

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

УТВЕРЖДАЮ
Декан геологического факультета
МГУ имени М.В. Ломоносова
чл.-корр. РАН Еремин Н.Н.



«18» декабря 2025г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Наименование дисциплины (модуля):

Вар Термодинамика геохимических процессов

Уровень высшего образования:
бакалавриат

Направление подготовки/ специальность:

05.03.01 Геология

Профиль программы бакалавриата:

Геохимия

Форма обучения:

Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методическим Советом Геологического факультета
(протокол № 8 от 15 декабря 2025 г.)

Москва 2025

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 05.03.01 Геология, утвержденным приказом по МГУ от 21.12.2021 № 1404 (в действующей редакции).

Год (годы) приема на обучение – 2023.

© 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 освоения дисциплины «Термодинамика геохимических процессов» заключается в овладении современными методами исследования природных объектов и геохимических процессов на основе принципов термодинамики.

Задачи: рассмотрение экспериментальных и расчетных методов получения и оценки термодинамических констант, способы описания влияния температуры и давления на состояние геохимических систем, освоение методов расчета и построения диаграмм состояния, анализ современных методов расчета равновесного состава сложных геохимических систем и освоение принципов численного компьютерного моделирования геохимических процессов.

Краткое содержание дисциплины (аннотация):

Дисциплина «Термодинамика геохимических процессов» направлена на овладение современными методами исследования природных объектов и геохимических процессов на основе принципов термодинамики. Приводятся основные понятия и законы термодинамики, рассматриваются экспериментальные и расчетные методы получения и оценки термодинамических констант, обсуждается влияние температуры и давления на состояние геохимических систем, даются методики расчета и построения диаграмм состояния, анализируются современные методы расчета равновесного состава сложных геохимических систем и принципы численного компьютерного моделирования геохимических процессов, приводятся примеры термодинамических моделей гидротермальных, экзогенных, космохимических и технологических процессов.

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО – вариативная часть, профессиональный блок, дисциплины по выбору студента, курс III, семестр 6.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:

освоение дисциплин «Информатика», «Общая химия», «Физическая химия», «Неорганическая химия», «Минералогия», «Кристаллохимия», «Петрология», «Физическая геохимия», «Экспериментальная геохимия».

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников

Компетенции выпускников (коды)	Индикаторы достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
ОПК-1 на уровне бакалавриата, ОПК-2 на уровне бака-	ОПК-1.Б. Применяет знания фундаментальных разделов наук о Земле, базовые знания естественно-научного и математического циклов при решении стандартных профессиональных задач. ОПК-2.Б. Использует знание теоретических	Знать: теоретические основы, принципы и методы термодинамического подхода к анализу природных геохимических процессов, возможности и ограничения термодинамики при изучении геохимических процессов, методы и источники получения термодинамической инфор-

лавриата, ОПК-3 на уровне бакалавриата	основ фундаментальных геологических дисциплин при решении научно-исследовательских задач профессиональной деятельности ОПК-3.Б. Решает стандартные задачи профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки (в области геохимии).	мации для проведения расчетов. Уметь: выполнять термодинамические расчеты при анализе природных систем в широком диапазоне физико-химических условий, интерпретировать результаты термодинамических расчетов для анализа условий протекания природных процессов. Владеть: навыками и приемами работы с термодинамическими данными, включая поиск и подготовку исходной термодинамической информации, проведение циклов вычислений, обработку и графическое отображение результатов отдельных термодинамических расчетов и компьютерного моделирования процессов
СПК-1 на уровне бакалавриата	СПК-1.Б. Проводит поиск, критический анализ, обобщение и систематизацию научной информации в области наук геохимического цикла.	Владеть: навыками поиска и критического анализа научной информации в области геохимии.

4. Объем дисциплины (модуля) составляет **6** з.е., в том числе **78** академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, **138** академических часов на самостоятельную работу обучающихся; форма промежуточной аттестации – экзамен.

5. 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				
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) <i>Виды контактной работы, часы¹</i>				Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Практические/лабораторные занятия	Всего	
Раздел 1. Предмет и методы термодинамики геохимических процессов	12	4	2		6	Подготовка к контрольному опросу, 6 часов
Раздел 2. Основные соотношения термодинамических величин	20	4	2		6	2 расчетно-графические работы, 14 часов
Раздел 3. Влияние температуры на константу равновесия	32	8	4		12	2 расчетно-графические работы, 20 часов
Раздел 4. Влияние давления на константу равновесия	38	8	4		12	3 расчетно-графические работы, 26 часов
Раздел 5. Учёт неидеальности поведения природных систем	34	8	4		12	2 расчетно-графические работы, 22 часов
Раздел 6. Расчет, построение и анализ диаграмм растворимости	30	6	4		10	1 расчетно-графическая работа, 20 часов
Раздел 7. Построение и анализ диаграмм парциального давления и Eh-pH	24	6	2		8	2 расчетно-графические работы, 16 часов
Раздел 8. Термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов	26	8	4		12	1 расчетно-графическая работа, 14 часов
Промежуточная аттестация ²		Экзамен				
Итого	216	78				138

¹ Текущий контроль успеваемости может быть реализован в рамках занятий семинарского типа, групповых консультаций или индивидуальной работы с обучающимися

² Время для подготовки к промежуточной аттестации в форме **зачета** выделяется из часов самостоятельной работы обучающихся. Промежуточная аттестация в форме **экзамена** проводится во время экзаменационной сессии, предусмотренной графиком учебного процесса.

Содержание разделов дисциплины:

Раздел 1. Предмет и методы термодинамики геохимических процессов

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.

Раздел 2. Основные соотношения термодинамических величин

Система. Термодинамические параметры. Термодинамический процесс и состояние равновесия. Закон сохранения энергии. 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. Энтропии ионов в водном растворе. Парциальные молярные величины. Понятие летучести, активности, коэффициентов летучести и активности. Стандартное состояние для газов, конденсированных фаз, растворенных в воде веществ. Изменение свободной энергии реакции как функции DG° и текущих значений активностей (летучестей). Термодинамическая константа равновесия. Направление химической реакции и его связь с константой равновесия. Свободная энергия образования.

Раздел 3. Влияние температуры на константу равновесия

Поле температур и давлений, характеризующих процессы гидротермального рудо- и минералообразования. Изменения теплоёмкости, энтальпии и энтропии в реакциях различных типов. Возможные варианты приближений в расчетах: $\Delta_r C_p^\circ = 0$, $\Delta_r C_p^\circ = \text{const}$, $\Delta_r C_p^\circ = \Delta bT$ и др. Уравнения зависимости термодинамической константы равновесия от температуры. Принцип соответствия энтропий ионов (уравнения Крисса и Кобла, Ходковского).

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

Раздел 4. Влияние давления на константу равновесия

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

Парциальные молярные объёмы. Изменение изотермической сжимаемости в реакциях с участием растворённого в воде вещества. Характер изменения констант равновесия ионных реакций при увеличении температуры и давления. Возможные варианты приближений и уравнений при расчёте зависимости констант равновесия реакций с участием растворённого вещества.

Константа диссоциации воды при высоких температурах и давлениях (табличные данные и уравнения для аппроксимации).

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

Раздел 5. 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. Уравнение состояния жидкой воды (уравнение Тейта и его развитие).

Коэффициенты активности водных растворов электролитов. Принципы и теоретические основы экспериментальных методов определения средних ионных коэффициентов

активности электролитов: по активности растворителя (воды), изопиестический метод, метод ЭДС и др.

Теория Дебая-Хюккеля. Допущения при выводе предельного уравнения. Ионная сила раствора. Коэффициенты активности индивидуальных ионов и средние ионные коэффициенты активности электролита. Допущение МакИннесса. 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.

Раздел 6. Расчет, построение и анализ диаграмм растворимости

Способы изображения составов в трехкомпонентных системах. Возможные типы трехкомпонентных диаграмм растворимости и различная растворимость твердых соединений. Анализ диаграмм растворимости при изотермическом испарении. Конгруэнтная и инконгруэнтная растворимость твердых фаз.

Расчет диаграмм растворимости на основе термодинамических данных. Методы расчета. Диаграммы растворимости при различных температурах, концентрациях электролитов, парциальных давлениях газов. Растворимости стабильных и метастабильных фаз. Расчет растворимости отдельных минералов. Изменения в растворимости пород при различных соотношениях порода/вода в многокомпонентных гетерогенных системах. Буферные свойства систем.

Раздел 7. Построение и анализ диаграмм парциального давления и Eh - pH

Устойчивость фаз как функция парциальных давлений (летучестей) газов. Примеры построения и анализа диаграмм парциальных давлений в геохимии. Возможности и ограничения при использовании диаграмм парциальных давлений.

Устойчивость фаз как функция Eh и pH среды. Устойчивость воды и оксидов железа. Активности ионов на диаграммах Eh - pH . Сводные диаграммы. Естественные пределы значений Eh и pH в экзогенных и гидротермальных системах. Примеры построения и использования диаграмм Eh - pH в геохимии.

Раздел 8. Термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов

Методология построения модели и задачи моделирования. Понятия геологической, физико-химической и математической моделей, соотношения и взаимосвязи между ними. Локальные равновесия, равновесия и динамика, расчет равновесного состояния и моделирование процесса, равновесно-динамическое моделирование, задачи моделирования с примерами.

Расчет равновесий. Алгоритмы расчета, их классификация и возможности; данные для расчетов и их источники; результаты расчетов; особенности интерпретации результатов, типичные затруднения.

Постановка геологической модели. Исходные данные и их контроль (породы, растворы, минералы); альтернативные модели; набор элементов; упрощения модели. Формирование физико-химической модели. Термодинамические данные и их выбор (включение и исключение фаз); коэффициенты активности; источники данных. Верификация результатов моделирования и анализ этих данных; корректировка моделей. Параметры - T , P , отношение порода/вода и др.

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

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

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

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым студентом выполненных расчетных работ, по которым проводится обсуждение.

При проведении самостоятельной работы предполагается решение и обработка результатов расчетов, выполненных при проведении индивидуальных заданий (13 расчетных задач), и подготовка сообщений о свойствах исследованных систем.

Расчетные домашние задания:

Название	Содержание
Оценка стандартной энтропии минералов при 298.15K и 1 бар.	Расчет среднего численного значения стандартной энтропии минералов из оценок различными методами (Латимера, Келли, Файфа и др.). Определение погрешности оценки.
Определение условий протекания реакции по известным значениям $DfG^\circ(T)$ и текущим значениям активностей (летучестей) реагентов.	Определение активностей ионов, при которых реакция с участием минералов и водного раствора или газа будет происходить в заданном направлении.
Определение значений $DfG^\circ(T)$ 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 $DfG^\circ(T)$ минералов для определенного ряда повышенных температур используя приведенные энергии Гиббса - $F^\circ(T)$.	Расчет энергий образования минералов из простых веществ при повышенных температурах через приведенные энергии Гиббса.
Определение условий протекания реакций между твердыми фазами и (или) с участием газа при повышенных температурах и давлениях.	Расчет P - T условий равновесия определенных минеральных реакций (твердое-твердое, твердое-газ). Построение P - T диаграмм полей устойчивости минералов.
Определение условий протекания реакций с участием растворенного вещества при повышенных температурах и давлениях.	Расчет констант реакций при повышенных T и P . Построение диаграмм равновесия в координатах T - $\lg a_i$ и P - $\lg a_i$.
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 .
Коэффициенты активности растворенных в воде веществ.	Расчет коэффициентов активности различных компонентов в водных растворах. Построение графиков зависимости от температуры и ионной силы.
Определение степени насыщенности природных вод относительно карбонатов.	Расчет коэффициентов активности ионов и активности карбонат-иона. Расчет степени насыщенности реальных озерных или речных вод относительно кальцита исходя из данных химического анализа.
Определение растворимости отдельных минералов.	Расчет растворимости карбонатов при различных температурах, парциальных давлениях углекислого газа.

Название	Содержание
Построение и анализ диаграмм парциального давления.	Расчет необходимых констант реакций, графическое построение диаграмм для реальных природных систем в координатах $\lg P_i - \lg P_j$.
Построение и анализ диаграмм pH - Eh .	Расчет окислительно-восстановительных потенциалов реакций, построение диаграммы pH - Eh для системы заданного состава.
Термодинамическое моделирование при использовании пакета программ HCh.	Расчет равновесного состояния системы MgO - SiO_2 - H_2O - CO_2 - $NaCl$. Построение и анализ диаграммы растворимости: характер растворимости минералов, минералы устойчивые при взаимодействии с водой при различных T , P и составах системы.

6.2. 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. Конгруэнтная и инконгруэнтная растворимость соединений. Принципиальный вид трехкомпонентной диаграммы растворимости с конгруэнтно (инконгруэнтно), растворяющимися соединениями.

18. Способы изображения составов в трехкомпонентных системах. Принципиальный вид диаграммы и анализ поведения фигуративной точки при испарении в трехкомпонентной системе с несколькими инконгруэнтно растворяющимися соединениями.

19. Устойчивость минералов как функция парциального давления газов. Возможности и ограничения при применении диаграмм парциальных давлений в геохимии.

20. Основные соотношения термодинамических функций при анализе окислительно-восстановительных реакций. Стандартный водородный потенциал. Диаграммы $Eh-pH$.

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

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

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: теоретических основ, принципов и методов термодинамического подхода к анализу геохимических процессов, возможностей и ограничений термодинамики при изучении природных процессов, методов и источников получения термодинамической информации для проведения расчетов.	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Систематические знания
Умения: выполнять термодинамические расчеты при анализе природных систем в широком диапазоне физико-химических параметров, интерпретировать результаты термодинамических расчетов для анализа условий протекания природных геологических процессов.	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не систематическое умение, допускает неточности не принципиального характера	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать физико-химические расчеты.	Успешное умение использовать физико-химические расчеты для анализа геологических систем.
Владения: навыками и приемами работы с термодинамическими данными, включая поиск и подготовку исходной термодинамической информации, проведение циклов вычислений, обработку и графическое отображение результатов отдельных термодинамических расчетов и моделирования процессов на ЭВМ.	Навыки владения и использования термодинамических данных отсутствуют	Фрагментарное владение методикой, наличие отдельных навыков	В целом сформированные навыки использования работ с термодинамическими данными.	Владение методами и навыками работы с термодинамическими данными при анализе природных систем.

7. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и дополнительной литературы.

- основная литература:

Борисов М.В., Шваров Ю.В. Термодинамика геохимических процессов. М., МГУ, 1992, 254 с.

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.

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

Инструкция пользователя пакета программ HCh. МГУ, 2009. – <http://www.geol.msu.ru/deps/geochems/soft/index.html>

- дополнительная литература:

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

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

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

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

Шваров Ю.В. Алгоритмизация численного равновесного моделирования динамических геохимических процессов. Геохимия, 1999, № 6, 646-652.

Шваров Ю.В. HCh: новые возможности термодинамического моделирования геохимических систем, предоставляемые Windows// Геохимия, 2008, № 8, 898-903.

Бычков А.Ю. Геохимическая модель современного рудообразования в кальдере Узон (Камчатка). М., ГЕОС, 2009, 124 с.

- Перечень лицензионного программного обеспечения: пакеты программ Microsoft Office Excel, Microsoft Office PowerPoint (при необходимости)
- Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем: нет
- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»: нет
- Описание материально-технической базы:
компьютерный класс на 6-7 мест, оборудованный персональными компьютерами, мультимедийный проектор и экран для демонстрации презентаций. Пакет программ HCh (автор Ю.В.Шваров, кафедра геохимии МГУ).

8. Язык преподавания – русский.

9. Преподаватель – профессор, д.г.-м.н. Борисов М.В.

10. Разработчик программы: – профессор, д.г.-м.н. Борисов М.В.