

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ

**Декан Геологического факультета
академик**

_____/Д.Ю.Пушаровский/
« ____ » _____ 20 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Термодинамическое обеспечение моделирования геохимических процессов

Авторы-составители: Борисов М.В.

Уровень высшего образования:

Магистратура

Направление подготовки:

05.04.01 Геология

Направленность (профиль) ОПОП:

Экологическая геология

Магистерская программа:

Экологическая геология

Форма обучения:

Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методическим Советом Геологического факультета
(протокол № _____, _____)

Москва 20__

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки «Геология» (*программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки*) в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г.

Год (годы) приема на обучение – 2019.

© Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.

Цель и задачи дисциплины

Цель – овладение способами подготовки термодинамических данных для исследования природных объектов и геохимических процессов методами термодинамического моделирования на ЭВМ.

Задачи: рассмотрение экспериментальных и расчетных методов получения и оценки термодинамических констант, знакомство со справочной литературой и базами термодинамических данных, способы описания влияния температуры и давления на состояние геохимических систем, анализ современных методов расчета равновесного состава сложных геохимических систем.

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО – вариативная часть, блок дисциплин профессиональный, тип - дисциплины по выбору (модуль «Экологическая геохимия»), 1 г/о, семестр 2.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:

освоение дисциплин Информатика, Общая химия, Основы неорганической химии, Минералогия с основами кристаллографии, Геология месторождений полезных ископаемых, Общая геохимия, Геохимия элементов, Экологическая геохимия, Экологическая геохимия природных вод, Основы физической геохимии и др.

3. Результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.

Компетенции выпускников, формируемые (полностью или частично) при реализации дисциплины:

ОПК-5.М Способность использовать современные вычислительные методы и компьютерные технологии для решения задач профессиональной деятельности

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю):

знать: теоретические основы, принципы, методы и источники термодинамической информации для проведения термодинамического моделирования природных процессов.

уметь: выполнять термодинамические расчеты для подготовки данных при анализе природных систем в широком диапазоне физико-химических условий.

владеть: навыками и приемами работы с термодинамическими данными, включая поиск и подготовку исходной термодинамической информации, проведение циклов вычислений и обработку результатов.

4. Формат обучения – лекционные и семинарские занятия.

5. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 з.е., в том числе 26 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (13 часов – лекции, 13 часов – семинарские занятия), 46 академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Формы текущего контроля - устные опросы, сдача расчетно-графических работ и др. Форма промежуточной аттестации – зачет.

6. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

Краткое содержание дисциплины (аннотация):

Дисциплина «Термодинамическое обеспечение моделирования геохимических процессов» направлена на овладение приемами работы с термодинамическими данными, включая поиск и подготовку исходной термодинамической информации, проведение циклов вычислений и обработку результатов. Рассматриваются экспериментальные и расчетные

методы получения и оценки термодинамических констант, справочная литература и базы термодинамических данных, способы описания влияния температуры и давления на состояние геохимических систем, анализ современных методов расчета равновесного состава сложных геохимических систем.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося, часы <i>(виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)</i>
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				
		Занятия лекционного типа	Занятия практического типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Раздел 1. Основные соотношения термодинамических величин		2		2	4	Собеседование, 8 часа
Раздел 2. Способы оценки термодинамических данных		2		2	4	1 расчетно-графические работы, 8 часов
Раздел 3. Влияние температуры на константу равновесия		3		3	6	2 расчетно-графические работы, 9 часов
Раздел 4. Влияние давления на константу равновесия		4		4	8	1 расчетно-графическая работа, 8 часов
Раздел 5. Учёт неидеальности поведения природных систем		2		2	4	Собеседование, 8 часов
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>						5
Итого	72			26		46

Содержание разделов дисциплины:

Основные соотношения и способы оценки термодинамических данных

Возможности и ограничения термодинамики при решении задач геохимии. Соотношение экспериментальных исследований и термодинамических расчетов.

Термодинамический процесс и состояние равновесия. Свободная энергия Гиббса и состояние равновесия. Стандартное состояние для газов, конденсированных фаз, растворенных в воде веществ. Методы оценки энтропии кристаллических веществ (Латимера, Келли, Файфа, Саксены, и др.). Термодинамическая константа равновесия. Направление химической реакции и его связь с константой равновесия. Свободная энергия образования. Справочная литература и базы термодинамических данных (отличия описания свойств веществ, форматы, стандартизация и др.).

Влияние температуры на константу равновесия

Способы представления температурной зависимости теплоёмкости твердых фаз. Определение коэффициентов уравнения теплоёмкости по экспериментальным данным. Расчет энергий образования минералов из простых веществ при повышенных температурах. Учет фазовых превращений реагентов в реакции образования. Приведённая энергия Гиббса - $\Phi^\circ(T)$. Приращение энергии Гиббса - $\Delta g^\circ(T)$ и её связь с $\Delta G^\circ(T)$ и $\Phi^\circ(T)$.

Влияние давления на константу равновесия

Изменение энергии Гиббса реакции при изменении давления. Расчет изменения энергии Гиббса при повышенных температурах и давлениях для реакций с участием твёрдых фаз и реальных газов.

Оценка констант диссоциации и расчет свободных энергий ионов при повышенных температурах и давлениях: модель Брызгалина-Рыженко (BR-model), модель Хельгесона-Киркхама-Флауэрса (HKF-model).

Учёт неидеальности поведения природных систем

Летучесть и методы её экспериментального определения. P - V - T свойства газов. Изменение коэффициентов летучести газов с ростом температуры и давления.

Теория Дебая-Хюккеля. Соответствие теории эксперименту. Уравнения теории Дебая-Хюккеля в форме второго и третьего приближений. Зависимость значений коэффициентов активности растворенного вещества от температуры, давления и ионной силы. Выбор параметров для теоретической оценки коэффициентов активности. Связь между концентрационной и термодинамической константами равновесия. Определение термодинамических констант равновесия из эксперимента. Экстраполяция на нулевую ионную силу (уравнения Васильева, Дейвиса и др.). Способы определения форм нахождения элементов в водном растворе из данных по растворимости.

Рекомендуемые образовательные технологии

При реализации программы дисциплины используются следующие технологии. При проведении лекционных и семинарских занятий применяется разнообразная графика, в том числе компьютерная, проводится разбор примеров применения методов термодинамики при решении различных задач геологии, технологических процессов, экспериментальных исследований и др., а также – интерактивная форма занятий в виде рассмотрения и анализа типовых расчетных задач. Учащиеся осваивают методы физико-химических расчетов. При проведении занятий используется компьютерный класс кафедры Геохимии, набор специализированных программ для проведения расчетов в различных системах и по подготовке данных для моделирования.

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

Домашние задания для самостоятельной подготовки студентов. Типовые упражнения и расчетные задания. При проведении самостоятельной работы предполагается решение и обработка результатов

расчетов, выполненных при проведении индивидуальных заданий (4 расчетных задач), и подготовка сообщений о свойствах исследованных систем.

**Перечень расчетно-графических заданий для проведения текущего контроля:
Тематика заданий для самостоятельной работы**

Название	Содержание
Оценка стандартной энтропии минералов при 298.15К и 1 бар.	Расчет среднего численного значения стандартной энтропии минералов из оценок различными методами (Латимера, Келли, Файфа и др.). Определение погрешности оценки.
Определение значений $\Delta_f G^\circ(T)$ минералов для определенного ряда повышенных температур.	Расчет энергий образования минералов из простых веществ при повышенных температурах. Учет фазовых превращений реагентов в реакции образования.
Определение значений $\Delta_f G^\circ(T)$ минералов для определенного ряда повышенных температур используя приведенные энергии Гиббса - $\Phi^\circ(T)$.	Расчет энергий образования минералов из простых веществ при повышенных температурах через приведенные энергии Гиббса.
Оценка констант диссоциации различных веществ при повышенных температурах и давлениях по уравнениям модели Брызгалина-Рыженко.	Расчет констант диссоциации при повышенных T и P по уравнениям модели Брызгалина-Рыженко. Сравнение с экспериментальными значениями. Расчет по эмпирическим значениям параметра zz/a .

7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

Примерный перечень вопросов и задач при промежуточной аттестации:

1. Энтропия. Способы определения. Методы оценки.
2. Стандартное состояние. Стандартная свободная энергия вещества.
3. Зависимость энтальпии, энтропии и свободной энергии реакции от температуры. Свободная энергия образования вещества. Учет фазовых переходов.
4. Способы представления температурной зависимости теплоемкости. Функция Шомейта.
5. Приведенная энергия Гиббса и свободная энергия Гиббса.
6. Учет влияния давления на константу равновесия. Реакции с участием твердых фаз.
7. Оценка констант диссоциации при повышенных T и P . Основные тенденции изменения pK при повышении T и P .
8. Летучесть и коэффициент летучести. Экспериментальное определение.
9. Теория Дебая-Хюккеля. Уравнения теории Дебая-Хюккеля и пределы их применимости. Понятие о модели природного раствора.
10. Ионная сила раствора. Применимость уравнений теории Дебая-Хюккеля при повышенных температурах. Представление о среднем расстоянии сближения ионов.
11. Связь между концентрационными и термодинамическими константами равновесия. Способы экстраполяции на нулевую ионную силу.

8. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы.

- основная литература:

1. Борисов М.В., Шваров Ю.В. Термодинамика геохимических процессов. М., МГУ, 1992, 254 с.
2. Наумов Г.Б., Рыженко Б.Н., Ходаковский И.Л. Справочник термодинамических величин. М., Атомиздат, 1971, 239 с.

3. Жариков В.А. Основы физической геохимии. М., МГУ-Наука, 2005, 654 с.

- дополнительная литература:

1. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. Новосибирск, Наука, 1981, 248 с.

2. Борисов М.В. Геохимические и термодинамические модели жильного гидротермального рудообразования. М.: Научный мир, 2000, 360 с.

3. Гричук Д.В. Термодинамические модели субмаринных гидротермальных систем. М.: Научный мир, 2000, 304 с.

4. Термодинамическое моделирование в геологии. Под ред. И.Кармайкла, Х.Ойгстера. М., Мир, 1992, 534 с.

5. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. М., Наука, 1978-1982, т.1-4.

6. Helgeson H.C., Delany J.M., Nesbitt H.W., Bird D.K. Summary and critique of the thermodynamic properties of rock-forming minerals// Amer. J. Sci., 1978, vol. 278-A, 1-229.

7. Helgeson H.C., Kirkham D.H., Flowers G.C. Theoretical prediction of the thermodynamic behavior of electrolytes at high pressure and temperatures. IV. Calculation of activity coefficients, osmotic coefficients, and apparent molal and standard and relative partial molal properties to 600 C and 5 kb. Amer.J.Sci., ,1981, v.281, 1249-1516.

8. Johnson J.W., Oelkers E.H., Helgeson H.C. SUPCRT92: A software package for calculating the standard molal thermodynamic properties of minerals, gases, aqueous species, and reactions from 1 to 5000 bars and 0° to 1000°C. Computers and Geosciences, 1992, **18**, 899–947.

Б) Перечень лицензионного программного обеспечения Microsoft Office Excel, Microsoft Office PowerPoint (при необходимости).

В) Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

Г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (лицензионное программное обеспечение не требуется)

Д) Материально-техническое обеспечение: компьютерный класс на 6-7 мест, оборудованный персональными компьютерами, мультимедийный проектор и экран для демонстрации презентаций.

9. Язык преподавания – русский.

10. Преподаватель (преподаватели) – Борисов М.В.

11. Автор (авторы) программы – Борисов М.В.