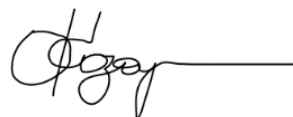


МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

**УТВЕРЖДАЮ**

Заведующий кафедрой  
физической химии



О.А. Козадеров

12.04.2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Б1.В.ДВ.01.02 Компьютерное моделирование электрохимических систем**

1. Код и наименование направления подготовки/специальности: 04.05.01  
Фундаментальная и прикладная химия
2. Профиль подготовки/специализация: Фундаментальная химия в профессиональном образовании
3. Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии
4. Форма обучения: Очная
5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: 1004 физической химии
6. Составители программы: Козадеров Олег Александрович, д.х.н., доцент
7. Рекомендована: НМС химического факультета от 11.04.2024, протокол №4
8. Учебный год: 2024/2025                      Семестр: 5

## 9. Цели и задачи учебной дисциплины

*Целями освоения учебной дисциплины являются:*

*обучение основам компьютерного моделирования свойств основных компонентов электрохимических ячеек, гальванических элементов, химических источников тока, а также электрохимических процессов в объеме и на границе раздела фаз.*

*Задачи учебной дисциплины:*

*дать математическое описание электрохимических систем преобразования энергии (гальванических элементов, аккумуляторов, топливных элементов) и электролизеров, методов решения уравнений, описывающих электрохимические процессы в объеме фаз и на межфазных границах в электрохимических системах с учетом их кинетических закономерностей и свойств входящих в состав системы компонентов (электродов, электролитов), ознакомить с программным обеспечением, позволяющим моделировать различные электрохимические процессы.*

## 10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

**часть, формируемая участниками образовательных отношений (вариативная), дисциплина по выбору**

*(обязательная часть или часть, формируемая участниками образовательных отношений (вариативная) блока Б1, к которой относится дисциплина;*

**При освоении данного курса обучающийся должен уметь дифференцировать и интегрировать элементарные функции, знать специальные интегралы, основы линейной алгебры, дифференциального исчисления, молекулярной физики, физической химии, электрохимии**

*требования к входным знаниям, умениям и навыкам; дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей (при необходимости)*

**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
ПК - 1	Способен проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности	ПК - 1.1	Обеспечивает сбор научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач	Знать: основные источники научно-технических данных, требующихся для моделирования электрохимических систем. Уметь: осуществлять постановку математической задачи для описания электрохимических систем. Владеть: способами поиска информации, необходимой для постановки и решения задач по моделированию электрохимических систем
		ПК - 1.2	Составляет аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта	Знать: основы составления аналитических обзоров Уметь: интерпретировать и обобщать собранную информацию Владеть: способами анализа собранной информации
ПК - 2	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-	ПК - 2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	Знать: основы планирования научного исследования Уметь: использовать на практике правила составления плана исследований Владеть: методами детализации плана исследований

исследовательских задач в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии	ПК - 2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Знать: методы исследования механизма процесса в соответствии с поставленной перед ними проблемой. Уметь: разработать схему расчета и практически провести его с использованием аналитических или численных методов Владеть: способами интерпретации полученных результатов.
--	----------	---	---

**12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. (в соответствии с учебным планом) — 2/72.**

**Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) зачет**

### 13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		4		
Аудиторные занятия	54	54		
в том числе:	лекции	18	18	
	практические	-	-	
	лабораторные	36	36	
Самостоятельная работа	18	18		
в том числе: курсовая работа (проект)	-	-		
Форма промежуточной аттестации		зачет		
Итого:	72	72		

#### 13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
<b>1. Лекции</b>			
1.1	Моделирование равновесных электрохимических систем	Моделирование в электрохимии. Задачи и уровни моделирования в электрохимии. Классификация математических моделей. Математическое моделирование сложного объекта или явления. Этапы математического моделирования. Моделирование равновесных электрохимических систем. Диаграммы состояния системы «металл – вода» (диаграммы Пурбе). Диаграммы распределения кислотно-основных форм.	Электронный университет ВГУ. Образовательный портал. <a href="http://www.edu.vsu.ru">http://www.edu.vsu.ru</a>
1.2	Аналитические методы математического моделирования электрохимических процессов	Моделирование диффузионно-контролируемых электрохимических процессов. Многостадийность электрохимического процесса. Лимитирующая стадия. Стационарная диффузия при катодном осаждении металла. Методы решения: аналитический, компьютерный. Компьютерные пакеты для моделирования физико-химических систем и процессов. Нестационарная диффузия при катодном осаждении металла. Общее решение дифференциального уравнения. Преобразование Лапласа-Карсона. Потенциостатический, гальваностатический и потенциодинамический режимы осаждения. Уравнения концентрационного профиля и хронограмм.	

1.3	Численные методы математического моделирования электрохимических процессов	Метод конечных элементов. Базовый алгоритм моделирования диффузионно-контролируемого процесса в COMSOL Multiphysics. Моделирование электрохимических ячеек. Модель топливного элемента. Расчет рабочего напряжения и кривой мощности топливного элемента.	
<b>2. Лабораторные занятия</b>			
2.1	Моделирование равновесных электрохимических систем	Расчет диаграмм состояния системы «металл – вода» (диаграммы Пурбе). Расчет диаграмм распределения кислотно-основных форм. Расчет диаграмм распределения комплексов металлов.	Электронный университет ВГУ. Образовательный портал. <a href="http://www.edu.vsu.ru">http://www.edu.vsu.ru</a>
2.2	Аналитические методы математического моделирования электрохимических процессов	Моделирование стационарной и нестационарной диффузии при катодном осаждении/ анодном растворении металла в потенциостатическом, гальваностатическом и потенциодинамическом режимах электродной поляризации.	
2.3	Численные методы математического моделирования электрохимических процессов	Метод численного конечно-элементного моделирования. Платформа COMSOL Multiphysics. Базовый алгоритм моделирования диффузионно-контролируемого потенциостатического, гальваностатического, потенциодинамического процессов в COMSOL Multiphysics. Моделирование низко- и высокотемпературного топливного элемента. Расчет рабочего напряжения и кривой мощности топливного элемента.	

*\* 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 (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Моделирование равновесных электрохимических систем	6	-	6	6	18
2	Аналитические методы математического моделирования электрохимических процессов	6	-	15	6	27
3	Численные методы математического моделирования электрохимических процессов	6	-	15	6	27
Итого:		18	-	36	18	72

### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины:

*(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: указание наиболее сложных разделов, работа с конспектами лекций, презентационным материалом, рекомендации по выполнению курсовой работы, по организации самостоятельной работы по дисциплине и др.)*

*Работа с конспектами лекций, презентационным материалом, литературой, указанной в п.15, выполнение лабораторных заданий. Подготовка к промежуточной аттестации. При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ»*

(<https://edu.vsu.ru>) и/или "MOOK ВГУ" (<https://mooc.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (bigbluebutton, Zoom, Discord и др.), электронная почта, мессенджеры и соцсети.

**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	Козадеров О.А. Массоперенос и фазообразование при анодном селективном растворении гомогенных сплавов / О.А. Козадеров, А.В. Введенский. – Воронеж : Научная книга, 2014. – 288 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Диткин В.А. Интегральные преобразования и операционное исчисление / В.А. Диткин, А.П. Прудников. — М. : Наука, 1974.— 542 с.
3	Bard A.J. Electrochemical methods : fundamentals and applications / A. J. Bard, L. R. Faulkner. - Hoboken : John Wiley & Sons, 2001. - 833 p.
4	Галлагер Р. Метод конечных элементов : основы / Р. Галлагер. – М. : Мир, 1984. – 428 с.
5	Розин Л.А. Метод конечных элементов / Л.А. Розин // Соросов-ский образовательный журнал. – 2000. – № 4. – С. 120-127.
6	Трухан С.Н. Компьютерное моделирование процессов и явлений физической химии / С.Н. Трухан, В.С. Деревщиков. – Новосибирск : НИИГУ, 2012. – 75 с.
7	Егоров В.И. Применение ЭВМ для решения задач теплопроводности / В.И. Егоров. – СПб : СПб ГУ ИТМО, 2006. – 77 с.
8	Datta A. An introduction to modeling of transport processes : applications to biomedical systems / A. Datta, V. Rakesh. – Cambridge : Cambridge University Press, 2010. – 503 p.
9	Вознесенский А.С. Компьютерные методы в научных исследованиях. Ч. 2 / А.С. Вознесенский. – М. : МГУ, 2010. – 107 с.
10	Галюс З. Теоретические основы электрохимического анализа. Поляррография, хроновольтамперометрия, хронотенциометрия, метод вращающегося диска / З. Галюс. — М. : Мир, 1974 .— 552 с.
11	Агасян П.К. Основы электрохимических методов анализа : (потенциометрический метод) : [учебное пособие] / П.К. Агасян, Е.Р. Николаева.— М. : Изд-во Московского ун-та, 1986.— 192 с.
12	Лопатин Б.А. Теоретические основы электрохимических методов анализа : учебное пособие для студ. хим. спец. ун-тов / Б.А. Лопатин. — М. : Высшая школа, 1975. — 294 с.
13	Любиев О.Н. Математическое моделирование электрохимических систем : Учебное пособие / О.Н. Любиев. — Новочеркасск : НПИ, 1979. — 84 с.
14	Кошель Н.Д. Материальные процессы в электрохимических аппаратах: Моделирование и расчет / Н.Д. Кошель. — Киев-Донецк : Вища школа, 1986.

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

№ п/п	Ресурс
15	Научная электронная библиотека. — < <a href="http://www.elibrary.ru">http://www.elibrary.ru</a> >
16	Электронный университет ВГУ. Образовательный портал. — < <a href="http://www.moodle.vsu.ru">http://www.moodle.vsu.ru</a> >
17	Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" . — < <a href="http://window.edu.ru">http://window.edu.ru</a> >
18	Информационная система "Университетская библиотека ONLINE" — < <a href="http://biblioclub.ru">http://biblioclub.ru</a> >
19	Электронно-библиотечная система "Издательство "Лань" — < <a href="http://e.lanbook.com">http://e.lanbook.com</a> >
20	Электронная библиотека Воронежского государственного университета. — < <a href="http://www.lib.vsu.ru">http://www.lib.vsu.ru</a> >
21	Официальное электронное издание Химического факультета МГУ в Интернет. - < <a href="http://www.chemnet.ru">http://www.chemnet.ru</a> >
22	Образовательный математический сайт Exponenta.ru. - < <a href="http://www.exponenta.ru">ww.exponenta.ru</a> >

\* 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
23	Компьютерное моделирование электрохимических процессов : учебно-методическое пособие : [для студ. магистратуры, обуч. по направлениям "Физическая химия" и "Электрохимия"] / Воронеж. гос. ун-т .— Воронеж : Научная книга, 2015. Ч. 1: Диффузионный контроль. Хроноамперометрия / сост.: О.А. Козадеров, О.Ю. Дьяконова.— 34 с.
24	Компьютерное моделирование электрохимических процессов : учебно-методическое пособие : [для студ. магистратуры, обуч. по направлениям "Физическая химия" и "Электрохимия"] / Воронеж. гос. ун-т .— Воронеж : Научная книга, 2015. Ч. 2: Диффузионный контроль. Хронопотенциометрия / сост.: О.А. Козадеров, Е.А. Попова.— 31 с.
25	Компьютерное моделирование электрохимических процессов : учебно-методическое пособие : [для студ. магистратуры, обуч. по направлениям "Физическая химия" и "Электрохимия"] / Воронеж. гос. ун-т .— Воронеж : Научная книга, 2015. Ч. 3: Диффузионный контроль. Вольтамперометрия / сост.: О.А. Козадеров, Ю.И. Боброва.— 30 с.

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

При реализации дисциплины проводятся различные типы лекций, лабораторные занятия, контрольные работы по основным разделам теоретического материала, выполнение лабораторных заданий в режиме контактной и самостоятельной работы. При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения и различные дистанционные образовательные технологии, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций (в том числе с применением сервисов Zoom, Discord и др.), взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров.

**18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

271 Компьютерный класс 12 компьютеров, принтер, проектор, ноутбук, лицензионное программное обеспечение Comsol Multiphysics, Mathematica

**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.	Моделирование равновесных электрохимических систем	ПК-1	ПК-1.1, ПК-1.2	<i>Перечень заданий 2</i>
2.	Аналитические методы математического моделирования электрохимических процессов	ПК-2	ПК-2.1, ПК-2.2	<i>Перечень заданий 1</i>
3.	Численные методы математического моделирования электрохимических процессов	ПК-2	ПК-2.1, ПК-2.2	<i>Перечень заданий 1</i>

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет, контрольная работа				<i>Перечень заданий 2</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:

#### Практико-ориентированные задания

##### Перечень заданий 1

1. Рассчитать и построить концентрационные профили электрохимически активного диффузанта для стационарного процесса катодного осаждения металла в потенциостатическом режиме поляризации.
2. Рассчитать и построить концентрационные профили электрохимически активного диффузанта для стационарного процесса анодного растворения металла в потенциостатическом режиме поляризации.
3. Рассчитать и построить концентрационные профили электрохимически активного диффузанта для стационарного процесса катодного осаждения металла в гальваностатическом режиме поляризации.
4. Рассчитать и построить концентрационные профили электрохимически активного диффузанта для стационарного процесса анодного растворения металла в гальваностатическом режиме поляризации.
5. Рассчитать и построить концентрационные профили электрохимически активного диффузанта для нестационарного процесса катодного осаждения металла в потенциостатическом режиме поляризации. Найти зависимость толщины диффузионной зоны от времени. Рассчитать и построить хроноамперограмму процесса. Перестроить ее в критериальных координатах. Найти характеристичный параметр катодной хроноамперометрии, сопоставить с теоретическим значением.
6. Рассчитать и построить концентрационные профили электрохимически активного диффузанта для нестационарного процесса анодного растворения металла в потенциостатическом режиме поляризации. Найти зависимость толщины диффузионной зоны от времени. Рассчитать и построить хроноамперограмму процесса. Перестроить ее в логарифмических координатах, определить наклон линейного участка, сопоставить с теоретическим значением.
7. Рассчитать и построить концентрационные профили электрохимически активного диффузанта для нестационарного процесса катодного осаждения металла в гальваностатическом режиме поляризации. Найти зависимость толщины диффузионной зоны от времени. Рассчитать и построить хронопотенциограмму процесса. Перестроить ее в критериальных координатах. Найти характеристичный параметр катодной хронопотенциометрии.
8. Рассчитать и построить концентрационные профили электрохимически активного диффузанта для нестационарного процесса анодного растворения металла в гальваностатическом режиме поляризации. Найти зависимость толщины диффузионной зоны от времени. Рассчитать и построить хронопотенциограмму процесса.
9. Рассчитать и построить вольтамперограмму обратимого электрохимического процесса. Найти зависимость параметров максимума поляризационной кривой от скорости сканирования потенциала.
10. Рассчитать и построить вольтамперограмму необратимого электрохимического процесса. Найти зависимость параметров максимума поляризационной кривой от скорости сканирования потенциала.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания):

Задача решена корректно.

Описание технологии проведения

В течение семестра обучающийся прослушивает курс лекций и посещает лабораторные занятия, на которых реализуются:

- выполнение практико-ориентированных лабораторных заданий по основным разделам дисциплины, оформление отчета и собеседование по результатам решения задач;
- устные опросы по основным разделам дисциплины.

## 20.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Контрольная работа

---

Перечень заданий 2

1. Выведите формулы для расчета долей различных форм трехосновной кислоты в водном растворе (2 балла). Рассчитайте диаграммы распределения этих форм, пользуясь (а) - MS Excel (2 балла); (б) - HySS (2 балла). Постройте их на одном графике в MS Excel (2 балла), сопоставьте результаты расчетов, полученные в двух разных программах (0.5 балла), и проанализируйте, как содержание той или иной формы кислоты зависит от pH раствора (1.5 балла).  $\Sigma = 10$  баллов.
2. Рассчитайте диаграмму распределения комплексов иона металла с лигандом в программе HySS (а) - без учета (2 балла) и (б) - с учетом гидроксокомплексов (2 балла). Перенесите расчетные данные из HySS в MS Excel и построьте обе диаграммы на одном графике (2 балла). Проанализируйте, как соотношение комплексных форм иона металла зависит от pH раствора (2 балла), а также каким образом учет гидроксокомплексов меняет состав системы в кислой, нейтральной и щелочной среде (2 балла).  $\Sigma = 10$  баллов.

Вариант	Кислота	Ион металла	Лиганд
1	Иодная	$\text{Ag}^+$	$\text{Br}^-$
2	Орто-кремниевая	$\text{Cd}^{2+}$	$\text{Br}^-$
3	Лимонная	$\text{Ce}^{4+}$	$\text{CH}_3\text{COO}^-$
4	Мышьяковая	$\text{Co}^{2+}$	$(\text{COO})_2^{2-}$
5	Теллуровая	$\text{Cu}^{2+}$	$\text{CH}_3\text{COO}^-$
6	Пирофосфорная	$\text{Fe}^{2+}$	$\text{CH}_3\text{COO}^-$
7	Иодная	$\text{Ni}^{2+}$	$\text{CH}_3\text{COO}^-$
8	Орто-кремниевая	$\text{Pb}^{2+}$	$\text{Br}^-$
9	Лимонная	$\text{Sn}^{2+}$	$\text{Br}^-$
10	Мышьяковая	$\text{Zn}^{2+}$	$\text{Br}^-$
11	Теллуровая	$\text{Ag}^+$	$\text{Cl}^-$
12	Пирофосфорная	$\text{Cd}^{2+}$	$\text{Cl}^-$
13	Иодная	$\text{Cu}^{2+}$	$(\text{COO})_2^{2-}$
14	Орто-кремниевая	$\text{Co}^{2+}$	$\text{C}_9\text{H}_6\text{NO}^-$
15	Лимонная	$\text{Cu}^{2+}$	$\text{Cl}^-$
16	Мышьяковая	$\text{Fe}^{2+}$	$\text{Cl}^-$
17	Теллуровая	$\text{Ni}^{2+}$	$(\text{COO})_2^{2-}$
18	Пирофосфорная	$\text{Pb}^{2+}$	$\text{Cl}^-$
19	Иодная	$\text{Sn}^{2+}$	$\text{Cl}^-$
20	Орто-кремниевая	$\text{Zn}^{2+}$	$\text{Cl}^-$
21	Лимонная	$\text{Ag}^+$	$\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$
22	Мышьяковая	$\text{Cd}^{2+}$	$(\text{COO})_2^{2-}$
23	Теллуровая	$\text{Cu}^{2+}$	$\text{C}_9\text{H}_6\text{NO}^-$
24	Пирофосфорная	$\text{Co}^{2+}$	$\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Задание решено на 12 и более баллов.



### 20.3. Оценочные средства для диагностической работы

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК - 1	Способен проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности	ПК - 1.1	Обеспечивает сбор научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач	Знать: основные источники научно-технических данных, требующихся для моделирования электрохимических систем. Уметь: осуществлять постановку математической задачи для описания электрохимических систем. Владеть: способами поиска информации, необходимой для постановки и решения задач по моделированию электрохимических систем
		ПК - 1.2	Составляет аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта	Знать: основы составления аналитических обзоров Уметь: интерпретировать и обобщать собранную информацию Владеть: способами анализа собранной информации
ПК - 2	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии	ПК - 2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	Знать: основы планирования научного исследования Уметь: использовать на практике правила составления плана исследований Владеть: методами детализации плана исследований
		ПК - 2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Знать: методы исследования механизма процесса в соответствии с поставленной перед ними проблемой. Уметь: разработать схему расчета и практически провести его с использованием аналитических или численных методов Владеть: способами интерпретации полученных результатов.

#### ПК-1

- Укажите основную российскую базу научной информации для поиска научно-технических данных, требующихся для моделирования электрохимических систем.
  - eLIBRARY
  - Scopus
  - Web of Science
  - ScienceDirect
- По каким источникам проводится обзор литературы при постановке задачи по моделированию электрохимических процессов?
  - Монографии
  - Статьи
  - Патенты
  - Корректны все варианты ответов
- Что должен включать обзор источников научной, технической и патентной информации?
  - Критический анализ основных идей и тенденций для обоснования актуальности темы исследования.
  - Перечисление цитат из различных источников литературы
  - Копирование наиболее подходящих по теме статей
  - Корректны все варианты ответов
- Для чего служат поисковые сервисы?
  - Хранения информации
  - Получения информации
  - Удаления информации

- Г. Корректны все варианты ответов
5. Как оформляется список использованной литературы?
- А. По ГОСТУ
  - Б. Только с разрешения автора публикации
  - В. Нет строгих требований
  - Г. Нет правильного ответа
6. Укажите зарубежную базу научной информации для поиска научно-технических данных, требующихся для моделирования электрохимических систем.
- А. eLIBRARY
  - Б. Scopus
  - В. lib.vsu.ru
  - Г. Корректны все варианты ответов
7. При моделировании электрохимических систем и процессов можно использовать
- А. Только аналитические методы
  - Б. Аналитические и численные методы
  - В. Только численные методы
  - Г. Моделирование электрохимических систем и процессов невозможно
8. Каково назначение программы Microsoft PowerPoint?
- А. Для обеспечения правильной работы процессора компьютера
  - Б. Для проведения мультимедийных презентаций
  - В. Для набора и редактирования текста
  - Г. Для работы с таблицами и диаграммами
9. В каких случаях, и с какой целью создаются базы данных?
- А. Когда необходимо отследить, проанализировать и хранить информацию за определенный период времени
  - Б. Для удобства набора текста
  - В. Когда на компьютере нет свободной памяти
  - Г. Корректны все варианты ответов
10. Наглядная форма представления информации по результатам моделирования электрохимических систем и процессов:
- А. Воспоминания о проделанной работе
  - Б. Презентация
  - В. Аудиозапись хода эксперимента
  - Г. Корректны все варианты ответов
11. Каковы основные этапы создания научной презентации?
- А. Планирование, создание и редактирование слайдов, монтаж презентации, репетиция выступления с презентацией
  - Б. Монтаж презентации, выбор подходящего шаблона, планирование презентации
  - В. Разработка дизайна, проверка и отладка презентации
  - Г. Нет корректного ответа
12. Методом математического моделирования можно изучить характеристики
- А. Только стационарных электрохимических процессов
  - Б. Только нестационарных электрохимических процессов
  - В. Стационарных и нестационарных электрохимических процессов
  - Г. Верного ответа нет
13. Укажите компьютерную программу для численного моделирования электрохимических процессов
- А. Comsol Multiphysics
  - Б. MS Word
  - В. Maple
  - Г. Верного ответа нет
14. Укажите аналитический метод математического моделирования электрохимических процессов
- А. Метод Лапласа-Карсона
  - Б. Метод конечных элементов
  - В. Метод наименьших квадратов
  - Г. Верного ответа нет
15. Укажите численный метод математического моделирования электрохимических процессов
- А. Метод Лапласа-Карсона
  - Б. Метод конечных элементов
  - В. Метод наименьших квадратов
  - Г. Верного ответа нет
- Открытые  
Критерии оценивания:  
2 балла – указан верный ответ;  
0 баллов – указан неверный ответ.

16. Необходимо сделать вывод о роли перенапряжения в токовом транзiente анодного растворения металла. Какой тип функциональной зависимости следует рассчитать в ходе моделирования данного процесса?

Согласно литературным данным, токовый транзент – это зависимость плотности тока или силы тока от времени, следовательно, необходимо смоделировать нестационарный процесс анодного растворения металла и получить хроноамперограмму. Ответ: хроноамперограмма

17. Необходимо рассчитать хроноамперограммы катодного потенциостатического диффузионно-контролируемого восстановления различных ионов на плоской идеально гладкой поверхности электрода. Какие справочные данные потребуются использовать при таком моделировании?

Данные о коэффициентах диффузии ионов.

18. Необходимо сделать вывод о роли плотности тока в изменении потенциала анодного растворения металла. В каком режиме следует провести моделирование данного электрохимического процесса?

Предполагается задавать постоянной плотность тока, поэтому режим – гальваностатический.

19. При моделировании электрохимического процесса установлено, что на катодной поляризационной кривой неподвижного электрода обнаружена область независимости плотности тока от перенапряжения, причем вращение электрода приводит к росту плотности тока. Какая стадия является скоростью определяющей в электрохимическом процессе, протекающем в данной системе?

Ответ: диффузия

20. Требуется смоделировать процесс катодного осаждения металла в потенциодинамическом режиме. Какой тип функциональной зависимости следует рассчитать в ходе моделирования данного процесса?

Согласно литературным данным, потенциодинамический режим предполагает изменение потенциала во времени и регистрацию при этом силы тока, в итоге получают зависимость плотности тока от потенциала, то есть вольтамперограмму. Ответ: вольтамперограмма

#### Ключи для ПК-1

Вопросы	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Ответы	А	Г	А	Б	А	Б	Б	Б	А
Вопросы	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Ответы	Б	А	В	А	А	Б	хроноамперограмма	Данные о коэффициентах диффузии ионов	гальваностатический
Вопросы	19	20							
Ответы	диффузия	вольтамперограмма							

#### ПК-2

- Моделирование электрохимических процессов осложняется тем, что они являются
  - Простыми
  - Многостадийными
  - Гомогенными
  - Моделирование электрохимических процессов невозможно
- Для моделирования электрохимического процесса, лимитируемого нестационарным диффузионным массопереносом, используется
  - Дифференциальное уравнение первого закона Фика
  - Дифференциальное уравнение второго закона Фика
  - Уравнение Батлера-Фольмера
  - Корректны все варианты ответов
- Для моделирования электрохимического процесса, лимитируемого стационарным диффузионным массопереносом, используется
  - Дифференциальное уравнение первого закона Фика
  - Дифференциальное уравнение второго закона Фика
  - Уравнение Батлера-Фольмера
  - Корректны все варианты ответов
- Интегральные преобразования используются при моделировании электрохимических процессов
  - Аналитическими методами
  - Численными методами
  - Методом наименьших квадратов
  - Корректны все варианты ответов
- При моделировании диффузионно-контролируемого электрохимического процесса в потенциостатическом режиме граничное условие предполагает постоянство
  - Поверхностной концентрации диффузанта
  - Потока диффузанта на поверхности электрода
  - Граничное условие не задается в данном случае
  - Нет правильного ответа
- При моделировании диффузионно-контролируемого электрохимического процесса в гальваностатическом режиме граничное условие предполагает постоянство

- А. Поверхностной концентрации диффузанта
  - Б. Потока диффузанта на поверхности электрода
  - В. Граничное условие не задается в данном случае
  - Г. Нет правильного ответа
7. При моделировании диффузионно-контролируемого электрохимического процесса в потенциодинамическом режиме граничное условие предполагает постоянство
- А. Поверхностной концентрации диффузанта
  - Б. Потока диффузанта на поверхности электрода
  - В. Граничное условие не задается в данном случае
  - Г. Нет правильного ответа
8. При моделировании диффузионно-контролируемого электрохимического процесса в гальванодинамическом режиме граничное условие предполагает постоянство
- А. Поверхностной концентрации диффузанта
  - Б. Потока диффузанта на поверхности электрода
  - В. Граничное условие не задается в данном случае
  - Г. Нет правильного ответа
9. Методом Лапласа-Карсона можно получить точное решение задачи о нестационарной диффузии при катодном осаждении металла
- А. Только на идеально гладком электроде
  - Б. Только на шероховатом электроде
  - В. Данный метод не используется при моделировании электрохимических процессов
  - Г. Нет правильного ответа
10. Методом конечных элементов можно получить точное решение задачи о нестационарной диффузии при катодном осаждении металла
- А. Только на идеально гладком электроде
  - Б. Только на шероховатом электроде
  - В. Как на идеально гладком, так и на шероховатом электроде
  - Г. Нет правильного ответа
11. Каковы основные этапы моделирования электрохимического процесса в Comsol Multiphysics?
- А. Создание геометрической модели
  - Б. Формулирование начальных и граничных условий
  - В. Запуск решателя
  - Г. Корректны все варианты ответов
12. Диффузионно-контролируемый потенциостатический процесс моделируется
- А. В условиях постоянства плотности тока
  - Б. В условиях постоянства электродного потенциала
  - В. В условиях сканирования плотности тока
  - Г. В условиях сканирования электродного потенциала
13. Диффузионно-контролируемый гальваностатический процесс моделируется
- А. В условиях постоянства плотности тока
  - Б. В условиях постоянства электродного потенциала
  - В. В условиях сканирования плотности тока
  - Г. В условиях сканирования электродного потенциала
14. Диффузионно-контролируемый потенциодинамический процесс моделируется
- А. В условиях постоянства плотности тока
  - Б. В условиях постоянства электродного потенциала
  - В. В условиях сканирования плотности тока
  - Г. В условиях сканирования электродного потенциала
15. Диффузионно-контролируемый гальванодинамический процесс моделируется
- А. В условиях постоянства плотности тока
  - Б. В условиях постоянства электродного потенциала
  - В. В условиях сканирования плотности тока
  - Г. В условиях сканирования электродного потенциала

Открытые

Критерии оценивания:

2 балла – указан верный ответ;

0 баллов – указан неверный ответ.

16. Предложите аналитический метод для расчета хронопотенциограммы анодного гальваностатического диффузионно-контролируемого растворения металла с плоской идеально гладкой поверхности электрода.

Ответ: метод Лапласа или метод Лапласа-Карсона

17. Какие данные необходимы для расчета хронопотенциограммы процесса анодного гальваностатического селективного растворения металла А из сплава при разных плотностях тока при условии, что процесс контролируется твердофазной диффузией?

Ответ: коэффициент диффузии

18. Какой параметр необходимо варьировать для получения зависимости Рендлса-Шевчика модельного электрохимического процесса?

Ответ: скорость сканирования потенциала

19. В каких координатах следует перестраивать модельную хроноамперограмму диффузионно-контролируемого электрохимического процесса?

Ответ: Коттрелевых,  $i-t^{-1/2}$

20. Какой параметр является критериальным в гальваностатическом электрохимическом процессе, контролируемом диффузией?

Ответ: переходное время

#### Ключи для ПК-2

Вопросы	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Ответы	Б	Б	А	А	А	Б	Г	Г	А
Вопросы	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Ответы	В	Г	Б	А	Г	В	метод Лапласа или метод Лапласа-Карсона	коэффициент диффузии	скорость сканирования потенциала
Вопросы	19	20							
Ответы	Коттрелевых, $i-t^{-1/2}$	переходное время							

#### Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в формах: устного опроса (индивидуальный опрос, фронтальная беседа).

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования. Промежуточная аттестация осуществляется по результатам контрольной работы. При успешном прохождении текущей аттестации зачет выставляется автоматически. В случае, если обучающийся не справился с заданиями контрольных работ, он получает задания из перечня для прохождения промежуточной аттестации.

Требования к выполнению заданий: корректное решение задачи. Ответ должен отражать способность обучающегося применять знания и умения, полученные на лекциях и лабораторных занятиях, умение работать с литературой и находить нужную информацию. В этом случае выставляется оценка зачтено.

При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий оценки за зачет может быть выставлена по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре.