

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ЛЭТИ» ИМ. В.И. УЛЬЯНОВА (ЛЕНИНА)



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
дисциплины
«ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В РАЗРАБОТКЕ НОВЫХ
МАТЕРИАЛОВ И ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ»
для подготовки аспирантов по направлению
04.06.01 – «Химические науки»
по направленности
«Физическая химия»

Санкт-Петербург

2018

СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

№№ учебных планов: 8904043

Обеспечивающий институт: ИФИО

Обеспечивающая кафедра: ФХ

Общая трудоемкость (ЗЕТ) 5

Курс 1

Семестр 1

Виды занятий

Лекции (академ. часов) 2

Практические занятия (академ. часов) 0

Лабораторные занятия (академ. часов) 0

Все аудиторные (контактные) занятия (академ. часов) 2

Самостоятельная работа (академ. часов) 178

Всего (академ. часов) 180

Вид промежуточной аттестации

Дифференцированный зачет (семестр) 1

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ФХ 20.04.18, протокол № 6.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена учебно-методической комиссией института фундаментального инженерного образования 25.04.18, протокол № 5.

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ
**«ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В РАЗРАБОТКЕ НО-
ВЫХ МАТЕРИАЛОВ И ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ»**

Дисциплина знакомит аспирантов с основными понятиями химической термодинамики материалов, проблемами решения прямой и обратной задач термодинамики.

SUBJECT SUMMARY
**«THERMODYNAMIC MODELING IN THE DEVELOPMENT OF NEW
MATERIALS AND CHEMICAL TECHNOLOGIES»**

Discipline acquaints postgraduate students with the basic concepts of chemical thermodynamics of materials, problems solving direct and inverse problems of thermodynamics.

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Знать основные понятия химической термодинамики материалов, проблемы решения прямой и обратной задач термодинамики.
2. Уметь рассчитывать фазовые диаграмма по экспериментальным и теоретическим данным: наклон и кривизна линий фазовых переходов, расчет границ вблизи инвариантных точек, расчет термодинамических параметров фаз.
3. Владеть навыками и знаниями по методам расчета, моделирования и построения фазовых диаграмм многокомпонентных систем.

Перечень компетенций, в формировании которых участвует дисциплина, приведен в матрице компетенций, прилагаемой к ООП.

МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Дисциплина «Термодинамическое моделирование в разработке новых материалов и химических технологий» относится к вариативной части ООП. Дисциплина преподается на основе знаний, полученных при освоении программы магистратуры или специалитета, и является фундаментом для подготовки кандидатской диссертации.

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Введение (2 академ. час)

Содержание, цель и значение дисциплины в подготовке аспирантов, ее связь с другими дисциплинами и подготовкой кандидатской диссертации. Основные разделы курса.

Тема 1. Законы термодинамики (10 академ. часов)

Основные определения, понятия, обозначения. Постулаты и законы термодинамики: Первый, второй, третий законы термодинамики - формулировка, интерпретация, следствия. Устойчивость фаз. Энергия Гиб-бса. Устойчивость фаз в однокомпонентных системах. Уравнение Клаузиуса-Клайперона. Тройные и критические точки. Термодинамические функции соединений.

Тема 2. Гетерогенные системы (24 академ. часа)

Гетерогенные системы. Химический потенциал: Экстенсивные и интенсивные свойства. Парциальные мольные свойства - определение, соотношения, графическое представление, условия постоянного объема. Термодинамическое равновесие в гетерогенных системах: Условие равновесия. Построение общей касательной. Термодинамические функции смешения - энергия Гиббса, энтропия, энтальпия. Выбор стандартного состояния.

Тема 3. Бинарные растворы (30 академ. часов)

Стехиометрические и нестехиометрические соединения. Фазы переменного состава. Идеальный раствор. Определение. Реальный раствор. Законы Рауля и Генри. Уравнение Гиббса-Дюгема. Твердые и жидкие растворы. Активность, летучесть. Избыточные свойства - энергия Гиббса, энтропия, энтальпия.

Бинарные растворы. Термодинамические модели растворов: статистические модели растворов замещения и внедрения; регулярный раствор; субрегулярный раствор; квазирегулярный раствор. Квазихимическое приближение. Модель центральных атомов.

Тема 4. Многокомпонентные растворы (24 академ. часа)

Многокомпонентные растворы: представление и расчет энергии Гиббса многокомпонентных систем. Аналитическое выражение активностей. Определение условий равновесия посредством минимизации энергии Гиббса. Изотермические сечения.

Тема 5. Фазовые диаграммы (38 академ. часов)

Фазовые диаграммы одно-, двух-, трех- и многокомпонентных систем: Принципы Курнакова. Эвтектика, перитектика, монотектика. Численные методы расчета фазовых диаграмм. Экспериментальные методы построения фазовых диаграмм.

Тема 6. Поверхностная энергия (20 академ. часов)

Поверхностная энергия. Химические потенциалы на границе раздела фаз. Уравнение адсорбции Гиббса.

Тема 7. Фазовые равновесия (30 академ. часов)

Прямая и обратная задачи термодинамики фазовых равновесий: Расчет линий фазовых равновесий по термодинамическим данным. Определение термодинамических данных из фазовых диаграмм.

Заключение (2 академ. часа)

Перспективы развития физической химии и расширение областей её практического применения.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Перечень основной и дополнительной учебной литературы,

необходимой для освоения дисциплины

№	Название, библиографическое описание	Семестр	К-во экз. в библ. (на каф.)
Основная литература			
1	Готтштайн, Г. Физико-химические основы материаловедения: учебное пособие / Г. Готтштайн; пер. с англ. К. Н. Золотовой, Д. О. Чаркина, под ред. В. П. Зломанова. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. - 400 с. : ил. - (Лучший зарубежный учебник). - Библиогр.: с. 375-383.	1	10 (3)
2	Стромберг, А.Г. Физическая химия [Текст] : Учебник для вузов по химическим спец. / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко; Под ред. А. Г. Стромберга. – 7-е изд., стер. – М. : Высш. Шк., 2009. – 527 с. : ил.	1	51
3	Бобкова, Н.М. Физическая химия тугоплавких неметаллических и силикатных материалов : учебник для химико-технологических спец. Вузов / Н. М. Бобкова. – Минск : Вышэйш. Шк., 2007. – 301 с. : ил. – (Для студентов вузов). – Библиогр.: с. 294-296.	1	2
Дополнительная литература			
1	Русанов А. И. Термодинамические основы механохимии. – СПб: Наука, 2006. – 221 с.	1	нет (1)
2	Русанов А. И. Лекции по термодинамике поверхностей. Учебное пособие. – СПб.–М.–Краснодар: Лань, 2013. – 237 с.	1	нет (1)
3	Израелашвили Д.Н. Межмолекулярные и поверхностные силы. Научный мир 2011. 456с.	1	нет (1)
4	Вшивков, С.А. Фазовые и структурные переходы жидкокристаллических наносистем : учебное пособие / С. А. Вшивков. - 3-е изд., испр. и доп. - СПб. ; М. ; Краснодар : Лань, 2012. - 110 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Библиогр.: с. 109-110.	1	нет (1)
5	Ролдугин, В.И. Физикохимия поверхности: Учебник-монография / В. И. Ролдугин. - Долгопрудный : Интеллект, 2008. - 565 с. : ил.	1	2
6	Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. А. А. Равделя, А. М. Пономаревой, Сост. Н. М. Барон и др. - 11-е изд., испр. и доп. - М. : Аз-book, 2009. - 240 с. : ил. - Библиогр.: с. 225-230.	1	нет (10)

Зав. отделом учебной литературы

Т.В. Киселева

расп. директора Добеееву Новицкую РИ

**Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети
«Интернет», используемых при освоении дисциплины**

№	Электронный адрес
1	www.elibrary.ru
2	www.diss.rsl.ru;
3	www.viniti.ru;
4	www.chemport.ru;
5	www.biblioclub.ru;
6	http://www.rusanalytchem.org;
7	http://www.anchem.ru;
8	http://www.chem.msu.ru.
9	www.sciencedirect.com
10	www.springerlink.com
11	www.diss.rsl.ru;
12	www.chemweb.com
13	www.pubs.acs.org
14	www.doaj.org

Информационные технологии (операционные системы, программное обеспечение общего и специализированного назначения, а также информационные справочные системы) и материально-техническая база, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, соответствуют требованиям федерального государственного образовательного стандарта высшего образования.

Описание информационных технологий и материально-технической базы приведено в УМКД дисциплины в учебных пособиях к практическим занятиям.

Конкретные формы и процедуры текущего контроля знаний и промежуточной аттестации, а также методические указания для обучающихся по самостоятельной работе при освоении дисциплин (содержащиеся в ООП) доводятся до сведения обучающихся в течение первых недель обучения.

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Разработчик

д.х.н., проф.

к.х.н., доц.



Гусаров В.В.

Альмяшева О.В.

Рецензент

д.х.н., проф.



Беляев А.П.

Зав. каф. ФХ

д.х.н., проф.



Гусаров В.В.

Директор ИФИО

д.т.н., проф.

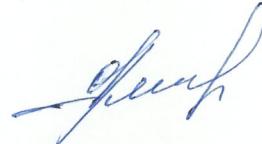


Филатов Ю. В.

Согласовано

Председатель УМК ИФИО

к.х.н., доц.



Альмяшева О. В.

Начальник МО

д.т.н., проф.



Грязнов А.Ю.

Заведующий ОДА

к.ф.-м.н.



Кучерова О.В.

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

№	Дата	Изменение	Дата заседания УМК, № прот-ла	Автор	Нач. МО
1					