

## АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

### «ФИЗИКО-ХИМИЯ МЕТАЛЛОВ И НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ»

#### 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»

код направления подготовки

#### 4 семестр

#### 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ:

- формирование теоретических представлений об основных понятиях и законах химической термодинамики и кинетики применительно к процессам получения материалов функционального и конструкционного назначения;
- освоение принципов научного подхода к формированию материалов с заданными свойствами, базирующегося на законах и постулатах физико-химического материаловедения;
- овладение навыками применения расчетных физико-химических методов к анализу реальных систем и процессов в металлургии и материаловедении.

**2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО:** дисциплина входит в вариативную часть блока 1 и является обязательной при освоении ОПОП бакалавриата по направлению 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов».

#### 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ:

- готовность применять фундаментальные математические, естественнонаучные и общеинженерные знания в профессиональной деятельности (ОПК-3);
- способность использовать в исследованиях и расчетах знания о методах исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств веществ (материалов), физических и химических процессах, протекающих в материалах при их получении, обработке и модификации (ПК-4);
- способность выбирать и применять соответствующие методы моделирования физических, химических и технологических процессов (ПК-7).

#### 4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ:

##### Раздел 1. Теоретические основы физико-химии материалов.

##### **Тема №1. Физическая химия как основа новых технологий и материалов.**

Место физической химии в современной науке. Физическая химия как фундаментальная основа металлургии и материаловедения. Роль расчетных и экспериментальных методов термодинамики и кинетики в металлургии и материаловедении.

**Тема №2. Основные понятия и законы термодинамики.** Термодинамическая система и окружающая среда. Параметры состояния и состояние системы. Уравнение состояния. Термодинамический процесс. Равновесные и неравновесные процессы. Теплота и работа как функции процесса. Внутренняя энергия и энтальпия как функции состояния термодинамической системы. Первый закон термодинамики и его аналитические выражения. Оценка тепловых эффектов при анализе литейных и металлургических процессов. Обратимые и необратимые процессы. Аналитические выражения и пределы применимости второго закона термодинамики. Термодинамическая вероятность и энтропия. Энергия Гельмгольца и энергия Гиббса. Уравнение изотермы реакции. Константа равновесия реакции и способы ее выражения. Третий закон термодинамики в формулировке Планка. Энтропия и теплоемкость вещества при

абсолютном нуле температуры. Вычисление абсолютного значения энтропии по теплоемкостям веществ и теплотам их фазовых превращений.

**Тема №3. Характеристические функции и дифференциальные соотношения термодинамики.** Внутренняя энергия. Энтальпия. Свободная энергия (изохорно-изотермический потенциал) и свободная энтальпия (изобарно-изотермический потенциал). Химический потенциал. Функции Массье-Планка. Термические коэффициенты и связь между ними. Соотношения Максвелла. Частные производные термодинамических потенциалов. Зависимость изобарной и изохорной теплоемкостей от объема и давления. Связь между изобарной и изохорной теплоемкостями. Дифференциальное уравнение изоэнтропы. Уравнение Лапласа.

**Тема №4. Термодинамическое равновесие.** Основные понятия и определения. Динамическое равновесие системы. Уравнение состояния и сводное уравнение двух законов термодинамики для многокомпонентных систем. Общие условия равновесия фаз в термодинамических системах. Равновесие в гомогенных и гетерогенных системах. Фазовые переходы первого и второго рода. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса.

**Тема №5. Кинетика химических реакций.** Скорость гомогенной химической реакции. Зависимость скорости реакции от концентрации реагентов. Динамическая природа химического равновесия. Порядок и молекулярность реакции. Изменение концентрации реагирующих веществ со временем для реакций разного порядка. Период полупревращения. Методы определения порядка химической реакции. Зависимость скорости реакции от температуры. Теория активных соударений. Энергия активации и ее определение. Гомогенный катализ. Скорость гетерогенной химической реакции. Этапы и режим процесса. Диффузия в твердых, жидких и газовых средах. Механизм молекулярной диффузии в конденсированных фазах. Формально-кинетическое уравнение гетерогенной реакции и его анализ. Особенности реакции, идущей в диффузионном режиме. Адсорбционно-химический акт. Влияние адсорбции на кинетические характеристики гетерогенной реакции: порядок и энергию активации. Гетерогенный катализ.

**Тема №6. Термодинамическая теория растворов.** Парциальные мольные величины. Растворы: общие сведения. Классификация растворов. Способы выражения концентрации раствора. Функции смешения. Внутренняя энергия, энтальпия, энтропия смешения. Идеальные растворы. Бесконечно разбавленные растворы. Совершенные растворы. Регулярные растворы. Субрегулярные и квазирегулярные растворы. Реальные растворы. Термодинамические функции компонентов в растворах. Избыточные величины. Термодинамика фазовых равновесий в растворах. Уравнение Гиббса-Дюгема. Активность компонентов металлического расплава. Коэффициент активности.

## **Раздел №2. Физико-химические основы систем и процессов технологии материалов**

**Тема №7. Физико-химические свойства веществ.** Термодинамические свойства неорганических соединений: энтальпия и энтропия образования, стандартная теплоемкость, стандартная энергия Гиббса образования соединения из простых веществ. Плотность вещества. Поверхностное натяжение и вязкость вещества в расплавленном состоянии. Приближенный расчет и прогнозирование физико-химических свойств неорганических соединений. Кинетические свойства металлических и неметаллических веществ: теплопроводность, температуропроводность, электропроводность, удельное электрическое сопротивление, коэффициент Холла.

**Тема №8. Термодинамика фазовых равновесий.** Правило фаз Гиббса. Диаграммы состояния. Физико-химический анализ. Фазовое равновесие в однокомпонентной гетерогенной системе. Расчет и построение фазовых диаграмм. CALPHAD-метод. Геометрическая термодинамика. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Диаграммы состояния трехкомпонентных систем. Графическое представление многокомпонентных фазовых диаграмм. Термодинамические закономерности сплавообразования в двойных и тройных системах.

**Тема №9. Основы физико-химии поверхностных явлений в металлургии и материаловедении.** Поверхностное натяжение жидких металлов. Смачивание твердых тел жидкостями. Поверхностно-активные вещества. Адсорбционное уравнение Гиббса. Поверхностные явления в процессах прессования и спекания. Роль поверхностных явлений при спекании в присутствии жидкой фазы. Поверхностные явления и прочность адгезионной связи в композиционных материалах. Термодинамика дисперсных и нанодисперсных систем. Устойчивость дисперсных систем.

**Тема №10. Теоретические основы процессов плавления.** Роль и место физико-химических процессов при плавке сплавов. Нагрев и расплавление шихтовых материалов. Структурные аспекты и теории плавления. Термодинамические основы взаимодействия сплавов с атмосферой печи и футеровкой плавильных агрегатов. Общие сведения о строении металлических расплавов. Современные теории жидкого состояния. Модели микронеоднородного строения. Изменение структуры жидких металлов при нагреве и охлаждении.

**Тема №11. Кристаллизация металлических расплавов.** Влияние и поведение нерастворимых примесей. Равновесная кристаллизация сплавов твердых растворов. Неравновесная кристаллизация. Диффузионное переохлаждение. Влияние процессов неравновесной кристаллизации на образование микро- и макроликвации, усадочных дефектов.

**Тема №12. Взаимосвязь процессов кристаллизации и условий затвердевания.** Характерные особенности процесса затвердевания, величина и строение переходной двухфазной области в литой заготовке и образование различных дефектов в зависимости от реализации физико-химических процессов. Затвердевание стекол и полимеров. Управление физико-химическими процессами при плавке, литье, кристаллизации, затвердевании.

### **Раздел №3. Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении.**

**Тема №13. Стехиометрические расчеты в металлургии и материаловедении.** Законы физической химии, лежащие в основе стехиометрических расчетов. Расчеты по уравнениям химических реакций: реакции без изменения степени окисления; окислительно-восстановительные реакции. Точность вычислений. Роль стехиометрических расчетов.

**Тема №14. Термохимические расчеты.** Расчет тепловых эффектов химических реакций с использованием стандартных энтальпий образования соединений. Учет физических превращений участников реакции при термохимических расчетах. Решение прикладных задач: составление тепловых балансов технологических процессов, вычисление теплотворной способности топлива, оценка эффективности алюминотермических процессов восстановления металлов из руд, анализ процессов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза.

**Тема №15. Термодинамический анализ.** Вычисление констант равновесия металлургических реакций с использованием стандартных термодинамических величин. Метод Темкина-Шварцмана. Термодинамика межфазных взаимодействий в многокомпонентных неорганических системах. Примеры решения прикладных термодинамических задач в металлургии и материаловедении. Оценка ошибок при расчетах константы равновесия и изобарно-изотермического потенциала.

**Тема №16. Расчеты термодинамических функций растворов.** Теплоты смешения. Расчет интегральных теплот растворения для сложных гетерогенных систем. Коэффициенты взаимодействия для разбавленных растворов. Определение термодинамической активности компонентов металлических расплавов. Активность компонентов оксидных систем и металлургических шлаков. Термодинамический анализ процессов окислительного рафинирования при выплавке стали. Оценка изменения изобарно-изотермического потенциала при растворении элементов в жидком железе.

**Тема №17. Расчеты кинетических параметров химических реакций.** Связь между кинетическими и термодинамическими параметрами. Теоретическая оценка кинетических параметров металлургических реакций. Кинетические закономерности окисления металлов. Расчет основных параметров диффузионных процессов при получении материалов твердофазными и жидкофазными методами. Определение коэффициента диффузии и ширины диффузионной зоны для заданных условий. Методы расчета скорости химических реакций. Скорость рафинирования металлических расплавов. Кинетика кристаллизации металлов и сплавов.

**Тема №18. Компьютерные методы в физико-химии материалов.** Применение электронных таблиц MS Excel. Термодинамические расчеты в математическом пакете MathCAD. Специализированные программные комплексы для термодинамического анализа (HSC Chemistry, ThermoCalc, ИВТАНТЕРМО). Оригинальные программные разработки, выполненные на кафедре ТФиКМ ВлГУ, и их применение при термодинамическом моделировании систем и процессов в металлургии и материаловедении металлических и неметаллических материалов.

**5. ВИД АТТЕСТАЦИИ:** экзамен

**6. КОЛИЧЕСТВО ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦ:** 6 ЗЕ

Составитель: доцент кафедры ТФиКМ

Заведующий кафедрой ТФиКМ

Председатель  
учебно-методической комиссии  
направления 22.03.01 «Материаловедение  
и технологии материалов»

«          »            2015 г.

Печать МТО



Е.С. Прусов

В.А. Кечин

В.А. Кечин