

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)
проф. Семенов В. Н.
(подпись, расшифровка подписи)
29.04.2022г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.02.01 Термодинамика растворов и соединений переменного состава

(код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом)

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:** 04.03.01 Химия
- 2. Профиль подготовки/специализация:** Теоретическая и экспериментальная химия
- 3. Квалификация выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** общей и неорганической химии
- 6. Составители программы:** Наумов Александр Владимирович, к. х. н.
(ФИО, ученая степень, ученое звание)
- 7. Рекомендована:** Научно-методическим советом химического факультета 19.04.2022,
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)
протокол № 3
(отметки о продлении, вносятся вручную)
- 8. Учебный год:** 2023/2024 **Семестр(ы):** 4

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Целями освоения учебной дисциплины являются:

освоение методов термодинамического моделирования диаграмм состояний двухкомпонентных систем, содержащих растворы и соединения переменного состава.

Задачи учебной дисциплины:

- знакомство с термодинамическими моделями растворов;
- знакомство с методами аналитического и численного расчета многообразий сосуществующих состояний двухкомпонентных систем;
- практическое моделирование диаграмм состояний двухкомпонентных систем;
- знакомство с термодинамикой точечных дефектов твердого тела.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

часть, формируемая участниками образовательных отношений (вариативная) блока Б1, дисциплины по выбору.

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	Обеспечивает сбор научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач	Знать: как обеспечить сбор научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач; Уметь: обеспечивать сбор научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач; Владеть: обеспечением сбора научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач.
		ПКВ-1.2	Составляет аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта	Знать: как составлять аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта; Уметь: составлять аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта; Владеть: составлением аналитического обзора собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта.
ПКВ-2	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области аналитической, физической, неорганической, органической и	ПКВ-2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	Знать: как составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий; Уметь: составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий; Владеть: составлением общего плана исследования и детальных планов отдельных стадий.

	полимерной химии	ПКВ-2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	<p>Знать: как выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов;</p> <p>Уметь: выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов;</p> <p>Владеть: выбором экспериментальных и расчетно-теоретических методов решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.</p>
--	------------------	---------	---	---

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

Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) – зачет

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость		
		Всего	По семестрам	
			4 семестр	семестр
Аудиторные занятия		36	36	
в том числе	лекции	18	18	
	практические	18	18	
	лабораторные			
Самостоятельная работа		108	108	
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	Термодинамические модели растворов	Понятие компонента термодинамической системы. Парциальные молярные функции. Условия Гиббса–Дюгема и Редлиха–Кистера. Химический потенциал. Граничные условия для химического потенциала. Понятие раствора. Стандартные состояния. Идеальные растворы. Отклонения от идеальности, избыточные потенциалы, активности. Регулярные растворы. Представление Ван Лаара. Полиномиальные представления (полиномы Маргулеса). Интегрирование условия Гиббса–Дюгема, числа Маргулеса, матричная форма условия Гиббса–Дюгема. Модель Вильсона. Атермальные растворы, модель Флори. Ассоциированные растворы. Понятие о моделях NRTL, UNIQUAC, ASOG, UNIFAC.	–
1.2	Моделирование диаграмм состояний двухкомпонентных систем	Необходимые условия равновесия. Равновесие в окрестности чистого компонента. Равновесие конденсированной фазы с паром, законы Рауля и Генри. Азеотропия, второй закон Коновалова, правила Вревского. Условия устойчивости. Первый закон Коновалова. Бинодальный распад регулярного раствора.	–

		Области гомогенности, понятие химического соединения. Ликвидус конгруэнтно плавящегося соединения. Равновесия «жидкость – жидкость».	
1.3	Термодинамика точечных дефектов твердого тела	Понятие точечных дефектов. Виды дефектов, разупорядочение по Шоттки и по Френкелю. Механизмы формирования области гомогенности твердофазного соединения. Квазихимические реакции, равновесные концентрации дефектов.	–
2. Практические занятия			
2.1	Термодинамические модели растворов	Интегрирование условия Гиббса–Дюгема в двухкомпонентном случае. Функции смешения и избыточные функции. Свойства совершенных идеальных растворов, вычисление функций смешения и избыточных функций в рамках различных моделей растворов: регулярного раствора, потенциала Ван Лаара, полиномиального представления Маргулеса, потенциала Флори, потенциала Вильсона. Вычисление активностей идеального ассоциированного и регулярного ассоциированного раствора.	–
2.2	Моделирование диаграмм состояний двухкомпонентных систем	Аналитическое вычисление диаграмм состояний эвтектического и перитектического типов в случае идеальных растворов. Строение трехфазной конноды в двухкомпонентной системе. Метод g , x -кривых. Вычисление активностей компонентов исходя из манометрических данных. Построение диаграмм состояний в области равновесия «конденсированная фаза – пар». Исследование бинадальной и спинодальной кривых регулярного раствора. Вычисление диаграммы состояний монотектического типа. Численное решение распада регулярного ассоциированного раствора. Построение ликвидуса конгруэнтно плавящегося соединения.	–
2.3	Термодинамика точечных дефектов твердого тела	Разупорядочение в структурных типах бинарных соединений АВ, АВ ₂ , А ₂ В ₃ . Кристаллографическое описание точечных дефектов. Квазихимические реакции и вычисление равновесных концентраций дефектов.	–
3. Лабораторные занятия			
3.1			

* Заполняется, если отдельные разделы дисциплины изучаются с помощью онлайн-курса. В колонке Примечание необходимо указать название онлайн-курса или ЭУМК. В других случаях в ячейки ставятся прочерки.

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	Термодинамические модели растворов	7	7		36	50
2	Моделирование диаграмм состояний двухкомпонентных систем	7	7		36	50
3	Термодинамика точечных дефектов твердого тела	4	4		36	44
Итого:		18	18		108	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Методические материалы, доступные в локальной сети Университета (сайт библиотеки), включают в себя следующие типы материалов: учебники, учебные пособия, методические указания для студентов, в которых изучаемый материал представлен в систематизированном и структурированном виде, и которые включают в себя необходимые таблицы, схемы и материалы презентаций, с опорой на которые проводится аудиторная работа. Также в локальной сети

размещены методические указания для преподавателя и указания для самопроверки. На протяжении курса студенты по инициативе лектора обсуждают в аудитории наиболее сложные вопросы и детали курса.

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	Сторонкин А. В. Термодинамика гетерогенных систем. Ч. 1, 2 / А. В. Сторонкин. – Л. : Изд-во Ленингр. ун-та, 1967.
2	Глазов В. М. Химическая термодинамика и фазовые равновесия / В. М. Глазов, Л. М. Павлова. – М. : Metallurgia, 1988.
3	Зломанов В. П. P-T-x диаграммы двухкомпонентных систем / В. П. Зломанов. – М. : Изд-во Моск. ун-та, 1980.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4	Вагнер К. Термодинамика сплавов / К. Вагнер. – М. : Metallurgizdat, 1957.
5	Расчет фазовых равновесий в многокомпонентных системах / А. И. Казаков, В. А. Мокрицкий, В. Н. Романенко, Л. Хитова. – М. : Metallurgia, 1987.
6	Аносов В. Я. Основы физико-химического анализа / В. Я. Аносов, М. И. Озерова, Ю. Я. Фиалков. – М. : Наука, 1976.

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

№ п/п	Источник
7	lib.vsu.ru
8	http://www.elibrary.ru – Научная электронная библиотека
9	http://www.en.edu.ru – Естественнонаучный образовательный портал

* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договоры 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) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Пункты 1 – 3 а), пункты 4 – 6 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	Термодинамические модели растворов	ПКВ-1 ПКВ-2	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	Практикоориентированные задания / домашние задания
2	Моделирование диаграмм состояний двухкомпонентных систем	ПКВ-1 ПКВ-2	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	Практикоориентированные задания / домашние задания
3	Термодинамика точечных дефектов твердого тела	ПКВ-1 ПКВ-2	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	Практикоориентированные задания / домашние задания
Промежуточная аттестация форма контроля – <i>зачет</i>				Перечень вопросов

* В графе «ФОС» в обязательном порядке перечисляются оценочные средства текущей и промежуточной аттестаций.

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 компонента термодинамической системы. Парциальные молярные функции.
2. Условия Гиббса–Дюгема и Редлиха–Кистера. Интегрирование условия Гиббса–Дюгема в двухкомпонентном случае.
3. Химический потенциал. Граничные условия для химического потенциала.
4. Понятие раствора. Стандартные состояния. Идеальные растворы. Свойства совершенных идеальных растворов.
5. Отклонения от идеальности, избыточные потенциалы, активности. Функции смешения и избыточные функции.
6. Регулярные растворы. Представление Ван Лаара.
7. Полиномиальные представления (полиномы Маргулеса). Интегрирование условия Гиббса–Дюгема, числа Маргулеса, матричная форма условия Гиббса–Дюгема.
8. Модель Вильсона.
9. Атермальные растворы, модель Флори.
10. Ассоциированные растворы. Вычисление активностей идеального ассоциированного и регулярного ассоциированного раствора.
11. Понятие о моделях NRTL, UNIQUAC, ASOG, UNIFAC.
12. Необходимые условия равновесия.
13. Равновесие в окрестности чистого компонента. Диаграммы состояний эвтектического и перитектического типов в случае идеальных растворов.
14. Метод g , x -кривых.
15. Равновесие конденсированной фазы с паром, законы Рауля и Генри.
16. Вычисление активностей компонентов исходя из манометрических данных.
17. Азеотропия, второй закон Коновалова, правила Вревского.
18. Условия устойчивости. Первый закон Коновалова.
19. Бинодальный распад регулярного раствора.
20. Области гомогенности, понятие химического соединения.
21. Ликвидус конгруэнтно плавящегося соединения. Равновесия «жидкость – жидкость».
22. Понятие точечных дефектов. Виды дефектов, разупорядочение по Шоттки и по Френкелю.
23. Механизмы формирования области гомогенности твердофазного соединения.
24. Разупорядочение в структурных типах бинарных соединений АВ, АВ₂, А₂В₃. Кристаллографическое описание точечных дефектов.
25. Квазихимические реакции, равновесные концентрации дефектов.

Описание технологии проведения

Устный опрос

Требования к выполнению заданий, 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