

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
физической химии



д.х.н., доц. Козадеров О.А.
10.04.2025 г.

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

- 1. Код и наименование специальности:** 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
- 2. 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., доц.
- 7. Рекомендована:** НМС химического факультета от 27.03.2025, протокол № 10-03
- 8. Учебный год:** 2027-2028 **Семестр(ы):** 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;

- ознакомить с методами 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 блока 1. Дисциплины (модули).

Требования к входным знаниям, умениям и навыкам: владеть основами теории фундаментальных разделов химии; способностью применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, иметь навыки самостоятельной обработки результатов измерений, необходимые для установления природы явления и определения его количественных характеристик; уметь дифференцировать и интегрировать элементарные функции, знать специальные интегралы, основы линейной алгебры, дифференциального исчисления, молекулярной физики, физической химии, электрохимии

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-исследовательских задач в области	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	Знать: методы исследования механизма процесса в соответствии с поставленной проблемой. Уметь: разработать схему расчета и

	аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии		методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	практически провести его с использованием аналитических или численных методов Владеть: способами интерпретации полученных результатов.
--	--	--	---	---

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 2/72.

Форма промежуточной аттестации – зачет.

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		7		
Аудиторные занятия	54	54		
в том числе:	лекции	18	38	
	практические			
	лабораторные	36	38	
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
1. Лекции			
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.	ЭУМК «Химические источники тока» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=27466
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.	

2. Лабораторные занятия			
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.	ЭУМК «Химические источники тока» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=27466
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.	

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:

Студенты знакомятся с теоретическим материалом в ходе лекционного курса. При освоении лекционного материала необходимо работать не только с конспектами лекций, но и с использованием рекомендованной учебной литературы и учебно-методических пособий (п.п. 15-16). На лабораторных занятиях студенты либо индивидуально, либо в составе малой группы выполняют учебно-исследовательскую работу. Лабораторные занятия по изучаемой дисциплине проводятся для 1) ознакомления с теоретической основой работы, 2) основными приемами при работе с используемым программным обеспечением, 3) выполнения экспериментальной части работы, 4) обработки экспериментальных результатов, их обоснования в форме выводов и предоставления их для предварительной проверки преподавателю.

Защита лабораторной работы проводится с целью выявления уровня освоения материала по тематике работы, способности дать правильную трактовку результатам, полученным при выполнении работы. Защита работы заключается в обязательном оформлении работ, устной беседе преподавателя со студентом по полученным в работе результатам и основным теоретическим понятиям по теме работы.

Контроль освоения теоретического материала проводится после прослушивания студентами лекционного материала по каждой теме в виде решения расчетных задач.

К зачету допускаются только студенты, выполнившие и отчитавшиеся по всем лабораторным работам, предусмотренным учебным планом.

Обучение лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом их индивидуальных психофизических особенностей. Для лиц с нарушением слуха информация по учебной дисциплине предоставляется на бумажном или электронном носителе, допускается присутствие ассистентов и сурдопереводчиков на занятиях. Промежуточная аттестация для таких студентов проводится в письменной форме с общими критериями оценивания; при необходимости время подготовки на зачете может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации с использованием программ-синтезаторов речи, а также использование звукозаписывающих устройств на лекциях. На занятиях также может присутствовать ассистент. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование; время подготовки на зачете может быть увеличено.

Студенты с нарушениями опорно-двигательного аппарата могут проходить часть занятий дистанционно. Промежуточная аттестация для них проводится на общих основаниях, при необходимости процедура зачета может быть реализована дистанционно.

При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton), электронная почта, мессенджеры и соцсети.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

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

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

№ п/п	Ресурс
1	http://www.en.edu.ru/ - Естественно-научный образовательный портал - является составной

	частью федерального портала "Российское образование". Содержит ресурсы и ссылки на ресурсы по естественно-научным дисциплинам (физика, химия и биология).
2	http://window.edu.ru/ - информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам».
3	http://www.elibrary.ru – Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - крупнейший российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 12 млн. научных статей и публикаций. На платформе eLIBRARY.RU доступны электронные версии более 1400 российских научно-технических журналов, в том числе более 500 журналов в открытом доступе.
4	Информационно-телекоммуникационная система «Контекстум» (Национальный цифровой ресурс «РУКОНТ») www.rucont.ru
5	ЭБС «Университетская библиотека on-line» естественные дисциплины. Доступ осуществляется по адресу: http://biblioclub.ru/
6	www.lib.vsu.ru – ЗНБ ВГУ
7	Образовательный математический сайт Exponenta.ru. - < ww.exponenta.ru >

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	<i>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.</i>
2	<i>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.</i>
3	<i>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.</i>

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

При реализации учебной дисциплины используются классические образовательные технологии без замены аудиторных занятий (лекции и лабораторные) на ДОТ. Проведение текущей аттестации осуществляется в устной форме в виде ответов на вопросы по материалу курса на лабораторных занятиях, защиты лабораторных работ, решения задач и выполнения письменных самостоятельных заданий для контроля самостоятельной работы студента. 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 могут быть использованы при работе со студентами с ограниченными возможностями или при проведении тестирования по курсу.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

<p><i>Лекционные занятия</i> Учебная (лекционная) аудитория 167 (семестр 3): типовое оборудование учебной аудитории, доска, ноутбук, проектор, экран. Программные продукты, Microsoft Windows WinSvrStd 2012 RUS OLP; NL Acdmc 2 Proc; ПО ЭВМ MicrosoftImagene; Premium Renewed Subscription</p>
<p><i>Лабораторные занятия</i> Учебная лаборатория 271. Доска меловая, компьютерные столы. Компьютерный класс 12 компьютеров, принтер, проектор, ноутбук. Программные продукты, Microsoft Windows WinSvrStd 2012 RUS OLP; NL Acdmc 2 Proc; ПО ЭВМ MicrosoftImagene; Premium Renewed Subscription, лицензионное программное обеспечение Comsol</p>

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>
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет				<i>Перечень заданий 2</i>

20. Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

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

20.1. Текущий контроль успеваемости

Текущие аттестации проводятся в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущие аттестации проводятся в форме контрольной работы и тестового опроса в системе "Электронный университет ВГУ". Критерии оценивания приведены ниже.

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: практико-ориентированные задания.

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 проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Описание технологии проведения

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	Ag ⁺	Br ⁻
2	Орто-кремниевая	Cd ²⁺	Br ⁻
3	Лимонная	Ce ⁴⁺	CH ₃ COO ⁻
4	Мышьяковая	Co ²⁺	(COO) ₂ ²⁻
5	Теллуровая	Cu ²⁺	CH ₃ COO ⁻
6	Пирофосфорная	Fe ²⁺	CH ₃ COO ⁻
7	Иодная	Ni ²⁺	CH ₃ COO ⁻
8	Орто-кремниевая	Pb ²⁺	Br ⁻
9	Лимонная	Sn ²⁺	Br ⁻
10	Мышьяковая	Zn ²⁺	Br ⁻
11	Теллуровая	Ag ⁺	Cl ⁻
12	Пирофосфорная	Cd ²⁺	Cl ⁻
13	Иодная	Cu ²⁺	(COO) ₂ ²⁻
14	Орто-кремниевая	Co ²⁺	C ₉ H ₆ NO ⁻
15	Лимонная	Cu ²⁺	Cl ⁻
16	Мышьяковая	Fe ²⁺	Cl ⁻
17	Теллуровая	Ni ²⁺	(COO) ₂ ²⁻
18	Пирофосфорная	Pb ²⁺	Cl ⁻
19	Иодная	Sn ²⁺	Cl ⁻
20	Орто-кремниевая	Zn ²⁺	Cl ⁻
21	Лимонная	Ag ⁺	C ₅ H ₅ N
22	Мышьяковая	Cd ²⁺	(COO) ₂ ²⁻
23	Теллуровая	Cu ²⁺	C ₉ H ₆ NO ⁻
24	Пирофосфорная	Co ²⁺	C ₅ H ₅ N

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Задание решено на 12 и более баллов.

Промежуточная аттестация студентов является основной формой контроля аудиторной работы студентов и проводится с целью установления уровня и качества подготовки студентов и определяет:

- полноту и прочность теоретических знаний;
- сформированность умений применять теоретические знания при решении практических и задач;
- сформированность необходимых компетенций.

Подготовка к промежуточной аттестации является формой самостоятельной работы студентов. При этом обучающийся должен использовать рекомендованный рабочей программой перечень основной и дополнительной литературы, материалы лекций, информационные и электронно-образовательные ресурсы. Для подготовки к промежуточной аттестации студент также может использовать перечень заданий контрольной работы, вынесенных на зачет, позволяющий оценить уровень сформированности компетенций по дисциплине «Компьютерное моделирование электрохимических систем».

Промежуточная аттестация проводится в письменной форме. Преподаватель, проводящий промежуточную аттестацию, имеет право задавать студентам дополнительные вопросы по всему разделу программы учебной дисциплины. Время проведения зачета устанавливается нормами

времени. Результат сдачи промежуточной аттестации заносится преподавателем в зачетно-экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

Промежуточная аттестация осуществляется по результатам контрольной работы. Зачет по дисциплине выставляется, если студент решил контрольную работу на 12 и более баллов.

На подготовку ответа студенту дается 90 минут. Ответ оформляется на отдельном листе в рукописном виде (после собеседования остается у экзаменатора) и/или с использованием подходящего программного обеспечения на компьютере. Во время подготовки ответа на вопросы КИМ студент не может использовать конспекты лекций, учебники и пользоваться интернет-ресурсами. Ответ должен содержать основные математические уравнения и уравнения реакций, графический материал. Определения студент может формулировать в устной форме. По окончании ответа студента экзаменатор может задать ему несколько дополнительных вопросов по материалу курса, включая и вопросы, которые студент должен был освоить в ходе самостоятельной работы. 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.

Продолжительность проведения зачета устанавливается нормами времени. Результат сдачи промежуточной аттестации заносится преподавателем в зачетно-экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий зачет может быть выставлен по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре. По результатам всех выполненных заданий текущего контроля студентам может быть выставлена зачетная оценка автоматически:

- средняя оценка равна или выше 3 – «зачтено»,
- средняя оценка ниже 3 – «не зачтено».

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на зачете;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

20.3. Фонды оценочных средств для проведения диагностических работ по результатам освоения дисциплины

ПК-1

1. Укажите основную российскую базу научной информации для поиска научно-технических данных, требующихся для моделирования электрохимических систем.

- A. eLIBRARY
 - Б. Scopus
 - В. Web of Science
 - Г. ScienceDirect
2. По каким источникам проводится обзор литературы при постановке задачи по моделированию электрохимических процессов?
- А. Монографии
 - Б. Статьи
 - В. Патенты
 - Г. Корректны все варианты ответов
3. Что должен включать обзор источников научной, технической и патентной информации?
- А. Критический анализ основных идей и тенденций для обоснования актуальности темы исследования.
 - Б. Перечисление цитат из различных источников литературы
 - В. Копирование наиболее подходящих по теме статей
 - Г. Корректны все варианты ответов
4. Для чего служат поисковые сервисы?
- А. Хранения информации
 - Б. Получения информации
 - В. 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 потребуется 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 скоростьюопределяющей 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

1. Моделирование электрохимических процессов осложняется тем, что они являются
 - А. Простыми
 - Б. Многостадийными
 - В. Гомогенными
 - Г. Моделирование электрохимических процессов невозможно
2. Для моделирования электрохимического процесса, лимитируемого нестационарным диффузионным массопереносом, используется
 - А. Дифференциальное уравнение первого закона Фика
 - Б. Дифференциальное уравнение второго закона Фика
 - В. Уравнение Батлера-Фольмера
 - Г. Корректны все варианты ответов
3. Для моделирования электрохимического процесса, лимитируемого стационарным диффузионным массопереносом, используется
 - А. Дифференциальное уравнение первого закона Фика
 - Б. Дифференциальное уравнение второго закона Фика
 - В. Уравнение Батлера-Фольмера
 - Г. Корректны все варианты ответов
4. Интегральные преобразования используются при моделировании электрохимических процессов
 - А. Аналитическими методами
 - Б. Численными методами
 - В. Методом наименьших квадратов
 - Г. Корректны все варианты ответов
5. При моделировании диффузионно-контролируемого электрохимического процесса в потенциостатическом 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
6. 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							