

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/  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Термодинамика минералов**

Авторы-составители: Киселева И.А., Огородова Л.П.

**Уровень высшего образования:**

*Магистратура*

**Направление подготовки:**

**05.04.01 Геология**

**Направленность (профиль) ОПОП:**

**ГЕОХИМИЯ**

**Магистерская программа**

**Минералогия (ИМ)**

Форма обучения:

*Очная*

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

Москва 2019

---

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 – 2018. (*для 2 курса магистратуры*)

Год (годы) приема на обучение – 2019. (*для 2 курса магистратуры*)

© 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**

**Целью** курса «Термодинамика минералов» является: получение знаний по термодинамическим (энергетическим) характеристикам минералов как фундаментальным свойствам вещества, связанным с их составом и структурой, ознакомление с методами их получения и использования в расчетах минеральных равновесий, оценке физико-химических параметров образования кристаллических горных пород.

**Задачи:** 1. Изучение основных термодинамических свойств минералов постоянного и переменного состава, выявление их связи с составом и структурой, ознакомление с методами получения и оценки.

2. Использование термодинамических данных при изучении гидротермального минералообразования.

3. Изучение общих закономерностей изменения составов сосуществующих минералов переменного состава под влиянием температуры, давления и других факторов равновесия

**1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО** – вариативная часть, профессиональный цикл, обязательные профессиональные дисциплины, курс – I, семестр – 2.

**2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:** освоение дисциплин «Общая геология», «Минералогия», «Неорганическая химия», «Высшая математика», «Физическая химия», «Физика твердого тела».

Дисциплина необходима для научно-исследовательской работы и выполнения выпускных квалификационных работ.

**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

СПК-4.М. Способность использовать термодинамические и термохимические расчеты для анализа условий и параметров образования минеральных парагенезисов.

**Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю):**

**Знать:** основные законы термодинамики, формулы определения и расчета термодинамических констант минералов постоянного и переменного составов (теплоемкость, энтропия, энтальпия, энергия Гиббса, функции смешения); экспериментальные расчетные методы получения термодинамических констант минералов; общие закономерности распределения компонентов между сосуществующими минералами, принцип фазового соответствия; диаграммы фазового соответствия – минералогические термометры и барометры.

**Уметь:** рассчитывать минеральные равновесия, анализировать влияние температуры давления, рН, активности серы, кислорода и т.д. на равновесия.

**Владеть:** методами термодинамического анализа минеральных равновесий.

**4. Формат обучения** – лекционные, семинарские и практические занятия

**5. Объем дисциплины (модуля)** составляет 4 з.е., в том числе 39 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (13 часов – занятия лекционного типа, 13 часов – занятия семинарского типа, 13 часов – практические занятия; 105 часов на самостоятельную работу обучающихся). Форма аттестации – экзамен.

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

**Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

Курс определяет задачи и содержание термодинамических исследований в минералогии. Рассматриваются термодинамические характеристики минералов как фундаментальные свойства веществ, связанные с их составом и структурой. Излагаются методы экспериментального получения термодинамических констант минералов, а также расчетные методы их получения. Рассматриваются возможности использования термодинамических данных в термо- и барометрии, в расчетах минеральных равновесий и оценке условий образования минералов.

На практических занятиях студенты знакомятся с расчетными и экспериментальными методами получения термодинамических констант минералов, построением минеральных равновесий с использованием справочных термодинамических данных и практическим использованием геобарометров и геотермометров.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося, часы * (виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				
		Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Раздел 1. Термодинамические константы минералов		5	2	5 Контроль ный опрос	12	Выполнение расчетно-графических заданий и подготовка к контрольному опросу – 30 часов
Раздел 2. Использование термодинамических данных при изучении гидротермального минералообразования		4	6	4 Контроль ный опрос	14	Выполнение расчетно-графических заданий и подготовка к контрольному опросу – 30 часов
Раздел 3. Термодинамические основы геотермо- и барометрии.		5	4	4 Контроль ный опрос	13	Выполнение расчетно-графических заданий и подготовка к контрольному опросу, промежуточной аттестации – 45 часов
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>						
<b>Итого</b>	<b>144</b>			<b>39</b>		<b>105</b>

## **Содержание разделов дисциплины:**

### 1. Термодинамические константы минералов (часть 1)

Теплоемкость. Зависимость от температуры. Методы измерения.

Энтродия как мера неупорядоченности, определение. Расчет по данным низкотемпературной теплоемкости, приближенные методы расчета.

Энтальпия, определение. Законы Гесса, Кирхгоффа. Термохимические методы определения.

Энергия Гиббса. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Методы расчета при изменении температуры и давления.

Термодинамические свойства минералов переменного состава.

### 2. Использование термохимических данных при изучении гидротермального минералообразования (часть 2)

Условия термодинамического равновесия. Константа равновесия. Расчет равновесий в водных растворах в зависимости от рН растворов и активности компонентов

Физико-химические условия отложения минералов в растворах. Расчет полей устойчивости минералов.

### 3. Термодинамические основы геотермо- и барометрии (часть 3)

Межфазовое распределение компонентов, коэффициент распределения. Правило Соболева и Рамберга. Общий принцип фазового соответствия. Обзор диаграмм минералогических термометров. Обзор диаграмм минералогических барометров. Изучение З-Т границ стабильности минералов и их ассоциаций.

#### Практические занятия (к части 1)

1. Знакомство с экспериментальными методами получения термодинамических констант.
2. Определение теплосодержаний минералов и расчет средней теплоемкости.
3. Определение энтальпий образования минералов методом калориметрии растворения.
4. Расчет значений абсолютных энтропий минералов из данных низкотемпературной теплоемкости.
5. Расчет значений абсолютных энтропий минералов различными оценочными методами.

#### Семинарские занятия (к частям 2 и 3)

1. Влияние Т и Р на термодинамические свойства минералов, Направление реакций минералообразования. Расчет минеральных равновесий.
2. Влияние Т, Р и состава газовой фазы на устойчивость галоидных соединений вольфрама в газовой фазе.
3. Термодинамический анализ возможного переноса вольфрама гидротермами в виде галоидных соединений.
4. Физико-химические условия отложения минералов на примере вольфраматов Са, Fe и Mn.
5. Термодинамический анализ условий образования минералов в гидротермальном процессе. Активность сульфидной серы.
6. Оценка полей устойчивости кислородных и сульфидных соединений вольфрама и молибдена.
7. Расчет зависимости функций смешения от состава для идеального твердого раствора.
8. Использование диаграмм фазового соответствия для оценки Т и Р.

## **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.**

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым студентом выполненных расчетных/лабораторных/практических работ.

Для текущего контроля студентов в ходе семестра проводятся контрольные опросы/работы по 3-м разделам курса.

**Примерный перечень вопросов для проведения текущего контроля/ Темы контрольных работ :**

**Контрольные вопросы для проведения текущего контроля:**

1. Экспериментальные методы определения термодинамических констант минералов.
2. Роль термохимии в изучении минеральных равновесий, изоморфизма и полиморфизма минералов.
3. Теплоемкость минералов. Средняя и истинная теплоёмкости. Связь теплоемкости с ионностью-ковалентностью.
4. Зависимость теплоёмкости от условий процесса и температуры. Интерполяционные уравнения.
5. Теоретические методы вычисления теплоемкости в области низких температур (методы Дебая, Эйнштейна и Тарасова).
6. Средняя теплоемкость, изменения энтальпии (функции  $H^{\circ}_T - H^{\circ}_{298,15}$ ) и методы их определения.
7. Третий закон термодинамики и его использование.
8. Энтропия как мера неупорядоченности. Расчет значений абсолютной энтропии.
9. Энтальпия, определение. Закон Гесса. Зависимость от температуры. Закон Кирхгоффа. Энергия кристаллической решетки.
10. Теплоты фазовых превращений. Фазовые переходы 1 и 2 рода.
11. Свободная энергия Гиббса, способы расчета, зависимость от температуры и давления. Уравнение Гиббса-Гельмгольца.
12. Условия термодинамического равновесия. Константа равновесия.
13. Относительные функции (парциальные и интегральные) твердых растворов минералов.
14. Избыточные функции минералов твердых растворов
15. Термодинамические характеристики идеальных и реальных твердых растворов.
16. Общие закономерности распределения компонентов между сосуществующими минералами.
17. Коэффициенты распределения. Диаграммы идеального и неидеального распределения. Межфазовое распределение компонентов.

**Расчетные домашние задания:**

1. Знакомство с экспериментальными (калориметрическими) методами получения термохимических констант минералов.
2. Экспериментальное определение теплосодержания (изменение энтальпии  $H^{\circ}_T - H^{\circ}_{298,15}$ ) минерала и расчет средней теплоемкости.
3. Экспериментальное определение теплоты образования минерала методом высокотемпературной расплавной калориметрии растворения.
4. Методы расчета абсолютных энтропии минералов (расчет энтропии заданного минерала по данным низкотемпературной теплоемкости).
5. Изучить влияние  $T$  и  $P$  на термодинамические свойства минералов. Определить направление реакций минералообразования при изменении температуры и давления. Расчет минеральных равновесий.
6. Термодинамический анализ влияния температуры, давления и состава газовой фазы на устойчивость галоидных соединений вольфрама в газовой фазе
7. Термодинамический анализ возможного переноса вольфрама гидротермами в виде галоидных соединений. Построить график зависимости активности вольфрамат-иона от  $PH$  при  $200^{\circ}C$ .

8. Физико-химические условия отложения минералов из растворов (на примере вольфрамов Ca, Fe, Mn). Расчет зависимости произведений растворимости от температуры в интервале 25-300°C. С.
9. Термодинамический анализ условий образования минералов в гидротермальном процессе. Рассчитать поле устойчивости вольфрамита в зависимости от T, PH и активности сульфидной серы.
10. Оценить поля устойчивости кислородных и сульфидных соединений вольфрама и молибдена в зависимости от температуры, PH и активности сульфидной серы.
11. Для идеального твердого раствора рассчитать зависимость функций смешения от состава.
12. Провести оценку равновесных значений температуры и давления заданных минералов в горных породах, используя соответствующие диаграммы фазового

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

### *Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:*

1. Теплоемкость минералов. Зависимость от температуры.
2. Энтропия как мера неупорядоченности. Определение. 3-й закон термодинамики. Методы расчета абсолютной энтропии.
3. Энтальпия. Определение. Закон Гесса его применение. Закон Кирхгоффа. Методы определения энтальпий реакций.
4. Свободная энергия. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Энергия Гиббса как функция температуры и давления.
5. Условие термодинамического равновесия. Константа равновесия. Закон действующих масс.
6. Фазовые переходы в минералах. Переходы I и II рода.
7. Расчет полей устойчивости минералов. Равновесия окислительно-восстановительных реакций в гидротермальных условиях.
8. Термодинамические свойства минералов переменного состава.
9. Идеальные и регулярные твердые растворы.
10. Парциальные и интегральные функции твердых растворов минералов.
11. Избыточные функции минералов твердых растворов.
12. Общий принцип фазового соответствия.
13. Методы расчета функций смешения.
14. Коэффициент распределения. Диаграммы идеального и неидеального распределения.
15. Минералогические геотермометры и барометры.

### **Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.**

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: основных законов термодинамики, определений и методов получения и расчета термодинамических констант минералов, диаграмм фазового соответствия	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Систематические знания
Умения: рассчитывать	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не	В целом успешное, но	Успешное умение



минеральные равновесия, анализировать влияние температуры давления, рН, активности серы, кислорода и т.д. на равновесия.		систематическое умение, допускает неточности непринципиально го характера	содержащее отдельные пробелы умение использовать физико-химические расчеты.	использовать физико-химические расчеты применительно к минеральным равновесиям
Владения: методами термодинамического анализа минеральных равновесий.	Навыки владения методами отсутствуют	Фрагментарное владение, наличие отдельных навыков	В целом сформированные навыки использования методов термодинамического анализа равновесий.	Владение методами термодинамического анализа минеральных равновесий.

### 8. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы.

- основная литература:

Киселева И.А. Практикум по термохимии минералов. М., Изд. МГУ, 1985. 83 с. (в наличии на кафедре).

Киселева И.А., Огородова Л.П. Термохимия минералов и неорганических материалов. М., Новый Мир, 1998. (В наличии на кафедре).

Перчук Л.Л., Рябчиков И.Д. Фазовое соответствие в минеральных системах. М., 1976. 287 с.

- дополнительная литература:

Булах А.Г. Методы термодинамики в минералогии. Л., Недра, изд. 1-ое, 1967, изд. 2-ое, 1974.

Саксена С. Термодинамика твердых растворов породообразующих минералов. М., 1975. 204.

Жариков В.А. Основы физико-химической петрологии. М., Изд. МГУ, 1976.

Б) Перечень лицензионного программного обеспечения пакеты программ Statistica; 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-технического обеспечение: - персональные компьютеры.

9. Язык преподавания – русский.

10. Преподаватель (преподаватели) – Огородова Л.П.

11. Автор (авторы) программы – Киселева И.А., Огородова Л.П.