

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
Термодинамика минеральных равновесий

Авторы-составители: Бычков А.Ю.

Уровень высшего образования:

Магистратура

Направление подготовки:

05.04.01 Геология

Направленность (профиль) ОПОП:

Геохимия

Магистерская программа:

Геохимия

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. № 1674.

Год (годы) приема на обучение – 2018.

© 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 – обеспечение подготовки магистров в области использования методов термодинамических расчетов для решения геологических задач.

Задачи: знакомство с основными методами термохимии, освоение методов расчетов минеральных равновесий, оценка точности термохимических данных и достоверности термодинамических расчетов.

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО – вариативная часть, блок дисциплин профессиональный, тип – дисциплина по выбору (модуль «Геохимия»), год обучения - II, семестр 3.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:

Освоение дисциплин программы бакалавриата Информатика, Общая химия, Физическая химия, Неорганическая химия, Общая физика, Минералогия, Кристаллохимия, Петрология, Генезис месторождений полезных ископаемых, Физическая геохимия, Геохимические методы поисков полезных ископаемых, Экспериментальная геохимия, Термодинамика геохимических процессов, Геохимия радионуклидов и др.

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

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

ОПК-4.М Способность применять на практике знания фундаментальных и прикладных разделов дисциплин, определяющих профиль подготовки (формируется частично).

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

СПК-1.М Способность использовать физико-химические методы и термодинамический анализ для решения теоретических и практических задач геохимии.

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю):

знать: теоретические основы, принципы физической химии, возможности и ограничения применения метода термодинамических расчетов, основные методы и подходы для моделирования геохимических процессов.

уметь: использовать термохимические данные для термодинамических расчетов, рассчитывать направление химической реакции.

владеть: методами термодинамических расчетов с использованием современных программ.

4. Формат обучения – лекционные и семинарские занятия, самостоятельная работа студентов.

5. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 з.е., в том числе 42 академических часа, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (14 часов – лекции, 28 часов – занятия семинарского типа), 30 академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Формы текущего контроля - дискуссии, устные опросы. 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):

Анализируются основные источники термодинамических данных, используемых для решения геологических задач, источники погрешности и методы согласования термодинамических характеристик индивидуальных веществ. Рассматриваются основные

методы физико-химических расчетов с использованием современных программных комплексов и термодинамических баз данных. Поиск термодинамической информации в литературных источниках и сети Интернет. Рассматриваются методы оценки термодинамических величин при отсутствии экспериментальных данных и экстраполяции по температуре и давлению. Оценка достоверности и точности термодинамических расчетов. В завершении курса приводятся примеры термодинамических моделей природных 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
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				
		Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Раздел 1. Основные понятия и законы физической химии, термодинамические характеристики индивидуальных веществ.		2		4	6	Собеседование, 2 часа
Раздел 2. Стандартные состояния веществ. Методы определения термодинамических параметров.		4		4	8	Собеседование, 4 часов
Раздел 3. Базы данных и справочники термодинамических величин. Поиск информации.		4		6	10	Реферат, 12 часов
Раздел 4. Методы термодинамических расчетов		2		6	8	Собеседование, 4 часа
Раздел 5. Примеры термодинамических моделей.		2		6	8	Собеседование, 4 часа
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>						4
Итого	72			42		30

Содержание разделов дисциплины:

Раздел 1. Основные понятия и законы физической химии, термодинамические характеристики индивидуальных веществ.

Задачи термодинамики при изучении природных процессов. Количественные методы химической термодинамики в геологии. Возможности и ограничения химической термодинамики при решении задач геохимии. Соотношение экспериментальных исследований и термодинамических расчетов. Система. Термодинамические параметры. Термодинамический процесс и состояние равновесия. Закон сохранения энергии.

Раздел 2. Стандартные состояния веществ. Методы определения термодинамических параметров.

Тепловой эффект химической реакции. Закон Гесса и следствия из него. Свободная энергия Гиббса и состояние равновесия. Энтропия как функция состояния системы. Постулат Планка и теорема Нернста. Методы оценки энтропии кристаллических веществ. Энтропия ионов в водном растворе. Парциальные мольные величины. Понятие летучести, активности, коэффициентов летучести и активности. Стандартное состояние для газов, конденсированных фаз, растворенных в воде веществ. Изменение свободной энергии реакции как функции ΔG° и текущих значений активностей (летучестей). Термодинамическая константа равновесия. Направление химической реакции и его связь с константой равновесия. Свободная энергия образования.

Раздел 3. Базы данных и справочники термодинамических величин. Поиск информации.

Базы данных и справочники термодинамических величин, используемые для термодинамических расчетов. Примеры поиска термодинамических характеристик индивидуальных веществ в разных источниках. Важность исследования литературных источников. Погрешность определения термодинамических величин и ее влияние на решение геологических задач. Согласование и выбор термодинамических величин. Изменения теплоемкости, энтальпии и энтропии в реакциях различных типов. Возможные варианты приближений в расчетах. Уравнения зависимости термодинамической константы равновесия от температуры. Принцип соответствия энтропий ионов (уравнения Крисса и Кобла, Ходаковского).

Способы представления температурной зависимости теплоемкости твердых фаз. Определение коэффициентов уравнения теплоемкости по экспериментальным данным (функция Шомейта и другие способы). Приведенная энергия Гиббса - $\Phi^\circ(T)$. Приращение энергии Гиббса - $\Delta g^\circ(T)$ и её связь с $\Delta G^\circ(T)$ и $\Phi^\circ(T)$.

Раздел 4. Методы термодинамических расчетов

Назначение и главные типы расчетов. Зависимость термодинамических параметров от T и P и состава системы. III закон термодинамики. Зависимость теплоемкости и энтропии от температуры. Расчет констант равновесия реакций. Методы расчета различных типов диаграмм: T - P , T - P (H_2O), T - P (CO_2), a_j - a_k , Eh-pH и др.

Раздел 5. Примеры термодинамических моделей.

Термодинамические модели некоторых природных процессов и явлений. Термодинамические модели процессов гидротермального рудообразования, экзогенных и биохимических процессов. Методические приемы моделирования. Результаты. Верификация результатов моделирования. Принципы и подходы при интерпретации данных.

Рекомендуемые образовательные технологии

При реализации программы дисциплины используются следующие технологии. При проведении занятий применяется компьютерная графика (ПК и компьютерный проектор), разбор примеров применения методов компьютерного моделирования при решении различных задач, а также – интерактивная форма занятий в виде деловых игр на конкретном материале. При проведении занятий используется компьютерный класс кафедры геохимии.

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.

При проведении самостоятельной работы предполагается обработка результатов расчетов, выполненных при проведении семинарских занятий, и подготовка сообщений о свойствах исследованных систем применительно к теме магистерской работы.

Тематика заданий для самостоятельной работы

1. Подбор термодинамических данных и оценка их точности для минерала по теме магистерской работы.

2. Оценка констант устойчивости комплексных соединений водного раствора для химического элемента применительно к теме магистерской работы.

3. Термодинамический расчет константы реакции и определение направленности процесса применительно к теме магистерской работы.

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

Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:

1. Возможности и ограничения термодинамики равновесных процессов при анализе природных систем.

2. Система. Типы систем. Компоненты. Фазы. Свойства систем. Законы термодинамики.

3. Энтропия. Способы определения. Методы оценки.

4. Стандартное состояние. Стандартная свободная энергия вещества. Изменение свободной энергии реакции как функции стандартной свободной энергии и текущих значений активностей.

5. Зависимость энтальпии, энтропии и свободной энергии реакции от температуры. Свободная энергия образования вещества. Учет фазовых переходов.

6. Возможные варианты приближений при расчетах зависимости константы равновесия реакции от температуры.

7. Способы представления температурной зависимости теплоемкости. Функция Шомейта.

8. Приведенная энергия Гиббса и свободная энергия Гиббса. Принцип соответствия энтропий ионов.

9. Учет влияния давления на константу равновесия. Реакции с участием твердых фаз. Возможные допущения при расчетах при повышенных T и P .

10. Определение константы диссоциации при условии, что изменение изотермической сжимаемости равно нулю и константе.

11. Оценка констант диссоциации при повышенных T и P . Основные тенденции изменения pK при повышении T и P .

12. Летучесть и коэффициент летучести. Экспериментальное определение. Уравнение Тэйта.

13. Методы экспериментального определения коэффициентов активности электролитов. Средний ионный коэффициент активности и коэффициенты активности индивидуальных ионов. Допущение Мак Иннеса.

14. Теория Дебая-Хюккеля. Уравнения теории Дебая-Хюккеля и пределы их применимости. Понятие о модели природного раствора.

15. Ионная сила раствора. Применимость уравнений теории Дебая-Хюккеля при повышенных температурах. Представление о среднем расстоянии сближения ионов.

16. Связь между концентрационными и термодинамическими константами равновесия. Способы экстраполяции на нулевую ионную силу.

17. Понятие о геологической, физико-химической и математической моделях. Классификация существующих алгоритмов для расчета равновесий в многокомпонентных гетерогенных системах.

18. Исходная информация для расчета равновесий в многокомпонентных гетерогенных системах на ЭВМ. Возможности и ограничения термодинамического моделирования при анализе природных процессов.

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. Крайнов С.Р., Шваров Ю.В., Гричук Д.В...Борисов М.В. и др. Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии. М., Недра, 1988, 254 с.
3. Жариков В.А. Основы физической геохимии. М., МГУ-Наука, 2005, 654 с.
4. Инструкция пользователя пакета программ HCh. МГУ, 2009. – <http://www.geol.msu.ru/deps/geochems/soft/index.html>

- 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. Шваров Ю.В. Алгоритмизация численного равновесного моделирования динамических геохимических процессов. Геохимия, 1999, № 6, 646-652.
6. Шваров Ю.В. HCh: новые возможности термодинамического моделирования геохимических систем, предоставляемые Windows// Геохимия, 2008, № 8, 898-903.
7. Бычков А.Ю. Геохимическая модель современного рудообразования в кальдере Узон (Камчатка). М., ГЕОС, 2009, 124 с.

Б) Перечень лицензионного программного обеспечения пакеты программ 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:

Пакет программ HCh (автор Ю.В.Шваров, кафедра геохимии МГУ).

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

9. Язык преподавания – русский.

10. Преподаватель (преподаватели) – Бычков А.Ю.

11. Автор (авторы) программы – Бычков А.Ю.