство состояний, топология диаграммы состояний, слой диаграммы состояний. Свойства областей гомогенности	
2. Практические занятия			
3. Лабораторные занятия			
3.1	Аналитический аппарат классической термодинамики	Вывод аналитических соотношений термодинамики, использование Первого и Второго начал. Применение преобразований Лежандра. Исследование характеристических соотношений	
3.2	Аппарат парциальных молярных функций	Преобразование пространства составов, работа с многомерными симплексами. Вычисление парциальных молярных функций	
3.4	Равновесие и устойчивость систем со стехиометрическими связями	Решение прямой задачи химического равновесия. Вычисление активностей компонентов в рамках модели ассоциированных растворов	
3.5	Равновесие и устойчивость гетерогенных систем	Моделирование многообразий существования. Многообразия в однокомпонентных системах. Равновесие конденсированной фазы с паром. Равновесие растворов. Бинодальный распад раствора	
3.6	Основная задача геометрической термодинамики	Исследование диаграмм состояний двух- и трехкомпонентных систем	

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Аналитический аппарат классической термодинамики	2		6	14	22
2	Аппарат парциальных молярных функций	2		6	14	22
3	Общие условия равновесия	3		2	14	19
4	Равновесие и устойчивость систем со стехиометрическими связями	4		8	16	28
5	Равновесие и устойчивость гетерогенных систем	4		8	14	26
6	Основная задача геометрической термодинамики	3		8	16	27
	Итого:	18		38	88	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Максимальный доступ к мировой литературе (свободный доступ к ведущим зарубежным физическим и физико-химическим источникам информации). Использование методических разработок кафедр.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Воронин Г. Ф. Основы термодинамики / Г. Ф. Воронин. – М. : Изд-во Моск. ун-та, 1987. – 192 с.
2	Ландау Л. Д. Теоретическая физика. В 10 т. Т. V. Статистическая физика. Ч. 1 / Л. Д. Ландау, Е. М.

	Лифшиц. – М. : Наука, 1976. – 524 с.
3	Глазов В. М. Химическая термодинамика и фазовые равновесия / В. М. Глазов, Л. М. Павлова. – М. : Металлургия, 1988. – 601 с.
4	Донде, Де Т. Термодинамическая теория сродства (книга принципов) / Т. де Донде, П. ван Риссельберг; пер. с англ. – М. : Металлургия, 1984. – 136 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
1	Пригожин И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур / И. Пригожин, Д. Кондепуди; пер. с англ. – М. : Мир, 2002. – 461 с.
2	Дайсон Ф. Устойчивость и фазовые переходы / Ф. Дайсон, Э. Монтролл, М. Кац, М. Фишер; пер. с англ. – М. : Мир, 1973. – 374 с.
3	Мюнстер А. Химическая термодинамика / А. Мюнстер; пер. с нем. – М. : Мир, 1971. – 368 с.
4	Леонтович М. А. Введение в термодинамику. Статистическая физика / М. А. Леонтович. – М. : Наука, 1983. – 416 с.
5	Козлов В. В. Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре / М., Ижевск : Ин-т компьютерных исследований, 2002. – 320 с.
6	Математические задачи химической термодинамики / Отв. ред. Г. А. Коковин. – Новосибирск : Наука, Сиб. отд., 1985. – 243 с.
7	Наумов А. В. Элементы физико-химического анализа / А. В. Наумов, В. Н. Семенов. – Воронеж : Изд. дом Воронежск. ун-та, 2016. – 139 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
1	lib.vsu.ru
2	http://www.elibrary.ru – Научная электронная библиотека
3	http://www.en.edu.ru – Естественнонаучный образовательный портал

* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы, онлайн-курсы, ЭУМК

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных), курсовых работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Пункты 1 – 4 а), пункты 1 – 7 б)

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

При реализации дисциплины проводятся лекции (вводная и по разделам дисциплины), семинарские занятия (проблемные, дискуссионные и т.д.), проводится текущая аттестация, самостоятельная работа по дисциплине или отдельным ее разделам и т.д.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины: Мультимедийное оборудование для чтения лекций с использованием электронных презентаций.

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1	Аналитический аппарат классической термодинамики	ПКВ-1 ПКВ-2 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1	устный опрос

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
			ПКВ-2.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	
2	Аппарат парциальных молярных функций	ПКВ-1 ПКВ-2 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	устный опрос
3	Общие условия равновесия	ПКВ-1 ПКВ-2 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	устный опрос
4	Равновесие и устойчивость систем со стехиометрическими связями	ПКВ-1 ПКВ-2 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	устный опрос
5	Равновесие и устойчивость гетерогенных систем	ПКВ-1 ПКВ-2 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	устный опрос
6	Основная задача геометрической термодинамики	ПКВ-1 ПКВ-2 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	устный опрос
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет с оценкой				<i>Перечень вопросов</i>

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Практикоориентированные задания/домашние задания

(наименование оценочного средства текущего контроля успеваемости)

Перечень заданий, тем рефератов, тем презентаций, курсовых, докладов, лабораторных работ требования к представлению портфолио

Формулируются вариативно исходя из разделов дисциплины

Описание технологии проведения

Устный опрос

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Знание основных фактов, совокупность которых дает ответ на зачетный вопрос, с доказательством теорем, выводом уравнений и т.п. и умение иллюстрировать эти факты примерами. Ответ соответствует перечисленным показателям

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к зачету

(наименование оценочного средства текущего контроля успеваемости)

Перечень заданий, тем рефератов, тем презентаций, курсовых, докладов, требования к представлению портфолио, вопросов к экзамену (зачету) и порядок формирования КИМ

1. Понятие термодинамической системы. Состояние системы, пространство состояний. Функция состояния. Термодинамический процесс.
2. Дифференциальные формы теплоты и работы и их свойства. Калорические коэффициенты. Второе начало термодинамики.
3. Первое начало термодинамики. Вычисление калорических коэффициентов в переменных (T, V) и (T, p) . Соотношения Максвелла.
4. Постулат аддитивности. Экстенсивные величины. Неаддитивность электрически заряженных и гравитирующих систем.
5. Обобщенные силы и обобщенные координаты. Термодинамические степени свободы. Фундаментальное уравнение Гиббса. Теорема об однородности внутренней энергии. Теорема Эйлера.
6. Интенсивные величины. Обобщенные силы как интенсивные величины. Уравнения Гиббса – Дюгема. Функциональная зависимость обобщенных сил.
7. Преобразование Лежандра: постановка задачи, преобразование выпуклой функции $\mathbf{R}^m \rightarrow \mathbf{R}$, инволютивность преобразования. Преобразования Ампера.
8. Характеристические функции. Понятие характеристичности, естественные переменные. Построение и свойства характеристических функций. Частичная однородность характеристических функций.
9. Функция Гиббса как характеристическая. Описание систем в термо-баростате. Химический потенциал компонента. Понятие парциальной молярной функции.
10. Состояние термодинамического равновесия. Существование состояния равновесия изолированной системы. Понятие о множестве состояний термодинамической системы. Теорема Гиббса о минимуме энергии.
11. Экстремальные критерии равновесия. Законы сохранения и системы в потенциостате. Характеристические функции как термодинамические потенциалы.
12. Гетерогенное равновесие. Законы сохранения и множество состояний замкнутой гетерогенной системы. Минимизация внутренней энергии методом Лагранжа. Необходимые условия гетерогенного равновесия. Смысл функции Лагранжа и ее связь с преобразованием Лежандра.
13. Понятие фазы термодинамической системы. Постановка задачи о гетерогенном равновесии. Случай частичного равновесия. Случай абсолютно нерастворимого компонента и его критика.
14. Достаточное условие равновесия. Понятие устойчивости равновесия. Условия устойчивости гетерогенного равновесия.
15. Внутренняя устойчивость фазы. Условия внутренней устойчивости. Энергия как однородно-выпуклый функционал. Неравенство Гиббса. Свойства диагональных элементов $\partial^2 U / \partial Q_k^2$ матрицы Гессе.
16. Гомогенные системы с химическими реакциями компонентов. Основной закон стехиометрии как закон сохранения. Стехиометрическое многообразие. Минимизация функции Гиббса на стехиометрическом многообразии. Необходимое условие химического равновесия.
17. Случай абсолютно необратимой реакции и его критика. Устойчивость химического равновесия, условия устойчивости. Принцип Ле Шателье – Брауна.

Описание технологии проведения
Устный опрос

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

Знание основных фактов, совокупность которых дает ответ на вопросы контрольно-измерительного материала, с доказательством теорем, выводом уравнений и т. п. и умение иллюстрировать эти факты примерами. Ответ соответствует в полной мере всем перечисленным показателям – отлично

Знание основных фактов, совокупность которых дает ответ на вопросы контрольно-измерительного материала и умение иллюстрировать эти факты примерами при ошибках или затруднении в доказательстве теорем, выводе уравнений и т. п. Ответ соответствует не полному освоению компетенций – хорошо

Знание основных фактов, совокупность которых дает ответ на вопросы контрольно-измерительного материала в объеме не менее 60 %, без доказательства теорем, вывода уравнений и т. п.; неумение иллюстрировать эти факты примерами. Ответ показывает недостаточное владение компетенциями – удовлетворительно