

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 03.10.2023 10:22:40

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

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

18.04.01 Химическая технология

Профиль

Технология наноструктурированных композиционных материалов

Квалификация

Магистр

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

3 ЗЕТ

Часов по учебному плану

108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 2

аудиторные занятия

32

самостоятельная работа

76

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	2 (1.2)		Итого	
	УП	РП	УП	РП
Неделя	16			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	16	16	16	16
Практические	16	16	16	16
Итого ауд.	32	32	32	32
Контактная работа	32	32	32	32
Сам. работа	76	76	76	76
Итого	108	108	108	108

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 18.04.01 Химическая технология (приказ от 30.11.2022 г. № 636 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

18.04.01 Химическая технология, 18.04.01 МХТ-23-1.plx Технология наноструктурированных композиционных материалов, утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

18.04.01 Химическая технология, Технология наноструктурированных композиционных материалов, утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.06.2023, протокол № 5-23

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра физической химии

Протокол от 21.06.2022 г., №11-21/22

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.03
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Дифракционные методы исследования	
2.1.2	Неравновесные конденсированные системы, часть 1	
2.1.3	Системы хранения и преобразования энергии	
2.1.4	Электрохимические процессы	
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Современные химические технологии	
2.2.2	Преддипломная практика	
2.2.3	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ПК-1: Способен проводить контроль технологических параметров и режимов синтеза полимерных и композиционных материалов	
Знать:	
ПК-1-31 задачи научных исследований в области получения и исследования наноматериалов	
Уметь:	
ПК-1-У1 ставить конкретные задачи научных исследований в области получения и исследования наноматериалов и проводить испытания наноструктурированных композиционных материалов	
Владеть:	
ПК-1-В1 методами научных исследований в области получения и исследования наноматериалов	

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
	Раздел 1. Расчеты сложных химических равновесий							
1.1	Введение. Термодинамические функции. Критерии направленности процессов и равновесия. Закон действующих масс, константа равновесия. /Лек/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
1.2	Расчет равновесного состава системы С-Н-О по закону действующих масс. /Пр/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
1.3	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			

1.4	Сложные химические равновесия. Выбор независимых реакций. /Лек/	2	1	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.5	Расчет равновесного состава системы С-Н-О по закону действующих масс. /Пр/	2	1	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.6	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.7	Применение правила фаз Гиббса для анализа сложных равновесий. /Лек/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.8	Расчет равновесного состава системы Fe-С-Н-О по закону действующих масс. /Пр/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.9	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.10	Расчеты сложных химических равновесий по закону действующих масс. Ограничения метода. /Лек/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.11	Расчет равновесного состава системы Fe-С-Н-О по закону действующих масс. /Пр/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.12	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	2	8	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
	Раздел 2. Методы термодинамического моделирования							
2.1	Принципы расчета сложных химических равновесий по экстремуму функций состояния. Общие требования к программным комплексам. /Лек/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.2	Расчеты равновесного состава систем Fe-С-Н-О на программном комплексе ИВТАНТЕРМО /Пр/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.3	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	2	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.4	Программный комплекс ИВТАНТЕРМО: структура базовых программ, расчеты параметров веществ и реакций, визуализация результатов расчетов. /Лек/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.5	Расчеты равновесного состава систем Fe-С-Н-О на программном комплексе ИВТАНТЕРМО. /Пр/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.6	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	2	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			

2.7	Термодинамическое моделирование разложения и диссоциации соединений /Пр/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.8	Общие принципы и этапы термодинамического моделирования . Анализ результатов. /Лек/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.9	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	2	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.10	Учет кинетических запретов при проведении термодинамического моделирования . Дополнительные программные средства комплекса ИВТАНТЕРМО. /Лек/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.11	Термодинамическое моделирование взаимодействия металлических расплавов с керамическими материалами. /Пр/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2		КМ1	
2.12	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	2	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.13	Альтернативные программные комплексы для расчетов сложных химических равновесий и термодинамического моделирования . /Лек/	2	1	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.14	Альтернативные программные комплексы для расчетов сложных химических равновесий и термодинамического моделирования . /Пр/	2	1	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			Р1
2.15	Выполнение индивидуальных заданий. Подготовка к экзамену /Ср/	2	14	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-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	ПК-1-31;ПК-1-У1;ПК-1-В1	<ol style="list-style-type: none"> 1. Термодинамические функции. 2. Критерии направленности процессов и равновесия в термодинамических системах. 3. Закон действующих масс, константа равновесия. 4. Сложные химические равновесия. 5. Выбор независимых реакций. 6. Применение правила фаз Гиббса к анализу сложных химических равновесий. 7. Принципы расчета сложных химических равновесий по закону действующих масс. 8. Принципы расчета сложных химических равновесий по экстремуму критериев равновесия в термодинамических системах. 9. Общие требования к программным комплексам для расчета сложных химических равновесий и проведения термодинамического моделирования.
-----	------	-------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

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		<p>Домашние задания</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Расчет равновесного состава системы С-Н-О по закону действующих масс. 2. Расчет равновесного состава системы Fe-С-Н-О по закону действующих масс. 3. Расчеты равновесного состава систем Fe-С-Н-О на программном комплексе ИВТАНТЕРМО. 4. Термодинамическое моделирование разложения и диссоциации соединений. 5. Термодинамическое моделирование взаимодействия металлических расплавов с керамическими материалами. 6. Термодинамическое моделирование композиционных материалов

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

6.1.1. Основная литература

	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

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Белашенко Д. К.	Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2005

6.1.3. Методические разработки

	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

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	Портал Федеральных государственных образовательных стандартов [Электронный ресурс]. –	http://fgosvo.ru/fgosvo/92/91/4/88 .
Э2	Российское образование: федеральный портал [Электронный ресурс]. –	http://www.edu.ru/ (Ссылки на внешний сайт.)Ссылки на внешний сайт..

6.3 Перечень программного обеспечения

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

6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

И.1	Каталог Российской государственной библиотеки (РГБ) [Электронный ресурс]. – http://www.aleph.rsl.ru (Ссылки на внешний сайт.)Ссылки на внешний сайт..
-----	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

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
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.
А-311	Компьютерный класс	комплект учебной мебели на 15 рабочих мест, оснащенных компьютерами с подключением к сети «Интернет»(14 шт) и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета, доска, проектор

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

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.

Систематическое овладение материалом в течение учебного семестра во время лекционных и лабораторных занятий. При

затруднениях по самостоятельному освоению материала пользоваться консультациями преподавателя.
Выполнение контрольных мероприятий строго в соответствии с графиком учебного процесса.
Студенты, имеющие семестровые задолженности (не выполненные лабораторные работы с учетом обработки результатов) к экзамену не допускаются.