

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

УТВЕРЖДАЮ
и.о. декана Геологического факультета
чл.-корр. РАН _____/Н.Н.Ерёмин/
«_» _____ 20 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Термодинамика минералов

Авторы-составители: 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

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*)

Год (годы) приема на обучение – 2022.

© 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

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 и семинарских 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.

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП - относится к базовой части ОПОП, профессиональный цикл, обязательные профессиональные дисциплины, курс – I, семестр – 2.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:

Дисциплина неразрывно связана с освоением 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(коды)	Индикаторы (показатели)достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), сопряженные с компетенциями
СПК-4.М.(2) Способен использовать термодинамические и термохимические расчеты для анализа условий и параметров образования минеральных	М.СПК-4. И-1. Владеет базовыми знаниями по закономерностям распределения химических компонентов между сосуществующими минералами. М.СПК-4. И-2. Использует	Знает основные законы термодинамики, формулы определения и расчета термодинамических констант минералов постоянного и переменного составов (теплоемкость, энтропия, энтальпия, энергия Гиббса,

парагенезисов.	теоретические знания основных законов термодинамики для расчета термодинамических констант минералов постоянного и переменного составов.	функции (смещения); экспериментальные расчетные методы получения термодинамических констант минералов; общие закономерности распределения компонентов между сосуществующими минералами, принцип фазового соответствия; диаграммы фазового соответствия – минералогические термометры и барометры. Умеет рассчитывать минеральные равновесия, анализировать влияние температуры давления, рН, активности серы, кислорода и т.д. на равновесия. Владеет методами термодинамического анализа минеральных равновесий.
----------------	--	---

4. Формат обучения – лекционные, семинарские и практические занятия, не предполагает электронного обучения и использования дистанционных образовательных технологий (за исключением форс-мажорных обстоятельств, пандемии и т.п.).

5. Объем дисциплины (модуля) составляет **3** 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; 69 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

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 Контрольный опрос	12	Выполнение расчетно-графических заданий и подготовка к контрольному опросу – 20 часов
Раздел 2. Использование термохимических данных при изучении гидротермального минералообразования		4	6	4 Контрольный опрос	14	Выполнение расчетно-графических заданий и подготовка к контрольному опросу – 20 часов
Раздел 3. Термодинамические основы геотермо- и барометрии.		5	4	4 Контрольный опрос	13	Выполнение расчетно-графических заданий и подготовка к контрольному опросу – 24 часов
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>						5 часов
Итого	144			39		69

Содержание разделов дисциплины:

1. Термодинамические константы минералов (часть 1)

Теплоемкость. Зависимость от температуры. Методы измерения.

Энтропия 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 Р-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 , P и активности сульфидной серы.
10. Оценить поля устойчивости кислородных и сульфидных соединений вольфрама и молибдена в зависимости от температуры, P 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 или весьма фрагментарны	Знания есть, но отсутствует их систематичность	Знания систематические, но имеются пробелы	Систематические знания в достаточном объеме
Умения: рассчитывать	Умения отсутствуют	Демонстрирует умения только по	В целом успешное, но не	Успешное умение

минеральные равновесия, анализировать влияние температуры давления, рН, активности серы, кислорода и т.д. на равновесия.		отдельным пунктам	систематическое умение, допускает неточности непринципально го характера	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 (на кафедре минералогии)

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

Перчук Л.Л., Рябчиков И.Д. Фазовое соответствие в минеральных системах. М., Недра, 1976 (в библиотеке геологического факультета)

- дополнительная литература:

Булах А.Г. Методы термодинамики в минералогии. Л., Недра, изд. 1-ое, 1967, изд.2-ое, 1974 (в библиотеке геологического факультета).

Саксена С. Термодинамика твердых растворов породообразующих минералов. М., 1975 (на кафедре минералогии).

Жариков В.А. Основы физико-химической петрологии. М., Изд. МГУ, 1976 (в библиотеке геологического факультета).

Жариков В.А. Основы физической геохимии. М. Наука, 2005 (в библиотеке геологического факультета).

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) – вед.н.сотр. Огородова Л.П.

11. Автор (авторы) программы - вед.н.сотр. Огородова Л.П.