

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 16.11.2023 17:26:27

Уникальный идентификатор:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования**

**«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»**

## Рабочая программа дисциплины (модуля)

# Термохимия материалов и термодинамическое моделирование

Закреплена за подразделением

Научно-исследовательский центр "Термохимия материалов"

Направление подготовки

00.06.00 Аспирантура

Профиль

Квалификация

**Исследователь. Преподаватель-исследователь**

Форма обучения

**очная**

Общая трудоемкость

**3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану

108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет 6

аудиторные занятия

51

самостоятельная работа

57

### Распределение часов дисциплины по семестрам

| Семестр<br>(<Курс>.<Семестр на<br>курсе>) | 6 (3.2)      |     | Итого |     |
|---|--------------|-----|-------|-----|
|   | Неделя<br>20 |     |       |     |
| Вид занятий                               | УП           | РП  | УП    | РП  |
| Лекции                                    | 17           | 17  | 17    | 17  |
| Практические                              | 34           | 34  | 34    | 34  |
| Итого ауд.                                | 51           | 51  | 51    | 51  |
| Контактная работа                         | 51           | 51  | 51    | 51  |
| Сам. работа                               | 57           | 57  | 57    | 57  |
| Итого                                     | 108          | 108 | 108   | 108 |

Программу составил(и):

*д.х.н., Директор, Хван Александра Вячеславовна; PhD, Старший научный сотрудник, Кондратьев Александр Владимирович; к.т.н., с.н.с., Чеверикин Владимир Викторович*

Рабочая программа

### **Термохимия материалов и термодинамическое моделирование**

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов) (приказ от 17.03.2022 г. № 2-22)

Составлена на основании учебного плана:

- 1.3.8 Физика конденсированного состояния
- 1.3.11 Физика полупроводников
- 1.4.2 Аналитическая химия
- 2.2.3 Технология и оборудование для производства материалов и приборов электронной техники
- 2.4.2 Электротехнические комплексы и системы
- 2.5.7 Технологии и машины обработки давлением
- 2.6.1 Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов
- 2.6.2 Metallургия черных, цветных и редких металлов
- 2.6.3 Литейное производство
- 2.6.4 Обработка металлов давлением
- 2.6.5 Порошковая металлургия и композиционные материалы
- 2.6.6 Нанотехнологии и наноматериалы
- 2.6.9 Технология электрохимических процессов и защита от коррозии
- 2.6.12 Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ
- 2.6.17 Материаловедение
- 2.8.3 Горнопромышленная и нефтегазопромысловая геология, геофизика, маркшейдерское дело и геометрия недр
- 2.8.6 Геомеханика, разрушение горных пород, рудничная аэрогазодинамика и горная теплофизика
- 2.8.7 Теоретические основы проектирования горнотехнических систем
- 2.8.8 Геотехнология, горные машины
- 2.8.9 Обогащение полезных ископаемых, АСП-22-4.plx , утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

- 1.3.8 Физика конденсированного состояния
- 1.3.11 Физика полупроводников
- 1.4.2 Аналитическая химия
- 2.2.3 Технология и оборудование для производства материалов и приборов электронной техники
- 2.4.2 Электротехнические комплексы и системы
- 2.5.7 Технологии и машины обработки давлением
- 2.6.1 Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов
- 2.6.2 Metallургия черных, цветных и редких металлов
- 2.6.3 Литейное производство
- 2.6.4 Обработка металлов давлением
- 2.6.5 Порошковая металлургия и композиционные материалы
- 2.6.6 Нанотехнологии и наноматериалы
- 2.6.9 Технология электрохимических процессов и защита от коррозии
- 2.6.12 Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ
- 2.6.17 Материаловедение
- 2.8.3 Горнопромышленная и нефтегазопромысловая геология, геофизика, маркшейдерское дело и геометрия недр
- 2.8.6 Геомеханика, разрушение горных пород, рудничная аэрогазодинамика и горная теплофизика
- 2.8.7 Теоретические основы проектирования горнотехнических систем
- 2.8.8 Геотехнология, горные машины
- 2.8.9 Обогащение полезных ископаемых, , утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

**Научно-исследовательский центр "Термохимия материалов"**

Протокол от 21.06.2023 г., №41

Руководитель подразделения Директор к.т.н. Хван Александра Вячеславовна

### 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

|     |   |
|-----|---|
| 1.1 | Цель курса ознакомить аспирантов с использованием термодинамического моделирования в реальных многокомпонентных химических системах, а также показать применения данных методов для решения различных научно исследовательских и производственных задач, в таких процессах как кристаллизация и литье, термическая обработка, экстракция, модифицирование, сварка, пайка. |
| 1.2 | В рамках курса будут прочтены лекции и проведены практические занятия по работе с программным обеспечением. Особое внимание в рамках курса будет уделено пониманию материалов и их поведению в процессе производства и обработки, а также тому какие могут быть предприняты шаги по оптимизации процессов и минимизации затрат.   |
| 1.3 | Все примеры, используемые в курсе, будут относиться к реальным системам с четким приложением к промышленным задачам или к взаимодействию материалов с окружающей средой. Более этого у аспирантов будет возможность проанализировать, как влияют изменения в параметрах (таких как температура, давление, и состав) на результаты расчетов.                               |

### 2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

|            |   |       |
|------------|---|-------|
| Блок ОП:   |   | 2.1.2 |
| <b>2.1</b> | <b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>  |       |
| 2.1.1      | Академическое письмо  |       |
| 2.1.2      | Иностранный язык  |       |
| 2.1.3      | История и философия науки   |       |
| <b>2.2</b> | <b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b> |       |
| 2.2.1      | Аналитическая химия   |       |
| 2.2.2      | Геомеханика, разрушение горных пород, рудничная аэрогазодинамика и горная теплофизика                                 |       |
| 2.2.3      | Геомеханика, разрушение горных пород, рудничная аэрогазодинамика и горная теплофизика                                 |       |
| 2.2.4      | Геотехнология, горные машины  |       |
| 2.2.5      | Горнопромышленная и нефтегазопромысловая геология, геофизика, маркшейдерское дело и геометрия недр                    |       |
| 2.2.6      | Горнопромышленная и нефтегазопромысловая геология, геофизика, маркшейдерское дело и геометрия недр                    |       |
| 2.2.7      | Литейное производство   |       |
| 2.2.8      | Материаловедение  |       |
| 2.2.9      | Материаловедение  |       |
| 2.2.10     | Материаловедение  |       |
| 2.2.11     | Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов   |       |
| 2.2.12     | Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов   |       |
| 2.2.13     | Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов   |       |
| 2.2.14     | Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов   |       |
| 2.2.15     | Металлургия черных, цветных и редких металлов   |       |
| 2.2.16     | Металлургия черных, цветных и редких металлов   |       |
| 2.2.17     | Металлургия черных, цветных и редких металлов   |       |
| 2.2.18     | Нанотехнологии и наноматериалы  |       |
| 2.2.19     | Нанотехнологии и наноматериалы  |       |
| 2.2.20     | Нанотехнологии и наноматериалы  |       |
| 2.2.21     | Обогащение полезных ископаемых  |       |
| 2.2.22     | Обработка металлов давлением  |       |
| 2.2.23     | Порошковая металлургия и композиционные материалы   |       |
| 2.2.24     | Порошковая металлургия и композиционные материалы   |       |
| 2.2.25     | Теоретические основы проектирования горнотехнических систем   |       |
| 2.2.26     | Технологии и машины обработки давлением   |       |
| 2.2.27     | Технологии и машины обработки давлением   |       |
| 2.2.28     | Технология и оборудование для производства материалов и приборов электронной техники                                  |       |
| 2.2.29     | Технология и оборудование для производства материалов и приборов электронной техники                                  |       |
| 2.2.30     | Технология и оборудование для производства материалов и приборов электронной техники                                  |       |
| 2.2.31     | Технология электрохимических процессов и защита от коррозии   |       |
| 2.2.32     | Физика конденсированного состояния  |       |
| 2.2.33     | Физика конденсированного состояния  |       |



|   |
|---|
| <b>Знать:</b>   |
| A-2-33 Структуру термодинамических баз данных   |
| A-2-32 Основные принципы и структуру программного обеспечения для термодинамического моделирования и расчетов   |
| <b>A-3: Способность проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы по заданной тематике и оформлять их результаты</b>                         |
| <b>Знать:</b>   |
| A-3-31 Принципы разработки технического задания и программ проведения расчетно-теоретических и экспериментальных работ  |
| A-3-32 Принципы применения термодинамического моделирования с использованием специализированного ПО   |
| <b>A-2: Способность проводить научный эксперимент и анализ его результата</b>   |
| <b>Знать:</b>   |
| A-2-31 Проблемы материаловедения на основе термодинамических данных   |
| <b>A-1: Способность к научному поиску и применению результатов научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок при самостоятельных исследованиях</b> |
| <b>Знать:</b>   |
| A-1-32 Основные принципы выбора термодинамических баз данных для проведения расчетов  |
| A-1-31 Принципы формирования научных исследований на основе фундаментальных наук  |
| <b>A-3: Способность проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы по заданной тематике и оформлять их результаты</b>                         |
| <b>Уметь:</b>   |
| A-3-У1 Разрабатывать технические задания и программы проведения расчетно-теоретических и экспериментальных работ  |
| A-3-У2 Применять полученные знания фундаментальных наук, в частности по термодинамике, для проведения научных исследований и преподавательской деятельности       |
| <b>A-2: Способность проводить научный эксперимент и анализ его результата</b>   |
| <b>Уметь:</b>   |
| A-2-У3 Работать на современном программном обеспечении для проведения термодинамических расчетов  |
| <b>A-1: Способность к научному поиску и применению результатов научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок при самостоятельных исследованиях</b> |
| <b>Уметь:</b>   |
| A-1-У1 Использовать полученные результаты термодинамических расчетов для решения различных промышленных и научно-исследовательских задач                          |
| <b>A-2: Способность проводить научный эксперимент и анализ его результата</b>   |
| <b>Уметь:</b>   |
| A-2-У2 Реализовать интегрированные знания для создания новых научных результатов с использованием ПО по термодинамическому моделированию                          |
| A-2-У1 Использовать в своей деятельности термодинамическое моделирование с использованием специализированного ПО  |
| <b>A-3: Способность проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы по заданной тематике и оформлять их результаты</b>                         |
| <b>Владеть:</b>   |
| A-3-В2 навыками применения знания фундаментальных наук, в частности по термодинамике, для проведения научных исследований и преподавательской деятельности        |
| A-3-В1 навыками разработки технических заданий и программ для проведения расчетно-теоретических и экспериментальных работ   |
| <b>A-2: Способность проводить научный эксперимент и анализ его результата</b>   |
| <b>Владеть:</b>   |
| A-2-В1 навыками работы со стандартными пакетами программ для решения проблем материаловедения при помощи ПО по термодинамическому моделированию                   |
| <b>A-1: Способность к научному поиску и применению результатов научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок при самостоятельных исследованиях</b> |
| <b>Владеть:</b>   |
| A-1-В1 навыками работы со стандартными пакетами программ для проведения термодинамических расчетов, широко  |

используемыми на промышленных предприятиях, а также стандартными коммерческими базами данных

**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. Введение в вычислительную термодинамику и термодинамическое моделирование</b>  |                |       |   |   |            |    |                    |
| 1.1         | Введение в вычислительную термодинамику и термодинамическое моделирование /Лек/   | 6              | 2     | A-2-31 A-3-31<br>A-3-32   | Л1.2 Л1.1<br>Л1.1<br>Л1.1Л2.1Л3.1<br>Л3.4 Л3.5<br>Л3.6<br>Э1 Э2 |            |    |                    |
|             | <b>Раздел 2. Виды программного обеспечения и принцип их работы</b>  |                |       |   |   |            |    |                    |
| 2.1         | Виды программного обеспечения и принцип их работы /Лек/   | 6              | 2     | A-1-32 A-2-32<br>A-3-32   | Л1.1Л1.2<br>Э1 Э2   |            |    |                    |
| 2.2         | Виды программного обеспечения и принцип их работы /Ср/  | 6              | 6     | A-1-31 A-2-32<br>A-2-У1 A-3-31<br>A-3-32 A-3-У2<br>A-3-В1                         | Л1.1Л1.1Л2.1<br>Л1.1 Л3.9<br>Э1 Э2                              |            |    | Р6                 |
| 2.3         | Построение базы данных для 2-х компонентных систем на основании известных параметров /Пр/   | 6              | 6     | A-1-В1 A-2-В1<br>A-3-У2 A-3-В2  | Л1.1<br>Л1.1Л1.1Л2.1<br>Э1 Э2                                   |            |    | Р1                 |
|             | <b>Раздел 3. Термодинамические базы данных</b>  |                |       |   |   |            |    |                    |
| 3.1         | Термодинамические базы данных /Лек/   | 6              | 4     | A-1-32 A-2-31<br>A-2-33 A-3-31<br>A-3-32  | Л1.1Л1.1Л3.2<br>Л2.1 Л1.1<br>Э1 Э2                              |            |    |                    |
| 3.2         | Термодинамические базы данных /Ср/  | 6              | 17    | A-1-31 A-1-У1<br>A-1-В1 A-2-31<br>A-2-32 A-2-33<br>A-2-У1 A-2-У3<br>A-3-31 A-3-32 | Л1.2Л1.1Л1.1<br>Э1 Э2   |            |    | Р7                 |
| 3.3         | Простые термодинамические расчеты с использованием различных модулей ПО ThermoCalc, MTDATA /Пр/   | 6              | 8     | A-1-У1 A-1-В1<br>A-2-У1 A-2-У2<br>A-2-У3 A-2-В1<br>A-3-В2                         | Л1.1Л1.1<br>Э1 Э2   |            |    | Р2                 |
|             | <b>Раздел 4. Термодинамические данные для различных классов материалов: сплавы, соли, оксиды (шлаки), газы, интерметаллиды, водные растворы</b> |                |       |   |   |            |    |                    |
| 4.1         | Термодинамические данные для различных классов материалов: сплавы, соли, оксиды (шлаки), газы, интерметаллиды, водные растворы /Лек/            | 6              | 5     | A-1-31 A-1-32<br>A-2-31 A-2-33<br>A-3-31 A-3-32                                   | Л1.1Л3.6Л1.1<br>Э1 Э2   |            |    |                    |

|   |  |   |    |  |                                       |  |     |    |  |
|---|--|---|----|--|---------------------------------------|--|-----|----|--|
| 4.2   | Термодинамические данные для различных классов материалов: сплавы, соли, оксиды (шлаки), газы, интерметаллиды, водные растворы /Ср/  | 6 | 17 | A-1-32 A-1-Y1<br>A-1-B1 A-2-31<br>A-2-32 A-2-33<br>A-2-Y1 A-2-<br>Y2 A-2-Y3 A-3<br>-31 A-3-32 A-3<br>-Y1 A-3-Y2                  | Л1.1Л3.5<br>Л3.6<br>Л1.1Л1.1<br>Э1 Э2 |  |     | P8 |  |
| 4.3   | Решение сложных задач, включая реальные материалы и сложные системы: расчеты для металлических систем с приложением к разработке новых материалов, а также оптимизации составов и режимов существующих сплавов. /Пр/ | 6 | 8  | A-2-Y1 A-2-<br>Y2 A-2-Y3 A-2<br>-B1 A-3-Y1 A-<br>3-Y2 A-3-B1 A<br>-3-B2  | Л1.1Л1.1Л3.<br>1 Л3.6<br>Э1 Э2        |  |     | P3 |  |
| 4.4   | Построение термодинамической базы данных /Пр/  | 6 | 6  | A-1-Y1 A-1-B1<br>A-2-Y1 A-2-<br>Y2 A-2-Y3 A-2<br>-B1   | Л1.1Л2.1Л1.<br>1 Л1.1<br>Э1 Э2        |  | КМ1 | P4 |  |
| <b>Раздел 5. Использование термодинамических расчетов в моделировании термофизических свойств</b> |  |   |    |  |                                       |  |     |    |  |
| 5.1   | Использование термодинамических расчетов в моделировании термофизических свойств /Лек/   | 6 | 4  | A-1-31 A-1-32<br>A-2-32 A-2-33<br>A-3-31 A-3-32  | Л1.1Л2.1Л3.<br>5<br>Э1 Э2             |  |     |    |  |
| 5.2   | Использование термодинамических расчетов в моделировании термофизических свойств /Ср/  | 6 | 17 | A-1-31 A-1-32<br>A-1-Y1 A-1-B1<br>A-2-31 A-2-32<br>A-2-33 A-2-Y1<br>A-2-Y2 A-2-<br>Y3 A-2-B1 A-3<br>-31 A-3-32 A-3<br>-B1 A-3-B2 | Л3.2<br>Л3.9Л2.1Л3.<br>5<br>Э1 Э2     |  |     | P9 |  |
| 5.3   | Использование термодинамических расчетов в моделировании термофизи-ческих свойств /Пр/   | 6 | 6  | A-1-Y1 A-1-B1<br>A-2-Y1 A-2-<br>Y2 A-2-Y3 A-2<br>-B1 A-3-Y1 A-<br>3-Y2 A-3-B1 A<br>-3-B2   | Л3.2<br>Л3.9Л2.1Л3.<br>4<br>Э1 Э2     |  |     | P5 |  |

### 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   | Коллоквиум      | A-3-31;A-3-32;A-3-У1;A-3-У2;A-3-В1;A-3-В2;A-2-31;A-2-32;A-2-33;A-2-У1;A-2-У2;A-2-У3;A-2-В1;A-1-31;A-1-32;A-1-У1;A-1-В1 | <p>Вопросы к коллоквиуму</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Основные понятия химической термодинамики: термодинамическая система, термодинамические переменные (интенсивные и экстенсивные) и процессы, состояния системы, фаза, гетерогенная и гомогенные системы, компонент, составляющие, раствор, подрешетка.</li> <li>2. Первый закон термодинамики (изолированная, закрытая и открытая система). Запись в интегральной и дифференциальной форме. Функции состояния и функции перехода.</li> <li>3. Понятие термохимии. Энтальпия. Закон Гесса. Следствия из закона Гесса. Стандартные состояния. Стандартные теплоты образования веществ и стандартные теплоты химических реакций. Методы экспериментального измерения энтальпии.</li> <li>4. Понятие теплоемкости. Взаимосвязь между <math>C_p</math> и <math>C_v</math> для идеального газа и конденсированных фаз. Закон Дебая. Закон Эйнштейна. Приближенные методы расчетов теплоемкостей. Методы экспериментального определения теплоемкости. Закон Кирхгофа.</li> <li>5. Второй закон термодинамики. Формулировка Клаузиуса, Томпсона, Карно. Понятие энтропии. Энтропия, как функция состояния. Связь энтропии с приведенной теплотой. Абсолютная температура. Температурные шкалы. Реперные точки</li> <li>6. Третий закон термодинамики. Изменение энтропии при фазовых переходах, смешении идеальных газов, химических реакциях.</li> <li>7. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Естественные переменные. Соотношения Максвелла.</li> <li>8. Термодинамические потенциалы как результат преобразования Лежандра внутренней энергии. Условия равновесия, записанные через различные потенциалы, <math>G, F, H, U</math>. Критерии направленности процессов.</li> <li>9. Теорема Эйлера. Термодинамические потенциалы, как однородные функции первой степени естественных переменных и чисел молей. Уравнение Гиббса-Дюгема, его интегрирование. Интегральные и парциальные величины. Способы расчета парциальных свойств. Избыточные величины.</li> <li>10. Термодинамические модели растворов (полиномиальные модели, модели локального состава, групповые модели растворов, подрешеточная модель). Условия термодинамической устойчивости раствора.</li> <li>11. Химический потенциал, различные определения этого понятия. Способы записи химического потенциала для идеального и реального газов, жидкой и твердой фазы. Стандартные состояния для химического потенциала в различных фазах. Зависимость стандартных значений химических потенциалов от температуры и давления. Параметры стабильности.</li> <li>12. Расчет фазовых равновесий системы из общего условия равновесия. Связь диаграмм <math>G-x</math> с диаграммами <math>T-x</math> (<math>p=\text{const}</math>) для двухкомпонентных систем. Системы эвтектического типа; с неограниченной растворимостью в твердом и жидком состоянии; расслаивание; системы с конгруэнтно плавящимся соединением.</li> <li>13. Частные условия равновесия в двухкомпонентной системе. Зависимость растворимости от температуры (Уравнение Шредера). Вывод правила фаз Гиббса.</li> </ol> |
| <b>5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)</b> |                 |  |   |
| Код работы  | Название работы | Проверяемые индикаторы компетенций   | Содержание работы   |

|    |   |   |   |
|----|---|---|---|
| P1 | Практическая работа №1 "Построение базы данных для 2-х компонентных систем на основании известных параметров"   | A-3-У2;A-3-В2;A-2-В1;A-1-В1   | Построение базы данных для 2-х компонентных систем на основании известных параметров  |
| P2 | Практическая работа №2 "Простые термодинамические расчеты с использованием различных модулей ПО ThermoCalc, MTDATA"   | A-3-В2;A-2-У1;A-2-У2;A-2-У3;A-1-У1;A-1-В1;A-2-В1                      | Простые термодинамические расчеты с использованием различных модулей ПО ThermoCalc, MTDATA  |
| P3 | Практическая работа №3 "Решение сложных задач, включая реальные материалы и сложные системы: расчеты для металлических систем с приложением к разработке новых материалов, а также оптимизации составов и режимов существующих сплавов" | A-3-У1;A-3-У2;A-3-В1;A-3-В2;A-2-У1;A-2-У2;A-2-В1;A-2-У3               | Решение сложных задач, включая реальные материалы и сложные системы: расчеты для металлических систем с приложением к разработке новых материалов, а также оптимизации составов и режимов существующих сплавов. |
| P4 | Практическая работа №4 "Построение термодинамической базы данных"   | A-1-У1;A-1-В1;A-2-У3;A-2-У2;A-2-У1;A-2-В1                             | Построение термодинамической базы данных  |
| P5 | Практическая работа №5 "Использование термодинамических расчетов в моделировании термофизических свойств"   | A-3-У1;A-3-У2;A-3-В1;A-3-В2;A-2-У1;A-2-У2;A-2-У3;A-2-В1;A-1-У1;A-1-В1 | Использование термодинамических расчетов в моделировании термофизических свойств  |
| P6 | Самостоятельная работа №1 "Виды программного обеспечения и принцип их работы"   | A-3-31;A-2-32;A-3-32;A-3-У2;A-3-В1;A-2-У1;A-1-31                      | Виды программного обеспечения и принцип их работы   |
| P7 | Самостоятельная работа №2 "Термодинамические базы данных"   | A-3-31;A-3-32;A-2-31;A-2-32;A-1-31;A-2-33;A-2-У1;A-2-У3;A-1-У1;A-1-В1 | Термодинамические базы данных   |

|    |  |  |  |
|----|--|--|--|
| P8 | Самостоятельная работа №3<br>"Термодинамические данные для различных классов материалов: сплавы, соли, оксиды (шлаки), газы, интерметаллиды, водные растворы " | A-3-31;A-3-32;A-2-31;A-2-32;A-2-33;A-1-32;A-3-У1;A-3-У2;A-2-У1;A-2-У2;A-2-У3;A-1-У1;A-1-В1               | Термодинамические данные для различных классов материалов: сплавы, соли, оксиды (шлаки), газы, интерметаллиды, водные растворы |
| P9 | Самостоятельная работа №4<br>"Использование термодинамических расчетов в моделировании термофизических свойств"  | A-3-31;A-3-32;A-2-31;A-2-32;A-2-33;A-1-31;A-1-32;A-1-У1;A-1-В1;A-2-В1;A-2-У3;A-2-У2;A-2-У1;A-3-В1;A-3-В2 | Использование термодинамических расчетов в моделировании термофизических свойств   |

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

Экзамен не предусмотрен

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

Обучающийся для получения зачета должен выполнить все работы, указанные в данном разделе.

Оценка формируется как среднеарифметическая из оценок за текущие самостоятельные и практические работы.

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний аспиранта на самостоятельных и практических работах.

Предполагается следующая шкала оценок:

- а) «отлично» – студент показывает глубокие, исчерпывающие знания в объеме пройденной программы, уверенно действует по применению полученных знаний на практике, грамотно и логически стройно излагает материал при ответе, умеет формулировать выводы из изложенного теоретического материала, знает дополнительно рекомендованную литературу;
- б) «хорошо» – студент показывает твердые и достаточно полные знания в объеме пройденной программы, допускает незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильно действует по применению знаний на практике, четко излагает материал;
- в) «удовлетворительно» – студент показывает знания в объеме пройденной программы, ответы излагает хотя и с ошибками, но уверенно исправляемыми после дополнительных и наводящих вопросов, правильно действует по применению знаний на практике;
- г) «неудовлетворительно» – студент допускает грубые ошибки в ответе, не понимает сущности излагаемого вопроса, не умеет применять знания на практике, дает неполные ответы на дополнительные и наводящие вопросы.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

### 6.1. Рекомендуемая литература

#### 6.1.1. Основная литература

|      | Авторы, составители                                       | Заглавие  | Библиотека             | Издательство, год      |
|------|---|---|------------------------|------------------------|
| Л1.1 | Белов Николай Александрович, Хван Александра Вячеславовна | Основы материаловедения: лаб. практикум: учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по напр. Metallurgy | Электронная библиотека | М.: Изд-во МИСиС, 2009 |

#### 6.1.2. Дополнительная литература

|      | Авторы, составители | Заглавие  | Библиотека             | Издательство, год   |
|------|---------------------|---|------------------------|---------------------|
| Л2.1 | Агеев Е. П.         | Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах: в вопросах и ответах: учебное пособие | Электронная библиотека | Москва: МЦНМО, 2005 |

#### 6.1.3. Методические разработки

|      | Авторы, составители              | Заглавие  | Библиотека       | Издательство, год    |
|------|----------------------------------|---|------------------|----------------------|
| Л3.1 | Жуховицкий А. А., Шварцман Л. А. | Краткий курс физической химии: учебник для металлург. спец. вузов | Библиотека МИСиС | М.: Metallurgy, 1979 |

|      | Авторы, составители  | Заглавие   | Библиотека             | Издательство, год      |
|------|--|--|------------------------|------------------------|
| ЛЗ.2 | Янюшкин Юрий Минеевич  | Теплофизические и рабочие свойства огнеупорных и теплоизоляционных материалов: учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по напр. 150400 - Metallurgy   | Электронная библиотека | М.: Изд-во МИСиС, 2014 |
| ЛЗ.3 | Путилов К. А.  | Термодинамика  | Библиотека МИСиС       | М.: Наука, 1971        |
| ЛЗ.4 | Жуховицкий А. А., Шварцман Л. А.   | Физическая химия: Учебник для студ. металлург. спец. вузов   | Библиотека МИСиС       | М.: Metallurgy, 1987   |
| ЛЗ.5 | Кузнецов Георгий Миронович, Барсуков Александр Дмитриевич, Истомина-Кастровский Владимир Владимирович, др., Кузнецов Георгий Миронович | Физика металлов: Разд.: Физические свойства металлов и сплавов: Лаб. практикум для студ. спец. 110500  | Библиотека МИСиС       | М.: Учеба, 2000        |
| ЛЗ.6 | Кузнецов Георгий Миронович, Новиков Илья Изриэлович  | Металловедение и рентгенография. Разд. Диаграммы состояния двухкомпонентных и трехкомпонентных систем: курс лекций   | Библиотека МИСиС       | М.: Учеба, 1977        |
| ЛЗ.7 | Падерин С. Н., Рыжонков Д. И., Серов Г. В., др.  | Термодинамика, кинетика и расчеты металлургических процессов = Thermodynamics, kinetics and calculations on metallurgical processes: учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по напр. 150100 - Metallurgy | Библиотека МИСиС       | М.: Изд-во МИСиС, 2010 |
| ЛЗ.8 | Поздняков Андрей Владимирович, Чеверикин Владимир Викторович   | Термодинамические расчеты и анализ фазовых диаграмм многокомпонентных систем: учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по напр. Metallurgy   | Библиотека МИСиС       | М.: Изд-во МИСиС, 2012 |
| ЛЗ.9 | Чибизова Светлана Игоревна, Шагохин Константин Станиславович, Бельский Анатолий Матвеевич  | Методы экспериментального исследования теплофизических процессов (N 3558): курс лекций   | Электронная библиотека | М.: [МИСиС], 2019      |

#### 6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

|    |                        |   |
|----|------------------------|---|
| Э1 | Описание ПО ThermoCalc | <a href="https://www.thermocalc.com/">https://www.thermocalc.com/</a> |
| Э2 | Описание ПО MTDATA     | <a href="http://mtdata-uk.com/">http://mtdata-uk.com/</a>             |

#### 6.3 Перечень программного обеспечения

|     |                      |
|-----|----------------------|
| П.1 | Microsoft Office     |
| П.2 | ThermoCalc           |
| П.3 | MTDATA               |
| П.4 | ESET NOD32 Antivirus |

#### 6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

|     |   |
|-----|---|
| И.1 | SpringerMaterials ( <a href="https://materials.springer.com/">https://materials.springer.com/</a> ) |
|-----|---|

### 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

| Ауд. | Назначение | Оснащение |
|------|------------|-----------|
|------|------------|-----------|

|     |   |   |
|-----|---|---|
| 314 | Аудитория для самостоятельной работы студентов:                                       | комплект учебной мебели на 7 рабочих мест, доска  |
| 313 | Аудитория для проведения лекций, семинаров, для самостоятельной работы студентов:     | комплект учебной мебели на 17 рабочих мест, оборудованных персональными компьютерами с подключением к сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета, проектор, экран, доска |
| 305 | Аудитория для проведения занятий семинарского типа, самостоятельной работы студентов: | компьютер с подключением к сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета, проектор, экран, доска, комплект учебной мебели на 2 рабочих места                                |

## 8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Дисциплина требует большой самостоятельной работы. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе.

Работа над конспектом лекции.

Основу теоретического обучения студентов составляют лекции. Они дают систематизированные знания студентам о наиболее сложных и актуальных проблемах изучаемой дисциплины. На лекциях особое внимание уделяется усвоению студентами изучаемых проблем, развитию их профессионально-значимых свойств и качеств. Лекции по учебной дисциплине проводятся в форме диалога, с использованием подготовленного материала – презентации. Работу над конспектом следует начинать с его доработки, желательно в тот же день, пока материал еще легко воспроизводим в памяти. С целью доработки необходимо прочитать записи, восстановить текст в памяти, а также исправить опiski, расшифровать непринятые ранее сокращения, заполнить пропущенные места, понять текст, вникнуть в его смысл. Далее прочитать материал по рекомендуемой литературе, разрешая в ходе чтения возникшие ранее затруднения, вопросы, а также дополняя и исправляя свои записи. Записи должны быть наглядными, для чего следует применять различные способы выделений. В ходе доработки конспекта углубляются, расширяются и закрепляются знания, а также дополняется, исправляется и совершенствуется конспект. Подготовленный конспект и рекомендуемая литература используются при подготовке к практическим занятиям. Подготовка сводится к внимательному прочтению учебного материала, к выводу с карандашом в руках всех утверждений и формул, к решению примеров, задач, к ответам на вопросы. Примеры, задачи, вопросы по теме являются средством самоконтроля.

Подготовка к практическому занятию.

Для успешного освоения материала студентам рекомендуется сначала ознакомиться с учебным материалом, изложенным в лекциях и основной литературе, затем выполнить самостоятельные задания, при необходимости обращаясь к дополнительной литературе. При подготовке к практическим занятиям можно выделить два этапа:

- организационный, на котором студент планирует свою самостоятельную работу,
- рабочий, на котором осуществляется непосредственная подготовка студента к занятию.

Самостоятельная работа с рекомендованной литературой.

При работе с основной и дополнительной литературой целесообразно придерживаться такой последовательности. Сначала прочитать весь заданный материал, чтобы составить представление об изучаемом материале, понять общий смысл прочитанного. Затем прочитать вторично, чтобы в ходе чтения понять и запомнить смысл каждой фразы, каждого положения и вопроса в целом. Продуктивно сопровождать чтение записями (план прочитанного текста, тезисы, выписки, конспектирование и др.) Если содержание материала несложное, легко усваиваемое, можно ограничиться составлением плана. Если материал содержит новую и трудно усваиваемую информацию, целесообразно его законспектировать.

Для усвоения курса, в качестве вспомогательной литературы рекомендуются к использованию:

- 1 Еремин В.В., Каргов С.А., Успенская И.А. и др. Основы физической химии. Теория. Т.1., М.: Бином, 2013
- 2 Пригожин И., Дефей Р., Химическая термодинамика. 2-е издание. М.: БИНОМ, 2010.
- 3 Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. М.: Мир, 2007
- 4 Романовский Б.В. Основы химической кинетики. М.: Экзамен, 2006
- 5 Воронин Г.Ф., Основы термодинамики. М: МГУ, 1987 Мюнстер А. Химическая термодинамика. М: Мир, 1971