

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
«Пермский национальный исследовательский
политехнический университет»



УТВЕРЖДАЮ
Руководитель программы аспирантуры

Л.Д. Аснин
к.х.н., доцент кафедры ХБТ

« 20 » « Май » 2022 г.

**Рабочая программа дисциплины по программе аспирантуры
«Фазовые равновесия и фазовые превращения»**

Научная специальность 1.4.4. Физическая химия

Направленность (профиль) программы Физическая химия

аспирантуры Выпускная(ие) кафедра(ы) Химия и биотехнология (ХБТ)

Форма обучения

Очная

Курс: 2

Семестр (ы): 4

Виды контроля с указанием семестра:

Зачет: 4

Диф.зачет

Пермь 2022

1. Общие положения

Рабочая программа дисциплины «Фазовые равновесия и фазовые превращения» разработана на основании следующих нормативных документов:

- Приказ Минобрнауки России от 20.10.2021 N 951 "Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)";
- Постановление Правительства РФ от 30.11.2021 N 2122 "Об утверждении Положения о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)";
- Самостоятельно устанавливаемые требования к реализуемым программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре Пермского национального исследовательского политехнического университета;
- Базовый план по программе аспирантуры;
- Паспорт научной специальности.

1.1 Цель учебной дисциплины – формирование комплекса знаний, умений и навыков в области фазовых равновесий и фазовых превращений.

1.2 Место учебной дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Фазовые равновесия и фазовые превращения» является дисциплиной по выбору образовательного компонента плана аспиранта.

Дисциплина используется при подготовке к сдаче кандидатского экзамена по специальности 1.4.4. – Физическая химия..

Кандидатский экзамен представляют собой форму оценки степени подготовленности соискателя ученой степени кандидата наук к проведению научных исследований по конкретной научной специальности и отрасли науки, по которой подготавливается или подготовлена диссертация.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате изучения дисциплины аспирант должен демонстрировать следующие результаты:

Знать:

- закономерности фазовых равновесий в гетерогенных системах;
- закономерности фазовых переходов;
- термодинамическое описание фазовых равновесий и переходов;
- закономерности влияния физико-химических факторов на фазовые равновесия и переходы;
- основы физико-химического анализа;

Уметь:

- анализировать фазовые диаграммы;
- анализировать данные физико-химического анализа.

Владеть:

- методами экспериментального изучения фазовых равновесий и переходов;

- навыками регулирования фазовых равновесий и перевода гетерогенных систем в гомогенное состояние.
- методами моделирования фазовых равновесий.

3. Структура учебной дисциплины по видам и формам учебной работы

Таблица 1

Объем и виды учебной работы

№ п.п.	Вид учебной работы	Трудоемкость, ч
		3 семестр
1	Аудиторная работа	21
	В том числе:	
	Лекции (Л)	-
	Практические занятия (ПЗ)	16
2	Контроль самостоятельной работы (КСР)	5
	Самостоятельная работа (СР)	51
	Форма итогового контроля:	Зачет

4. Содержание учебной дисциплины

4.1. Содержание разделов и тем учебной дисциплины

Раздел 1. Закономерности фазовых равновесий и переходов

(Л – 0, ПЗ – 16, СР – 51)

Тема 1. Основные термодинамические соотношения, описывающие фазовые равновесия и переходы

Общие понятия о гетерогенных равновесиях и фазовых переходах. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Химический потенциал. Метод активности. Правило фаз Гиббса. Уравнение Гиббса – Дюгема.

Тема 2. Равновесие фаз в однокомпонентных системах

Основные элементы фазовой диаграммы. Типы фазовых диаграмм. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса. Полиморфные превращения в твердых фазах. Фазовые переходы первого и второго рода.

Тема 3. Равновесие фаз в трехкомпонентных системах

Способы изображения состава в трехкомпонентных системах. Фазовые равновесия в простейших трехкомпонентных системах. Трехкомпонентные системы с простыми эвтектиками в граничных системах.

Тема 4. Экспериментальные методы исследования фазовых равновесий и переходов

Фазовая диаграмма и данные, необходимые для её построения. Основные положения физико-химического анализа. Принципы физико-химического анализа: принцип непрерывности, принцип соответствия, принцип совместимости.

Тема 5. Моделирование фазовых равновесий

Метод групповых вкладов в прогнозировании свойств органических веществ. Модель UNIFAC. Расчёт коэффициентов активности компонентов в фазах гетерогенной системы. Алгоритм итерационного приближения к выполнению условий фазового равновесия. Прогнозирование равновесного состава несмешивающихся жидких фаз в политермических условиях.

4.2. Перечень тем практических занятий

Таблица 2

Темы практических занятий (из пункта 4.1)

№ п.п.	Номер темы дисциплины	Наименование темы практического занятия	Наименование оценочного средства	Представление оценочного средства
1	1	Термодинамические закономерности фазовых равновесий и переходов	Собеседование. Творческое задание.	Вопросы по темам / разделам дисциплины. Темы творческих заданий.
2	2	Фазовые равновесия и переходы в однокомпонентных системах	Собеседование. Творческое задание.	Вопросы по темам / разделам дисциплины. Темы творческих заданий.
3	3	Закономерности фазового равновесия в трехкомпонентных системах	Собеседование. Творческое задание.	Вопросы по темам / разделам дисциплины. Темы творческих заданий.
4	4	Методы экспериментального изучения фазовых равновесий и переходов	Собеседование. Творческое задание.	Вопросы по темам / разделам дисциплины. Темы творческих заданий.
5	5	Математические модели для прогнозирования фазовых равновесий	Собеседование. Творческое задание.	Вопросы по темам / разделам дисциплины. Темы творческих заданий.

4.3. Перечень тем для самостоятельной работы аспирантов

Самостоятельная работа аспирантов заключается в теоретическом изучении конкретных вопросов и выполнении творческих заданий.

Таблица 3

Темы самостоятельных заданий

№ п.п.	Номер темы дисциплины	Наименование темы самостоятельной работы	Наименование оценочного средства	Представление оценочного средства
1	1	Фугитивность и коэффициент активности. Выбор стандартного состояния. Термодинамические условия фазового равновесия.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины
2	2	Критическое состояние вещества. Жидкокристаллическое состояние вещества. Сверхкритическое состояние	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины.

		вещества.		
3	3	Трехкомпонентные системы с образованием конгруэнтноплавящегося соединения в одной из граничных систем. Трехкомпонентные жидкофазные системы с областями расслаивания. Тройные взаимные системы.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины
4	4	Методы физико-химического анализа гетерогенных систем. Термический и дифференциально-термический методы анализа. Термограммы. Микроструктурный анализ. Рентгенофазовый анализ.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины
5	5	Прогнозирование растворимости газов в жидкостях с применением параметров Хансена.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины

5. Методические указания для аспирантов по изучению дисциплины

При изучении дисциплины «Фазовые равновесия и фазовые превращения» аспирантам целесообразно выполнять следующие рекомендации:

1. Изучение учебной дисциплины должно вестись систематически;
2. После изучения какого-либо раздела по учебнику или конспектным материалам рекомендуется по памяти воспроизвести основные термины, определения, понятия раздела;
3. Вся тематика вопросов, изучаемых самостоятельно, задается преподавателем. Им же даются источники (в первую очередь вновь изданные в периодической научной литературе) для более детального понимания вопросов, озвученных на лекции;

6. Перечень учебно-методического, библиотечно-справочного и информационного, информационно-справочного обеспечения для работы аспиранта по дисциплине

6.1. Библиотечные фонды и библиотечно-справочные системы

№	Библиографическое описание (автор, заглавие, вид издания, место, издательство, год издания, количество страниц)	Количество экземпляров в библиотеке+кафедре; местонахождение электронных изданий
1	2	3
1 Основная литература		
1	Попова А.А. Физическая химия: учебное пособие / А.А. Попова, Т.Б. Попова. - Санкт-Петербург: Лань, 2015. - 494 с.	1 + ЭБС «Лань»
2	Морачевский А.Г. Физическая химия. Гетерогенные системы: учебное пособие для вузов / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2015. - 184 с.	2 + ЭБС «Лань»

№	Библиографическое описание (автор, заглавие, вид издания, место, издательство, год издания, количество страниц)	Количество экземпляров в библиотеке+кафедре; местонахождение электронных изданий
1	2	3
3	Афанасьев Б.Н. Физическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. - Электрон. дан. - СПб.: Лань, 2012. - 464 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4312 , по IP-адресам компьютер. сети ПНИПУ	ЭБС «Лань»
2 Дополнительная литература		
2.1 Учебно-методические, научные издания		
1	Нигматуллин Н.Г. Физическая и коллоидная химия [Электронный ресурс]: учебное пособие. - Электрон. дан. - СПб.: Лань, 2015. - 276 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=67473 , по IP-адресам компьютер. сети ПНИПУ	ЭБС «Лань»
2	Морачевский А.Г. Физическая химия. Поверхностные явления и дисперсные системы [Электронный ресурс] : учебное пособие. - Электрон. дан. - СПб.: Лань, 2015. - 155 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=64335 , по IP-адресам компьютер. сети ПНИПУ	ЭБС «Лань»
2.2 Периодические издания		
1	Журнал физической химии	
2.3 Нормативно-технические издания		
1	-	
2.4 Официальные издания		
1	-	

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

6.2.1. Информационные и информационно-справочные системы

1. Электронная библиотека Пермского национального исследовательского политехнического университета [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных электрон. док., издан. в Изд-ве ПНИПУ] / Перм. нац. исслед. политехн. ун-т, Науч. б-ка. – Пермь, 2016. – Режим доступа: <http://elib.pstu.ru>, свободный. – Загл. с экрана.

2. Электронно-библиотечная система Издательство «Лань» [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. версии кн., журн. по гуманитар., обществ., естеств. и техн. наукам] / Электрон.-библ. система «Изд-ва «Лань». – Санкт-Петербург, 2010-2016. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

3. Электронная библиотека диссертаций РГБ [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. версии дис. и автореф. дис. по всем отраслям знания] / [Электрон. б-ка дис.](#) – Москва, 2003-2016. – Режим доступа: <http://diss.rsl.ru>, компьютер. сеть Науч. б-ки Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : мультидисциплинар. электрон. версии журн. на ин. яз.] / [Науч. электрон. б-ка](#). – Москва, 2000-2016. – Режим доступа: <http://elibrary.ru>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
5. Национальна Электронная Библиотека [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. версии кн. по всем отраслям знания] / М-во культуры Рос. Федерации. – [Москва, 2016]. – Режим доступа: <http://нэб.пф>, компьютер. сеть Науч. б-ки Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
6. Электронно-библиотечная система Библиокомплектатор [Электронный ресурс] : [платформа и полнотекстовая база данных : электрон. версии кн., журн. по гуманит., обществ., естеств. и техн. наукам] / Ай Пи Эр Медиа, Ай Пи Ар Букс. – [Саратов, 2016]. – Режим доступа: <http://www.bibliocomplectator.ru>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
7. ScienceDirect [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. науч. журн. и кн. по обществ., естеств. и техн. наукам на англ. яз.] / Elsevier B. V. – Amsterdam, 2016. – Режим доступа: <http://www.sciencedirect.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
8. ACS Publications [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. журн. по хим. наукам на англ. яз.] / American Chemical Society (ACS). – Washington, 2016. – Режим доступа: <http://www.pubs.acs.org>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
9. Springer [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. журн., кн. по гуманит., обществ., естеств. и техн. наукам, протоколы исследований на англ. и нем. яз.] / Springer International Publishing AG, Part of Springer Science+Business Media. – Cham, 2016. – Режим доступа: <http://link.springer.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
10. Wiley Online Library [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. мультидисциплинар. журн. на англ. яз.] / John Wiley & Sons, Inc. – Hoboken, 1999-2016. – Режим доступа: <http://www.onlinelibrary.wiley.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
11. EBSCO Databases [Электронный ресурс] : [полнотекстовые базы данных журн. и кн. по гуманит., обществ., естеств. и техн. наукам на ин. яз.] / EBSCO Publishing. – Ipswich, 2016. – Режим доступа: <http://search.ebscohost.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
12. SAGE Journals [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. мультидисциплинар. журн. на англ. яз.] / SAGE Publications. – Los Angeles, 2016. – Режим доступа: <http://online.sagepub.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
13. Taylor & Francis Online [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. мультидисциплинар. журн. на англ. яз.] / Informa UK Ltd. – London, 2016. – Режим доступа: <http://www.tandfonline.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.
14. JSTOR: Arts & Sciences VII Collection [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. журн. по гуманит., обществ. и естеств. наукам на англ. яз.] / ИТНАКА. – New York, 2000-2016. – Режим доступа: <http://www.jstor.org>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

15. Cambridge Journals [Electronic resource : полнотекстовая база данных : электрон. журн. по гуманит., естеств., и техн. наукам на англ. яз.] / University of Cambridge. – Cambridge : Cambridge University Press, 1770-2012. – Режим доступа: <http://journals.cambridge.org/>. – Загл. с экрана. 11.

16. ProQuest Dissertations & Theses Global [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : дис. и дипломные работы на ин. яз. по всем отраслям знания] / ProQuest LLC. – Ann Arbor, 2016. – Режим доступа: <http://search.proquest.com/pqdtglobal/dissertations>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

7. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

7.1. Основное учебное оборудование. Рабочее место аспиранта.

Таблица 4

№ п.п.	Наименование и марка оборудования (стенда, макета, плаката, лабораторное оборудование)	Кол-во, ед.	Форма приобретения / владения (собственность, оперативное управление, аренда и т.п.)	Номер аудитории
1	2	3	4	5
1	Персональные компьютеры (локальная компьютерная сеть)	5	Оперативное управление	215, корпус Б (ХТФ)

8. Фонд оценочных средств

Освоение учебного материала дисциплины запланировано в течение одного семестра. Формой контроля освоения результатов обучения по дисциплине является зачет, проводимый с учетом результатов текущего контроля.

8.1. Описание показателей и критериев оценивания, описание шкал оценивания.

Контроль качества освоения дисциплины включает в себя текущий контроль успеваемости и промежуточную аттестацию аспирантов

Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости обеспечивает оценку освоения дисциплин и проводится в форме собеседования и защиты отчета о творческом задании.

• Собеседование

Для оценки **знаний** аспирантов проводится собеседование в виде специальной беседы преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной для выяснения объема знаний по определенному разделу, теме, проблеме.

Собеседование может выполняться в индивидуальном порядке или группой аспирантов.

• Защита отчета о творческом задании

Для оценки **умений и владений** аспирантов используется творческое задание, имеющее нестандартное решение и позволяющее интегрировать знания различных областей, аргументировать собственную точку зрения.

Творческие задания могут выполняться в индивидуальном порядке или группой аспирантов.

Промежуточная аттестация

Допуск к промежуточной аттестации осуществляется по результатам текущего контроля. Промежуточная аттестация проводится в виде зачета по дисциплине по результатам выполнения заданий практических занятий.

- **Шкалы оценивания результатов обучения при сдаче зачета:**

Оценка результатов обучения по дисциплине «Макрокинетика химических реакций в гетерогенных системах» проводится по шкале оценивания «зачтено», «незачтено» путем выборочного контроля во время зачета.

Типовые шкалы и критерии оценки результатов обучения при сдаче зачета приведены в табл. 5.

Таблица 5

Шкала оценивания результатов освоения на зачете

Оценка	Критерии оценивания
<i>Зачтено</i>	Аспирант выполнил все задания на практических занятиях.
<i>Незачтено</i>	Аспирант не выполнил одно или более заданий на практических занятиях

9. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине

Задания для текущего контроля и проведения промежуточной аттестации должны быть направлены на оценивание:

1. уровня освоения теоретических понятий, научных основ профессиональной деятельности;
2. степени готовности аспиранта применять теоретические знания и профессионально значимую информацию и оценивание сформированности когнитивных умений.
3. приобретенных умений, профессионально значимых для профессиональной деятельности.

10. Типовые контрольные вопросы и задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов освоения дисциплины

10.1. Типовые творческие задания:

1. На основе научных периодических источников обобщить экспериментальные данные о растворимости кислорода в алканах с различной длиной углеводородного радикала. Выявить общие закономерности и противоречия в данных разных авторов. Предложить методику прогнозирования растворимости кислорода в алканах в зависимости от состава и структуры их молекул.
2. На основе научных периодических источников обобщить экспериментальные данные о растворимости аминокислот в метаноле. Выявить общие закономерности и противоречия в данных разных авторов. Предложить методику прогнозирования растворимости аминокислот в метаноле в зависимости от состава и структуры их молекул.
3. На основе научных периодических источников обобщить экспериментальные данные о растворимости кислорода в водных растворах электролитов. Выявить общие закономерности и противоречия в данных разных авторов. Предложить методику прогнозирования растворимости кислорода в водных растворах электролитов.
4. На основе научных периодических источников обобщить экспериментальные данные о растворимости озона в водных растворах электролитов. Выявить общие

закономерности и противоречия в данных разных авторов. Предложить методику прогнозирования растворимости озона в водных растворах электролитов.

5. На основе научных периодических источников обобщить экспериментальные данные о растворимости кислорода в водных растворах производных фенола. Выявить общие закономерности и противоречия в данных разных авторов. Предложить методику прогнозирования растворимости кислорода в водных растворах производных фенола.

10.2. Типовые контрольные вопросы для оценивания знаний на зачете по дисциплине:

1. Общие понятия о гетерогенных равновесиях и фазовых переходах. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Химический потенциал. Метод активности.
2. Правило фаз Гиббса. Уравнение Гиббса – Дюгема. Фугитивность и коэффициент активности. Выбор стандартного состояния. Термодинамические условия фазового равновесия.
3. Равновесие фаз в однокомпонентных системах. Основные элементы фазовой диаграммы. Типы фазовых диаграмм. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса. Полиморфные превращения в твердых фазах. Фазовые переходы первого и второго рода.
4. Критическое состояние вещества. Жидкокристаллическое состояние вещества. Сверхкритическое состояние вещества.
5. Равновесие фаз в трехкомпонентных системах. Способы изображения состава в трехкомпонентных системах. Фазовые равновесия в простейших трехкомпонентных системах. Трехкомпонентные системы с простыми эвтектиками в граничных системах.
6. Фазовая диаграмма и данные, необходимые для её построения. Основные положения физико-химического анализа. Принципы физико-химического анализа: принцип непрерывности, принцип соответствия, принцип совместимости.
7. Метод групповых вкладов в прогнозировании свойств органических веществ. Модель UNIFAC. Расчёт коэффициентов активности компонентов в фазах гетерогенной системы. Алгоритм итерационного приближения к выполнению условий фазового равновесия. Прогнозирование равновесного состава несмешивающихся жидких фаз в политермических условиях.
8. Методы физико-химического анализа гетерогенных систем. Термический и дифференциально-термический методы анализа. Термограммы. Микроструктурный анализ. Рентгенофазовый анализ.
9. Прогнозирование растворимости газов в жидкостях с применением параметров Хансена.

10.3. Типовые контрольные задания для оценивания приобретенных умений и владений на зачете по дисциплине:

1. Рассчитайте коэффициенты активности компонентов в гомогенной системе вода – метанол при температуре 303 К и мольной доле метанола равной 0,05.
2. Найдите в научном издании (в сети «Интернет») фазовую диаграмму двухкомпонентной системы этанол – триолеин для политермических условий. С использованием данной диаграммы определите равновесный состав несмешивающихся жидких фаз при 30°C в системе, состоящей из 50% масс. этанола и 50% масс. триолеина.
3. Найдите в научном издании (в сети «Интернет») фазовую диаграмму трёхкомпонентной системы этанол – триолеин – олеиновая кислота для температуры 30°C. С использованием данной диаграммы определите равновесный состав несмешивающихся жидких фаз в системе, состоящей из 40% масс. этанола, 40% масс. триолеина и 20% масс. олеиновой кислоты.

4. Рассчитайте растворимость кислорода в водном растворе сульфата натрия с концентрацией 0,01 моль/л при температуре 298 К.
5. Рассчитайте растворимость озона в водном растворе хлорида калия с концентрацией 0,005 моль/л при температуре 298 К.
6. Рассчитайте растворимость метана в водном растворе нитрата калия с концентрацией 0,015 моль/л при температуре 298 К.

Полный комплект вопросов и заданий в форме утвержденных билетов хранится на кафедре «ХБТ».

Лист регистрации изменений

№ п.п.	Содержание изменения	Дата, номер протокола заседания кафедры. Подпись заведующего кафедрой
1	2	3
1		
2		
3		
4		