

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по безопасности и общим вопросам

Дата подписания: 30.01.2023 16:41:18

Уникальный программный ключ:

d7a26b9e8ca85e98ac3de2ab454b4659d961f749

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

## Рабочая программа дисциплины (модуля)

# Термодинамическое моделирование химических процессов в многокомпонентных гетерогенных системах

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

03.04.02 ФИЗИКА

Профиль

Физика конденсированного состояния

Квалификация

**Магистр**

Форма обучения

**очная**

Общая трудоемкость

**4 ЗЕТ**

Часов по учебному плану

144

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 3

аудиторные занятия

34

самостоятельная работа

110

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	3 (2.1)		Итого	
	20			
Неделя	УП	РП	УП	РП
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Практические	17	17	17	17
Итого ауд.	34	34	34	34
Контактная работа	34	34	34	34
Сам. работа	110	110	110	110
Итого	144	144	144	144

Программу составил(и):

*к.тн, Доцент, Зайцев Александр Константинович*

Рабочая программа

**Термодинамическое моделирование химических процессов в многокомпонентных гетерогенных системах**

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - магистратура Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» по направлению подготовки 03.04.02 ФИЗИКА (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

03.04.02 ФИЗИКА, 03.04.02-МФ3-22-1.plx Физика конденсированного состояния, утвержденного Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

03.04.02 ФИЗИКА, Физика конденсированного состояния, утвержденной Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

**Кафедра физической химии**

Протокол от 22.06.2021 г., №11-20/21

Руководитель подразделения Салимон А.И.

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	Цели освоения дисциплины - освоение методов научных исследований, организации и планирования физических исследований, а также анализа полученных экспериментальных результатов на примере термодинамического моделирования процессов в многокомпонентных гетерогенных системах.
-----	---

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.05
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Методы исследования материалов	
2.1.2	Неравновесные конденсированные системы (II)	
2.1.3	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности. Научно-исследовательская практика	
2.1.4	Системы накопления и хранения электрической энергии	
2.1.5	Технологии получения материалов	
2.1.6	Экспериментальные методы физики твердого тела	
2.1.7	Атомно-кристаллическая структура твердых фаз	
2.1.8	Неравновесные конденсированные системы (I)	
2.1.9	Специальный физический практикум	
2.1.10	Фазовое равновесие в многокомпонентных системах	
2.1.11	Динамика решетки и электрон-фононное взаимодействие в твердых телах	
2.1.12	Дифракционные и спектроскопические методы исследования твердых тел	
2.1.13	Информационно-аналитические системы в материаловедении	
2.1.14	Физика магнитных явлений. Часть 1. Основы магнетизма	
2.1.15	Физика магнитных явлений. Часть 2. Магнетизм веществ	
2.1.16	Физические методы исследований	
2.1.17	Компьютерное моделирование в физическом материаловедении	
2.1.18	Магнитные материалы	
2.1.19	Методы теории электронной структуры твердых тел	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
2.2.1	Научно-педагогическая практика	
2.2.2	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	
2.2.3	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	

**3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ**

<b>ОПК-2:</b> Способен в сфере своей профессиональной деятельности осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования, организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую деятельность для поиска, выработки и принятия решений в области физики, демонстрировать продвинутые навыки работы в лабораториях / мастерских, способность разрабатывать и проводить экспериментальные исследования, критически оценивать данные и делать выводы
<b>Знать:</b>
ОПК-2-31 принципы моделирования, анализа и эксперименты в целях проведения детального исследования,
<b>ПК-2:</b> Способен проводить экспериментальные исследования и компьютерное моделирование физических процессов, в том числе, в рамках научно-исследовательских, опытно-технологических или опытно-конструкторских работ выполняемых в рамках тематик организаций.
<b>Знать:</b>
ПК-2-31 методы компьютерного моделирования физических процессов
<b>ОПК-4:</b> Способен определять сферу внедрения результатов научных исследований в области своей профессиональной деятельности, демонстрировать практические навыки для решения сложных задач, выполнения сложного проектирования, а также проведения комплексных исследований, знание экономических, организационных и управленческих вопросов, таких как: управление проектами, рисками и изменениями
<b>Знать:</b>
ОПК-4-31 результаты научных исследований в области своей профессиональной деятельности

<b>ОПК-1: Способен применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности</b>
<b>Знать:</b>
ОПК-1-31 фундаментальные законы в области физики и в междисциплинарных областях
<b>ОПК-4: Способен определять сферу внедрения результатов научных исследований в области своей профессиональной деятельности, демонстрировать практические навыки для решения сложных задач, выполнения сложного проектирования, а также проведения комплексных исследований, знание экономических, организационных и управленческих вопросов, таких как: управление проектами, рисками и изменениями</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-4-У1 решать сложные задачи в области своей профессиональной деятельности
<b>ОПК-2: Способен в сфере своей профессиональной деятельности осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования, организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую деятельность для поиска, выработки и принятия решений в области физики, демонстрировать продвинутые навыки работы в лабораториях / мастерских, способность разрабатывать и проводить экспериментальные исследования, критически оценивать данные и делать выводы</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-2-У1 осуществлять моделирование, анализ и эксперимент в сфере своей профессиональной деятельности
<b>ПК-2: Способен проводить экспериментальные исследования и компьютерное моделирование физических процессов, в том числе, в рамках научно-исследовательских, опытно-технологических или опытно-конструкторских работ выполняемых в рамках тематик организаций.</b>
<b>Уметь:</b>
ПК-2-У1 проводить экспериментальные исследования и компьютерное моделирование физических процессов
<b>ОПК-1: Способен применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-1-У1 применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач
<b>ПК-2: Способен проводить экспериментальные исследования и компьютерное моделирование физических процессов, в том числе, в рамках научно-исследовательских, опытно-технологических или опытно-конструкторских работ выполняемых в рамках тематик организаций.</b>
<b>Владеть:</b>
ПК-2-В1 методами компьютерного моделирования физических процессов
<b>ОПК-1: Способен применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-1-В1 основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности
<b>ОПК-2: Способен в сфере своей профессиональной деятельности осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования, организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую деятельность для поиска, выработки и принятия решений в области физики, демонстрировать продвинутые навыки работы в лабораториях / мастерских, способность разрабатывать и проводить экспериментальные исследования, критически оценивать данные и делать выводы</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-2-В1 принципами моделирования, анализа экспериментальных данных в целях проведения детального исследования
<b>ОПК-4: Способен определять сферу внедрения результатов научных исследований в области своей профессиональной деятельности, демонстрировать практические навыки для решения сложных задач, выполнения сложного проектирования, а также проведения комплексных исследований, знание экономических, организационных и управленческих вопросов, таких как: управление проектами, рисками и изменениями</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-4-В1 практическими навыками решения сложных задач

## 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	<b>Раздел 1. Расчеты сложных химических равновесий</b>							
1.1	Введение. Термодинамические функции. Критерии направленности процессов и равновесия. Закон действующих масс, константа равновесия.  /Лек/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.2	Расчет равновесного состава системы С-Н-О по закону действующих масс.  /Пр/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.3	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	3	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.4	Сложные химические равновесия. Выбор независимых реакций. /Лек/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.5	Расчет равновесного состава системы С-Н-О по закону действующих масс.  /Пр/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			

1.6	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	3	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.7	Применение правила фаз Гиббса для анализа сложных равновесий. /Лек/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.8	Расчет равновесного состава системы Fe-C-H-O по закону действующих масс. /Пр/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.9	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	3	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.10	Расчеты сложных химических равновесий по закону действующих масс. Ограничения метода. /Лек/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.11	Расчет равновесного состава системы Fe-C-H-O по закону действующих масс. /Пр/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			

1.12	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	3	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
	<b>Раздел 2. Методы термодинамического моделирования</b>							
2.1	Принципы расчета сложных химических равновесий по экстремуму функций состояния. Общие требования к программным комплексам. /Лек/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.2	Расчеты равновесного состава систем Fe-C-H-O на программном комплексе ИВТАНТЕРМО /Пр/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.3	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	3	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.4	Программный комплекс ИВТАНТЕРМО: структура базовых программ, расчеты параметров веществ и реакций, визуализация результатов расчетов. /Лек/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			

2.5	Расчеты равновесного состава систем Fe-C-H-O на программном комплексе ИВТАНТЕРМО. /Пр/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.6	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	3	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.7	Термодинамическое моделирование разложения и диссоциации соединений /Пр/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.8	Общие принципы и этапы термодинамического моделирования . Анализ результатов. /Лек/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.9	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	3	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.10	Учет кинетических запретов при проведении термодинамического моделирования . Дополнительные программные средства комплекса ИВТАНТЕРМО. /Лек/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			



2.11	Термодинамическое моделирование взаимодействия металлических расплавов с керамическими материалами. /Пр/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2		КМ1	
2.12	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	3	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.13	Альтернативные программные комплексы для расчетов сложных химических равновесий и термодинамического моделирования. /Лек/	3	1	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.14	Альтернативные программные комплексы для расчетов сложных химических равновесий и термодинамического моделирования. /Пр/	3	1	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			Р1
2.15	Выполнение индивидуальных заданий. Подготовка к экзамену /Ср/	3	14	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			

### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

#### 5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
--------	-------------------------	------------------------------------	------------------------

КМ1	тест	ОПК-4-31;ОПК-4-У1;ОПК-4-В1;ОПК-2-31;ОПК-2-У1;ОПК-2-В1;ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-2-31;ПК-2-У1;ПК-2-В1	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Термодинамические функции.</li> <li>2. Критерии направленности процессов и равновесия в термодинамических системах.</li> <li>3. Закон действующих масс, константа равновесия.</li> <li>4. Сложные химические равновесия.</li> <li>5. Выбор независимых реакций.</li> <li>6. Применение правила фаз Гиббса к анализу сложных химических равновесий.</li> <li>7. Принципы расчета сложных химических равновесий по закону действующих масс.</li> <li>8. Принципы расчета сложных химических равновесий по экстремуму критериев равновесия в термодинамических системах.</li> <li>9. Общие требования к программным комплексам для расчета сложных химических равновесий и проведения термодинамического моделирования.</li> </ol>
-----	------	--	---

### 5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)

Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
P1	Домашнее задание	ОПК-4-31;ОПК-4-У1;ОПК-4-В1;ОПК-2-31;ОПК-2-У1;ОПК-2-В1;ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-2-31;ПК-2-У1;ПК-2-В1	<p>Домашние задания</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Расчет равновесного состава системы С-Н-О по закону действующих масс.</li> <li>2. Расчет равновесного состава системы Fe-С-Н-О по закону действующих масс.</li> <li>3. Расчеты равновесного состава систем Fe-С-Н-О на программном комплексе ИВТАНТЕРМО.</li> <li>4. Термодинамическое моделирование разложения и диссоциации соединений.</li> <li>5. Термодинамическое моделирование взаимодействия металлических расплавов с керамическими материалами.</li> <li>6. Термодинамическое моделирование композиционных материалов</li> </ol>

### 5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)

1. Термодинамические функции. Критерии направленности процессов и равновесия в термодинамических системах. Закон действующих масс, константа равновесия.
2. Сложные химические равновесия. Выбор независимых реакций. Применение правила фаз Гиббса к анализу сложных химических равновесий.
3. Принципы расчета сложных химических равновесий по закону действующих масс.
4. Принципы расчета сложных химических равновесий по экстремуму критериев равновесия в термодинамических системах. Общие требования к программным комплексам для расчета сложных химических равновесий и проведения ТДМ.
5. Программный комплекс ИВТАНТЕРМО: общая структура базовых программ, расчеты параметров индивидуальных веществ и реакций, расчеты равновесного состава, визуализация результатов расчетов.
6. Общие принципы и этапы ТДМ. Анализ результатов ТДМ. Учет кинетических запретов при проведении ТДМ.
7. Особенности ТДМ металлургических задач: восстановление из шлака, образование металлических растворов и фаз сложного состава.
8. Дополнительные программные средства комплекса ИВТАНТЕРМО их применение при ТДМ задач ресурсосбережения и экологии в металлургии. Альтернативные программные комплексы для расчетов сложных химических равновесий и ТДМ.

### 5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)

Оценка «отлично» - обучающийся показывает глубокие, исчерпывающие знания в объеме пройденной программы, уверенно применяет полученные знания на практике, грамотно и логически стройно излагает материал при ответе, умеет формулировать выводы из изложенного теоретического материала, знает дополнительно рекомендованную литературу.

Оценка «хорошо» - обучающийся показывает твердые и достаточно полные знания в объеме пройденной программы, допускает незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, четко излагает материал.

Оценка «удовлетворительно» - обучающийся показывает знания в объеме пройденной программы, ответы излагает хотя и с ошибками, но уверенно исправляет их после дополнительных и наводящих вопросов.

Оценка «неудовлетворительно» - обучающийся допускает грубые ошибки в ответе, не понимает сущности излагаемого вопроса, не умеет применять знания для решения простых задач, дает неполные ответы на дополнительные и наводящие вопросы.

Оценка «неявка» – обучающийся на экзамен не явился.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

### 6.1. Рекомендуемая литература

<b>6.1.1. Основная литература</b>				
	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Жуховицкий А. А., Шварцман Л. А.	Физическая химия: Учебник для студ. металлург. спец. вузов	Библиотека МИСиС	М.: Металлургия, 1987
<b>6.1.2. Дополнительная литература</b>				
	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Белашенко Д. К.	Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2005
<b>6.1.3. Методические разработки</b>				
	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Белашенко Д. К.	Компьютерные методы в физике и физической химии: лаб. практикум	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2012
<b>6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»</b>				
Э1	Портал Федеральных государственных образовательных стандартов [Электронный ресурс]. –		<a href="http://fgosvo.ru/fgosvo/92/91/4/88">http://fgosvo.ru/fgosvo/92/91/4/88</a> .	
Э2	Российское образование: федеральный портал [Электронный ресурс]. –		<a href="http://www.edu.ru/">http://www.edu.ru/</a> (Ссылки на внешний сайт.)Ссылки на внешний сайт..	
<b>6.3 Перечень программного обеспечения</b>				
П.1	ИВТАН ТЕРМО			
П.2	Лицензии ПО Windows Server CAL ALNG LicSAPk MVL DvcCAL, ПО WinEDUA3 ALNG SubsVL MVL PerUsr и PerUsr			
П.3	ESET NOD32 Antivirus			
П.4	Win Pro 10 32-bit/64-bit			
<b>6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных</b>				
И.1	Каталог Российской государственной библиотеки (РГБ) [Электронный ресурс]. – <a href="http://www.aleph.rsl.ru">http://www.aleph.rsl.ru</a> (Ссылки на внешний сайт.)Ссылки на внешний сайт..			

<b>7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ</b>		
Ауд.	Назначение	Оснащение
Любой корпус Мультимедийная	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и/или для проведения практических занятий:	комплект учебной мебели до 36 мест для обучающихся, мультимедийное оборудование, магнитно-маркерная доска, рабочее место преподавателя, ПКс доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus
A-323	Компьютерный класс	комплект учебной мебелипакет на 12 рабочих мест с компьютерами, принтер, лицензионных программ MS Office
Читальный зал №3 (Б)		комплект учебной мебели на 44 места для обучающихся, МФУ Xerox VersaLink B7025 с функцией масштабирования текстов и изображений, 8 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus.

<b>8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ</b>
<p>Для лекционных занятий используются мультимедийные аудитории с возможностью демонстрации результатов расчетов и ТДМ рассматриваемых реакций и процессов; демонстрации работы программного комплекса ИВТАНТЕРМО. Активно используется метод обсуждения конкретных задач, возникающих при исследовании. Практически на каждой лекции инициируется обсуждение возможного способа решения задачи.</p> <p>Систематическое овладение материалом в течение учебного семестра во время лекционных и лабораторных занятий. При затруднениях по самостоятельному освоению материала пользоваться консультациями преподавателя.</p> <p>Выполнение контрольных мероприятий строго в соответствии с графиком учебного процесса.</p>

Студенты, имеющие семестровые задолженности (не выполненные лабораторные работы с учетом обработки результатов) к экзамену не допускаются.