

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)
21.06.2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.01.01 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 (степень) выпускника: магистр
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:
НМС химического факультета 24.05.2018, протокол № 5
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)

(отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2018/2019

Семестр(ы): 2

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

освещение современного состояния теории термодинамической устойчивости применительно к задачам химического и фазового равновесия; изучение элементарных топологических методов в теории фазовых равновесий и физико-химическом анализе.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

М1.В.ДВ.1 – вариативная часть, дисциплины по выбору.

Требования к входным знаниям:

знание общей и химической термодинамики в объеме, предусмотренной программами по физической химии; знание линейной алгебры, векторной алгебры и дифференциальной геометрии, анализа и элементов теории функций, дифференциальных уравнений в объеме, предусмотренном программой курса «Высшая математика».

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

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	знать: теоретические основы дисциплины;
		уметь: использовать полученные знания теоретических основ для анализа конкретных объектов;
		владеть (иметь навык(и)): приемами решения профессиональных задач с использованием полученных знаний теоретических основ дисциплины
ПК-1	Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования получать новые научные и прикладные результаты	знать: основные результаты и достижения дисциплины;
		уметь: самостоятельно составлять план исследования получать новые научные и прикладные результаты;
		владеть (иметь навык(и)): способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике;
ПК-2	Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	знать: основные результаты и достижения дисциплины;
		уметь: использовать теоретические основы для практической работы;
		владеть (иметь навык(и)): теорией и навыками практической работы в области термодинамики

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

Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) – зачет с оценкой

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость		
	Всего	По семестрам	
		1 семестр	2 семестр
Аудиторные занятия			
лекции	18		18
практические			
лабораторные	18		18
Самостоятельная работа	108		108

Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час / экзамен – ___ час)	зачет с оценкой
Итого:	144

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
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 работы		
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 (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоят. работа	Всего
1	Аналитический аппарат классической термодинамики	2		3	18	23
2	Аппарат парциальных молярных функций	2		3	18	23
3	Общие условия равновесия	3		0	18	21
4	Равновесие и устойчивость систем со стехиометрическими связями	4		4	18	26
5	Равновесие и устойчивость гетерогенных систем	4		4	18	26

6	Основная задача геометрической термодинамики	3		4	18	25
	Итого:	18		18	108	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

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. : Metallurgia, 1988. – 601 с.
4	Донде, Де Т. Термодинамическая теория сродства (книга принципов) / Т. де Донде, П. ван Риссельберг; пер. с англ. – М. : Metallurgia, 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	Источник
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

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 – 4 а), пункты 1 – 7 б)

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

lib.vsu.ru – Сайт библиотеки ВГУ;

<http://www.elibrary.ru> – Научная электронная библиотека;

<http://www.en.edu.ru> – Естественнонаучный образовательный портал

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины

(при использовании лабораторного оборудования указывать полный перечень, при большом количестве оборудования можно вынести данный раздел в приложение к рабочей программе)

Мультимедийное оборудование для чтения лекций с использованием электронных презентаций.

19. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС * (средства оценивания)
ОПК-1 Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	знать: теоретические основы дисциплины	темы 1 – 6	устный опрос
	уметь: использовать полученные знания теоретических основ для анализа конкретных объектов	темы 1 – 6	устный опрос
	владеть: приемами решения профессиональных задач с использованием полученных знаний теоретических основ дисциплины	темы 1 – 6	устный опрос
ПК-1 Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования получать новые научные и прикладные результаты	знать: основные результаты и достижения дисциплины	темы 1 – 6	устный опрос
	уметь: самостоятельно составлять план исследования получать новые научные и прикладные результаты	темы 1 – 6	устный опрос
	владеть: способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике	темы 1 – 6	устный опрос
ПК-2 Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	знать: основные результаты и достижения дисциплины	темы 1 – 6	устный опрос
	уметь: использовать теоретические основы для практической работы	темы 1 – 6	устный опрос
	владеть: теорией и навыками практической работы в области термодинамики	темы 1 – 6	устный опрос
Промежуточная аттестация			КИМ

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

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Для оценивания результатов обучения на зачете используются следующие показатели (ЗУНы из 19.1): владение понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач.

Для оценивания результатов обучения на зачете с оценкой используется 4-хбалльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
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	повышенный уровень	<i>отлично</i>
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	базовый уровень	<i>хорошо</i>
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	пороговый уровень	<i>удовлетворительно</i>
Компетенции не освоены	—	<i>неудовлетворительно</i>

19.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к зачету:

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.

19.4. 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 форме: устного опроса (фронтальная беседа).

Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования. Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.