

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  
**высшего образования**  
**«Владимирский государственный университет**  
**имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»**  
**(ВлГУ)**

Институт машиностроения и автомобильного транспорта  
(Наименование института)



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**ПРИКЛАДНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И КИНЕТИКА**

(наименование дисциплины)

**направление подготовки / специальность**

**22.04.01 Материаловедение и технологии материалов**

(код и наименование направления подготовки (специальности))

**направленность (профиль) подготовки**

**«Прогрессивные технологии изготовления изделий  
из металлических и неметаллических материалов»**

(направленность (профиль) подготовки))

г. Владимир  
2021 год

## 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Прикладная термодинамика и кинетика» по ОПОП направления 22.04.01 «Материаловедение и технологии материалов» являются:

- 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.

В результате освоения данной дисциплины у студентов формируются основные профессиональные компетенции, отвечающие требованиям ФГОС ВО к результатам освоения ОПОП ВО по направлению 22.04.01 «Материаловедение и технологии материалов».

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

Дисциплина «Прикладная термодинамика и кинетика» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений.

## 3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине, в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	
<b>ПК-1.</b> Способен использовать на практике знания об основных типах металлических, неметаллических и композиционных материалов различного назначения, о влиянии фазового и структурного состояния на свойства материалов	<p><b>ПК- 1.1. Знает</b> основные типы металлических, неметаллических и композиционных материалов различного назначения</p> <p><b>ПК- 1 .2. Умеет</b> использовать влияние фазового и структурного состояния на свойства материалов</p> <p><b>ПК- 1.3. Владеет</b> способностью использовать на практике современные представления наук об основных типах металлических, неметаллических и композиционных материалов различного назначения</p>	<p><b>Знает</b> фундаментальные физико-химические принципы создания металлических, неметаллических и композиционных материалов различного назначения.</p> <p><b>Умеет</b> анализировать процессы и принимать решения на основе априорной информации о физико-химических закономерностях влияния фазового состава и структурного состояния материалов на свойства изделий.</p> <p><b>Владеет</b> навыками по применению основных типов металлических, неметаллических и композиционных материалов различного назначения в практической деятельности.</p>	Тестовые вопросы

#### 4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часов.

##### Тематический план форма обучения – очная

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа обучающихся с педагогическим работником				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	в форме практической подготовки		
1	<b>Раздел 1. Теоретические основы физико-химии материалов</b> <b>Тема 1. Физическая химия как основа новых технологий и материалов.</b> 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.	4	1	2	-	-	2	7	
1	<b>Раздел 1. Теоретические основы физико-химии материалов.</b> <b>Тема 2. Основные понятия и законы термодинамики.</b> 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	4	2	2	2	-	2	7	

	<p>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.</p>								
2	<p><b>Раздел 1. Теоретические основы физико-химии материалов.</b>  <b>Тема 3. Характеристические функции и дифференциальные соотношения термодинамики.</b> 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 изоэнтропии. Уравнение Лапласа.</p>	4	3	2	-	-	2	7	
3.	<p><b>Раздел 1. Теоретические основы физико-химии материалов.</b>  <b>Тема 4. Термодинамическое равновесие.</b> 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 систе-</p>	4	4	2	2	-	2	7	

	мах. Фазовые переходы первого и второго рода. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса.								
4.	<p><b>Раздел 1. Теоретические основы физико-химии материалов.</b></p> <p><b>Тема 5. Кинетика химических реакций.</b> 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.</p>	4	5	2	-	-	2	7	Рейтинг-контроль №1
5.	<p><b>Раздел 1. Теоретические основы физико-химии материалов.</b></p> <p><b>Тема 6. Термодинамическая теория растворов.</b> 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</p>	4	6	2	2	-	2	7	Рейтинг-контроль №1

	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.								
6.	<b>Раздел 2. Физико-химические основы систем и процессов технологии материалов.</b> <b>Тема 7. Физико-химические свойства веществ.</b> 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.	4	7	2	-	-	2	7	
7.	<b>Раздел 2. Физико-химические основы систем и процессов технологии материалов</b> <b>Тема 8. Термодинамика фазовых равновесий.</b> 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 законо-	4	8	2	2	-	2	7	

	мерности сплавообразования в двойных и тройных системах.								
8.	<b>Раздел 2. Физико-химические основы систем и процессов технологии материалов</b> <b>Тема 9. Основы физико-химии поверхностных явлений в металлургии и материаловедении.</b> 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.	4	9	2	-	-	2	7	
9.	<b>Раздел 2. Физико-химические основы систем и процессов технологии материалов</b> <b>Тема 10. Теоретические основы процессов плавления.</b> 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.	4	10	2	2	-	2	7	Рейтинг-контроль № 2
11.	<b>Раздел 2. Физико-химические основы систем и процессов технологии материалов</b> <b>Тема 11. Кристаллизация металлических расплавов.</b> Влияние и поведение нерастворимых примесей. Равновесная кристаллизация сплавов твердых растворов. Неравновесная кристаллизация. Диффузионное	4	11	2	-	-	2	7	Рейтинг-контроль № 2

	переохлаждение. Влияние процессов неравновесной кристаллизации на образование микро- и макроликвации, усадочных дефектов.								
12.	<b>Раздел 2. Физико-химические основы систем и процессов технологии материалов.</b> <b>Тема 12. Взаимосвязь процессов кристаллизации и условий затвердевания.</b> 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.	4	12	2	2	-	2	7	Рейтинг-контроль № 2
13.	<b>Раздел 3. Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении.</b> <b>Тема 13. Стехиометрические расчеты в металлургии и материаловедении.</b> 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.	4	13	2	-	-	2	7	
14.	<b>Раздел 3. Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении.</b> <b>Тема 14. Термохимические расчеты.</b> 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 эф-	4	14	2	2	-	2	7	

	фektivности алюминотермических процессов восстановления металлов из руд, анализ процессов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза.								
15.	<b>Раздел 3. Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении.</b> <b>Тема 15. Термодинамический анализ.</b> 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.	4	15	2	-	-	2	7	
16.	<b>Раздел 3. Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении.</b> <b>Тема 16. Расчеты термодинамических функций растворов.</b> 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.	4	16	2	2	-	2	7	
17.	<b>Раздел 3. Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении.</b> <b>Тема 17. Расчеты кинетических параметров химических</b>	4	17	2	-	-	2	7	Рейтинг-контроль №3

	<p><b>реакций.</b> 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.</p>								
18.	<p><b>Раздел 3. Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении.</b>  <b>Тема 18. Компьютерные методы в физико-химии материалов.</b> 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.</p>	4	18	2	2	-	2	7	Рейтинг-контроль №3
Всего за седьмой семестр				18	18	-	-	126	Экзамен
Наличие в дисциплине КП/КР					-				

## Содержание лекционных занятий по дисциплине

### 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 изоэнтропии. 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 хи-

мических 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 алюминиотермических 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 термохимическими 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.

## Содержание практических/лабораторных занятий по дисциплине

### Практические работы

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

1. Определение тепловых эффектов литейно-металлургических процессов
2. Расчет констант равновесия металлургических реакций.
3. Термодинамика межфазных взаимодействий в металлургических системах

#### Раздел 2. Физико-химические основы процессов технологии материалов

4. Расчет физических свойств металлов и сплавов
5. Определение равновесных коэффициентов распределения компонентов сплава

6. Определение состава и массы равновесных фаз при различных температурах в зависимости от исходного состава сплава

### **Раздел 3. Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении**

7. Определение термодинамической активности компонентов металлических расплавов  
8. Термодинамический анализ процессов окислительного рафинирования при выплавке стали  
9. Расчет основных параметров диффузионных процессов в металлических расплавах

## **5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ**

**5.1. Текущий контроль успеваемости** проводится в форме рейтинг-контроля. Предусмотрено проведение трех рейтинг-контролей. Ниже приведены контрольные вопросы для проведения текущего контроля успеваемости.

### **Рейтинг-контроль №1**

1. Физическая химия как фундаментальная основа металлургии и материаловедения.
2. Термодинамическая система и окружающая среда.
3. Первый закон термодинамики, его аналитические выражения и применение при анализе литейных и металлургических процессов.
4. Аналитические выражения и пределы применимости второго закона термодинамики.
5. Термодинамическая вероятность и энтропия.
6. Энергия Гельмгольца и энергия Гиббса.
7. Константа равновесия реакции и способы ее выражения.
8. Анализ термодинамического равновесия по методу М.И. Темкина и Л.А. Шварцмана.
9. Третий закон термодинамики в формулировке Планка.
10. Общие условия равновесия фаз в термодинамических системах.
11. Вычисление абсолютного значения энтропии по теплоемкостям веществ и теплотам их фазовых превращений.
12. Частные производные термодинамических потенциалов
13. Фазовые переходы первого и второго рода
14. Скорость гомогенных и гетерогенных реакций.
15. Термодинамические функции компонентов в растворах.

### **Рейтинг-контроль №2**

1. Термодинамические свойства неорганических соединений.
2. Расчет и прогнозирование физико-химических свойств неорганических соединений.
3. Поверхностное натяжение и вязкость вещества в расплавленном состоянии.
4. Расчет и построение фазовых диаграмм.
5. Геометрическая термодинамика: диаграммы состояния двухкомпонентных систем.
6. Геометрическая термодинамика: диаграммы состояния трехкомпонентных систем.
7. Термодинамика дисперсных и нанодисперсных систем.
8. Смачивание твердых тел жидкостями.
9. Структурные аспекты и теории плавления.
10. Современные теории жидкого состояния металлов и сплавов.
11. Равновесная кристаллизация сплавов твердых растворов.

12. Неравновесная кристаллизация.
13. Диффузионное переохлаждение.
14. Взаимосвязь процессов кристаллизации и условий затвердевания.
15. Управление физико-химическими процессами при плавке, литье, кристаллизации, затвердевании.

### Рейтинг-контроль № 3

1. Стехиометрические расчеты в металлургии и материаловедении.
2. Термохимические расчеты в металлургии и материаловедении.
3. Вычисление констант равновесия металлургических реакций с использованием стандартных термодинамических величин.
4. Оценка ошибок при расчетах константы равновесия и изобарно-изотермического потенциала.
5. Расчет интегральных теплот растворения для сложных гетерогенных систем.
6. Определение термодинамической активности компонентов металлических расплавов.
7. Теоретическая оценка кинетических параметров металлургических реакций.
8. Расчет основных параметров диффузионных процессов при получении материалов твердофазными и жидкофазными методами.
9. Определение коэффициента диффузии и ширины диффузионной зоны для заданных условий.
10. Термодинамические расчеты в математическом пакете MathCAD.
11. Кинетические расчеты в MathCAD.
12. Основные модули программы ThermoCalc.
13. Построение диаграмм состояния в программе ThermoCalc.
14. Программное обеспечение для проведения термодинамических расчетов HSC Chemistry.
15. Комплекс программ и база данных ИВТАНТЕРМО.

**5.2. Промежуточная аттестация** по итогам освоения дисциплины проводится в форме экзамена. Ниже приведены контрольные вопросы.

#### Вопросы к экзамену

1. Физическая химия как фундаментальная основа металлургии и материаловедения.
2. Термодинамическая система и окружающая среда.
3. Первый закон термодинамики, его аналитические выражения и применение при анализе литейных и металлургических процессов.
4. Аналитические выражения и пределы применимости второго закона термодинамики.
5. Термодинамическая вероятность и энтропия.
6. Энергия Гельмгольца и энергия Гиббса.
7. Константа равновесия реакции и способы ее выражения.
8. Анализ термодинамического равновесия по методу М.И. Темкина и Л.А. Шварцмана.
9. Третий закон термодинамики в формулировке Планка.
10. Общие условия равновесия фаз в термодинамических системах.
11. Вычисление абсолютного значения энтропии по теплоемкостям веществ и теплотам их фазовых превращений.
12. Частные производные термодинамических потенциалов
13. Фазовые переходы первого и второго рода
14. Скорость гомогенных и гетерогенных реакций.
15. Термодинамические функции компонентов в растворах.
16. Термодинамические свойства неорганических соединений.
17. Расчет и прогнозирование физико-химических свойств неорганических соединений.
18. Поверхностное натяжение и вязкость вещества в расплавленном состоянии.

19. Расчет и построение фазовых диаграмм.
20. Геометрическая термодинамика: диаграммы состояния двухкомпонентных систем.
21. Геометрическая термодинамика: диаграммы состояния трехкомпонентных систем.
22. Термодинамика дисперсных и нанодисперсных систем.
23. Смачивание твердых тел жидкостями.
24. Структурные аспекты и теории плавления.
25. Современные теории жидкого состояния металлов и сплавов.
26. Равновесная кристаллизация сплавов твердых растворов.
27. Неравновесная кристаллизация.
28. Диффузионное переохлаждение.
29. Взаимосвязь процессов кристаллизации и условий затвердевания.
30. Управление физико-химическими процессами при плавке, литье, кристаллизации, затвердевании.
31. Стехиометрические расчеты в металлургии и материаловедении.
32. Термохимические расчеты в металлургии и материаловедении.
33. Вычисление констант равновесия металлургических реакций с использованием стандартных термодинамических величин.
34. Оценка ошибок при расчетах константы равновесия и изобарно-изотермического потенциала.
35. Расчет интегральных теплот растворения для сложных гетерогенных систем.
36. Определение термодинамической активности компонентов металлических расплавов.
37. Теоретическая оценка кинетических параметров металлургических реакций.
38. Расчет основных параметров диффузионных процессов при получении материалов твердофазными и жидкофазными методами.
39. Определение коэффициента диффузии и ширины диффузионной зоны для заданных условий.
40. Термодинамические расчеты в математическом пакете MathCAD.
41. Кинетические расчеты в MathCAD.
42. Основные модули программы ThermoCalc.
43. Построение диаграмм состояния в программе ThermoCalc.
44. Программное обеспечение для проведения термодинамических расчетов HSC Chemistry.
45. Комплекс программ и база данных ИВТАНТЕРМО.

### **5.3. Самостоятельная работа обучающегося.**

Основной формой самостоятельной работы студента является изучение рекомендованной литературы, активное участие на практических занятиях, то есть используется два вида самостоятельной работы – аудиторная, под руководством преподавателя, и внеаудиторная.

Основными видами самостоятельной работы студентов без участия преподавателей являются: формирование и усвоение содержания конспекта лекций на базе рекомендованной преподавателем учебной литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.); написание реферата; подготовка к семинарам.

Основными видами самостоятельной работы студентов с участием преподавателей являются: текущие консультации.

Ниже приводятся вопросы для самостоятельной подготовки к зачету и темы рефератов.

## **Вопросы для самостоятельной работы студентов**

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

Составление реферативного конспекта и решение комплекса расчетных задач по разделу №1 «Теоретические основы физико-химии материалов». Реальная структура металлов: примесные атомы, вакансии, дислокации, границы зерен и полигонизация. Промежуточные фазы в сплавах (электронные соединения Юм–Розери, фазы Лавеса, фазы внедрения). Зоны Бриллюэна. Фазовые переходы в твердом теле. Спинодальный и эвтектоидный распад. Метастабильные фазы.

## Раздел 2. Физико-химические основы процессов технологии материалов

Составление реферативного конспекта и решение комплекса расчетных задач по разделу №2 «Физико-химические основы процессов технологии материалов».

Термодинамика сплавов. Твердые растворы и интерметаллические соединения. Приложения классической и статистической термодинамики к изучению двух- и трехкомпонентных металлических растворов. Термодинамический метод расчета диаграмм состояния. Связь между термодинамическими функциями и диаграммой состояния.

## Раздел 3. Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении

Составление реферативного конспекта и решение комплекса расчетных задач по разделу №3 «Применение физико-химических методов исследования в металлургии и материаловедении». Компьютерные методы термодинамики в материаловедении и металлургии.

Фонд оценочных материалов (ФОМ) для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 6.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ
		Наличие в электронном каталоге ЭБС
Основная литература*		
1. Тазетдинов, Р. Г. Физико-химические основы технологических процессов производства и обработки конструкционных материалов : учеб. пособие / Р.Г. Тазетдинов. — 2-е изд., доп. и испр. — М. : ИНФРА-М, 2018. — 400 с.	2018	<a href="https://znanium.com/catalog/product/958344">https://znanium.com/catalog/product/958344</a>
2. Нарышкин, Д. Г. Химическая термодинамика с Mathcad. Расчетные задачи : учебное пособие / Д.Г. Нарышкин. — Москва : РИОР : ИНФРА-М, 2021. — 199 с.	2021	<a href="https://znanium.com/catalog/product/1277643">https://znanium.com/catalog/product/1277643</a>
3. Глотка, А. А. Термодинамическое проектирование свойств литейных жаропрочных сплавов на никелевой основе : монография / А. А. Глотка, С. В. Гайдук. - Москва ; Вологда : Инфра-Инженерия, 2021. - 264 с.	2021	<a href="https://znanium.com/catalog/product/1833235">https://znanium.com/catalog/product/1833235</a>
Дополнительная литература		
1. Теплофизические и физико-химические процессы в сплавах на основе железа : монография / А. Н. Вальтер, А. А. Протопопов, Е. Г. Евдокимов [и др.] ; под общ. ред. А. И. Вальтера. - Москва ; Вологда : Инфра-Инженерия, 2020. - 256 с.	2020	<a href="https://znanium.com/catalog/product/1168612">https://znanium.com/catalog/product/1168612</a>
2. Гармашов, С. И. Методы исследования процессов кристаллизации : учебное пособие / С. И. Гармашов ; Южный федеральный университет. - Ростов-на-Дону ; Таганрог : Издательство Южного федерального университета, 2019. - 84 с.	2019	<a href="https://znanium.com/catalog/product/1308369">https://znanium.com/catalog/product/1308369</a>

3. Коростелев, В. Ф. Поверхностное и объемное упрочнение сплавов : монография / В. Ф. Коростелев. - Москва ; Вологда : Инфра-Инженерия, 2021. - 160 с.	2021	<a href="https://znanium.com/catalog/product/1833154">https://znanium.com/catalog/product/1833154</a>
--	------	---

*\*не более 5 источников*

## 6.2. Периодические издания

Научные журналы «Перспективные материалы», «Металлы», «Физика и химия обработки материалов», «Успехи химии».

## 6.3. Интернет-ресурсы

- [www.de.vlsu.ru:81/umk](http://www.de.vlsu.ru:81/umk)
- <http://www.thermophysics.ru>
- <http://webbook.nist.gov>

## 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации образовательного процесса по дисциплине используются аудитории кафедры «Технологии функциональных и конструкционных материалов», оснащенные мультимедийным и проекционным оборудованием.

Кафедра располагает компьютерным классом с современным лицензионным и свободным программным обеспечением (MS Excel, MathCAD, GNURegression, GNUPlot и др.), локальной вычислительной сетью и доступом в Интернет.

Практические работы проводятся в форме индивидуально-групповых занятий с использованием электронно-вычислительных средств обучения и современной экспериментально-исследовательской базы.

В распоряжении кафедры имеется весь спектр необходимого оборудования для получения и исследования функциональных материалов (установки для получения композитов жидкофазными и твердофазными методами, кузнечно-прессовое оборудование, плавильные и термические печи), проведения рентгенофазового анализа (Bruker AXS D8 Advance), определения состава металлов и сплавов (ARL Advant'X), количественного металлографического анализа (Nikon Epiphot TME200), электронно-микроскопических исследований (Quanta 200 3D), изучения физико-механических и специальных свойств материалов.

1. Лекционная аудитория, оборудованная мультимедийным проекционным оборудованием.
2. Комплект электронных слайд-презентаций.
3. Иллюстративный раздаточный материал: диаграммы состояния двойных и тройных металлических систем.

Рабочую программу составил  
доцент кафедры ТФ и КМ, к.т.н. Д.В. Сухоруков



Рецензент  
Заместитель генерального директора по производству  
ООО «НПО «ИнЛитТех»



А.А. Крешик

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ТФ и КМ  
Протокол № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 2021 года

Заведующий кафедрой ТФ и КМ



В.А. Кечин

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
на заседании учебно-методической комиссии направления 22.03.01 «Материаловедение и  
технологии материалов»

Протокол № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 2021 года

Председатель комиссии



В.А. Кечин

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ  
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на 20\_\_\_\_ / 20\_\_\_\_ учебный года

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа одобрена на 20\_\_\_\_ / 20\_\_\_\_ учебный года

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа одобрена на 20\_\_\_\_ / 20\_\_\_\_ учебный года

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа одобрена на 20\_\_\_\_ / 20\_\_\_\_ учебный года

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа одобрена на 20\_\_\_\_ / 20\_\_\_\_ учебный года

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

**ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ**  
в рабочую программу дисциплины  
*Прикладная термодинамика и кинетика*  
образовательной программы направления подготовки 22.04.01 «*Материаловедение и технологии*  
*материалов*»

Номер изменения	Внесены изменения в части/разделы рабочей программы	Исполнитель ФИО	Основание (номер и дата протокола заседания кафедры)
1			
2			

Заведующий кафедрой ТФиКМ \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_

*Подпись*

*ФИО*