

«ОДОБРЕНО»

Ученым советом ИГЕМ РАН
Протокол № 4 от 23.03.2022
Председатель Ученого совета
чл.-корр. РАН В.А.Петров



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

- 1. Код и наименование дисциплины (модуля):** Физико-химическое моделирование геохимических процессов.
- 2. Уровень высшего образования:** подготовка научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре.
- 3. Научная специальность:** 1.6.4 «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых».
- 4. Место дисциплины (модуля) в структуре программы аспирантуры:** В – дисциплины (модули), вариативная часть.
- 5. Объем дисциплины (модуля)** составляет 6 зачетных единиц, всего 216 академических часов, из которых 36 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (12 часа занятий лекционного типа) и 180 часов составляет самостоятельная работа аспиранта (выполнение домашних заданий и написание реферата).
- 6. Входящие требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия:**
ЗНАТЬ: основы общей и физической химии, общей геологии и геохимии в объеме программы высшего профессионального образования;
УМЕТЬ: использовать аппарат химической термодинамики для расчета равновесий минералов и растворов; анализировать и интерпретировать полученную информацию; излагать в устной и письменной форме результаты исследования и аргументировано отстаивать свою точку зрения в дискуссии;
ВЛАДЕТЬ: навыками работы с базовыми компьютерными программами для обработки данных экспериментальных наблюдений и физико-химических расчетов.
- 7. Образовательные технологии:** классические лекционные технологии / дистанционные технологии.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и вида учебных занятий:

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Л	С	ГК	ИК	ТК	Всего	СР	П	Всего
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ: основы термодинамики; принцип минимума функции Гиббса системы; уравнение состояния; химический потенциал компонента водного раствора; идеальные и неидеальные растворы; равновесия в многокомпонентных системах; правила фаз; мультисистемы; потенциал Коржинского; программа <i>BALAN-CE</i> для расчёта равновесий в природных мультисистемах; термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов	54	6	12				18	36		36
ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ГЕОХИМИИ: методы гидротермального эксперимента; анализ минералов и растворов после эксперимента; расчет равновесного состава раствора в условиях эксперимента и закалочного раствора; сравнение результатов расчета с экспериментом	162	6	12				18	108	36	144
Промежуточная аттестация, зачет										
Итого:	216	12	24				36	144	36	180

Л - занятия лекционного типа; С - занятия семинарского типа; ГК - групповые консультации; ИК - индивидуальные консультации; ТК - учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, практические контрольные занятия и др.); СР - самостоятельная работа аспиранта, включая выполнение домашних заданий; П - подготовка рефератов и т.п.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы аспирантов: файлы презентаций лекций, основная, дополнительная и учебная литература (см. п. 10).

10. Ресурсное обеспечение:

Основная литература:

1. Борисов М.В., Шваров Ю.В. Термодинамика геохимических процессов: Учебное пособие. М.: Изд-во МГУ, 1992. 256 с.

2. Булах А.Г., Кривовичев В.Г., Золотарев А.А. Формулы минералов. Термодинамический анализ в минералогии и геохимии. Практическое руководство и справочник. С-Пб.: Изд-во С-ПбУ, 1995. 260 с.
3. Саксена С. Термодинамика твёрдых растворов породообразующих минералов. М.: Мир, 1975. 205 с.
4. Термодинамическое моделирование в геологии: минералы, флюиды и расплавы: Пер. с англ. / Под ред. И. Кармайкла, Х. Ойгстера. М.: Мир, 1992. 534 с.

Дополнительная литература:

1. Булах А.Г., Кривовичев В.Г. Расчёт минеральных равновесий. Л.: Недра, 1985.
2. Вуд Б., Фрейзер Д. Основы термодинамики для геологов. М.: Мир, 1981. 184 с.
3. Гаррелс Р.М., Крайст Ч.Л. Растворы, минералы, равновесия. М.: Мир, 1968. 368 с.
4. Жариков В.А. Основы физико-химической петрологии, М.: Изд-во МГУ, 1976. 420 с.
5. Керн Р., Вайсброд А. Основы термодинамики для минералогов, петрографов и геологов. М.: Мир, 1966.
6. Коржинский Д.С. Физико-химические основы анализа парагенезисов минералов. М.: Изд-во АН СССР, 1957. 184 с.
7. Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии/ Крайнев С.Р., Шваров Ю.В., Гричук Д.В. и др. М.: Недра, 1988. 254 с.
8. Патнис А., Мак-Коннелл Дж. Основные черты поведения минералов. М.: Мир, 1983. 304 с.
9. Перчук Л.Л., Рябчиков И.Д. Фазовое соответствие в минеральных системах. М.: Недра, 1976.

Рекомендуемые периодические издания:

1. Петрология (Изд. МАИК «Наука»)
2. Геология рудных месторождений (Изд. МАИК «Наука»)
3. Journal of Petrology (Oxford Journals)
4. Lithos (Elsevier)
5. Contributions to Mineralogy and Petrology (Springer)
6. Геология и геофизика (Изд. МАИК «Наука»)

Специализированное программное обеспечение:

1. Программа Serve для расчета термодинамических свойств химических реакций в широком диапазоне температур и давлений (разработка ИГЕМ РАН)
2. Программа Balance – универсальная программа расчета равновесий в мультисистемах (разработка ИГЕМ РАН)

3. База термодинамических данных для минералов, газов и компонентов водного раствора для расчета их термодинамических свойств в широком диапазоне температур и давлений (разработка ИГЕМ РАН)

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»: Базы данных и ресурсы, доступ к которым обеспечен из внутренней сети ИГЕМ РАН: elibrary.ru с доступом к электронному каталогу и базам данных из сети Интернет, с индивидуальными параметрами входа обучающегося; Электронная информационно-образовательная среда ИГЕМ РАН.

Описание материально технической базы: Необходимый аудиторный фонд предоставлен аудиторией ИГЕМ РАН, оснащенной необходимым компьютером, проектором и экраном для проведения лекционных занятий. Для проведения семинаров и самостоятельных работ используются аналитические лаборатории, позволяющие вести комплексные петрографические и минералогические исследования состава горных пород, руд, минералов с использованием просвечивающих и отражающих поляризационных микроскопов, а также бинокуляров.

11. Язык преподавания: русский.

ФОНДЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

оценки результатов обучения по дисциплине (модулю) «Физико-химическое моделирование геохимических процессов»

Итоговый контроль: дифференцированный зачёт (в форме оценки реферата).

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) «Физико-химическое моделирование геохимических процессов»

Реферат – продукт самостоятельной работы аспиранта, представляющий собой краткое изложение в письменном виде полученных результатов теоретического анализа определенной научной (учебно-исследовательской) темы, где автор раскрывает суть исследуемой проблемы, приводит различные точки зрения, а также собственные взгляды на нее.

Реферат состоит из 3-х частей:

1. введение (обоснование выбора темы, ее актуальность, основные цели и задачи исследования);
2. основная часть (суть исследуемой проблемы, оценка существующих в литературе основных теоретических подходов к ее решению, изложение собственного взгляда на проблему и пути ее решения и т.д.);
3. заключение (краткая формулировка основных видов и результатов, полученных в ходе исследования).

Объем работы 15-20 страниц (формат А4) печатного текста (шрифт 12, Times New Roman, через 1,5 интервала, поля: верхнее и нижнее – 2 см, левое – 2,5 см, правое – 1,5 см.). Текст может быть иллюстрирован таблицами, графиками, диаграммами, причем наиболее ценными из них являются те, что самостоятельно составлены автором. Громоздкие иллюстративные материалы должны даваться в составе приложения (Объем приложений не ограничивается, но в общий объем работы не засчитывается).

Необходимой частью реферата является список литературы, использованной в ходе работы над выбранной темой. Список составляется в соответствии с правилами библиографического описания.

Реферат представляется на рецензирование в печатном и электронном виде. Реферат рецензируется преподавателем дисциплины (модуля).

Оценка реферата – дифференцированная в зависимости от степени соответствия реферата установленным критериям (см. ниже).

Критерии оценки реферата:

Характеристика балльной системы:

п.п.	Критерии	Показатель
1	Актуальность темы	
2	Имеется ли научная проблема в формулировке и постановке темы исследования	
3	Дан ли обзор научной литературы по теме (наличие ссылок на работы российских и зарубежных ученых)	
4	Наличие теоретической базы исследования	
5	Показана ли взаимосвязь теоретических аспектов темы с российской (международной) практикой	
6	Имеется ли статистическая информация по теме, самостоятельно обобщенная автором (таблицы, графики, расчеты и др.)	
7	Насколько развернуто и полно представлена библиография по теме	
8	Присутствуют ли собственные оценки, позиция автора по аспектам исследования	

Показатели: 0 баллов – полное отсутствие критерия; 1 балл – частичное выполнение критерия; 2 балла – полное выполнение критерия.

Реферат считается принятым при количестве баллов более 7. Оценка «отлично» присуждается при количестве баллов от 14 до 16; оценка «хорошо» – при количестве баллов от 11 до 13; оценка «удовлетворительно» – при количестве баллов от 8 до 10, включительно.

Если по теме дисциплины (модуля) у аспиранта имеется опубликованная/принятая в печать научная публикация в периодических журналах списка ВАК и (одновременно) базы данных Web of Science, то, при предъявлении оригинала публикации, аспирант освобождается от написания реферата и ему присуждается оценка «отлично».

Примеры тем рефератов:

1. Химический потенциал компонента системы μ . Уравнение Гиббса-Дюгема.
2. Абсолютная энтропия вещества.
3. Уравнение Майера-Келли для температурной зависимости теплоёмкости.
4. Уравнение состояния идеального газа.
5. Уравнение состояния жидкой воды (уравнение Тейта). Критические температура и давление. Вода при сверхкритических параметрах состояния.
6. Физический смысл уравнения Борна для сольватной составляющей химического потенциала: электростатическая теория.
7. Уравнение состояния Хелгесона-Киркхэма-Флауэrsa (НКФ). Температурная и барическая зависимости теплоёмкости и объёма в рамках модели НКФ.
8. Идеальные растворы и их физический смысл. Уравнение Рауля. Уравнение Генри. Стандартное состояние компонента идеального разбавленного раствора.
9. Учёт неидеальности поведения компонентов. Коэффициент активности.
10. Уравнение состояния реального газа; уравнение Редлиха-Квонга.
11. Причины неидеальности поведения растворов электролитов. Коэффициент активности иона. Уравнение Дебая-Хюккеля.
12. Правила фаз. Мультисистемы. Потенциал Коржинского как критерий направленности процессов в открытых системах.
13. Метод минимизации термодинамического потенциала. Решение задачи минимизации: метод множителей Лагранжа.
14. Термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов. Методология построения модели и задачи моделирования.

ПРОГРАММА

дисциплины (модуля) «Физико-химическое моделирование геохимических процессов»

Раздел 1. Теоретические основы

Тема 1. Основы термодинамики. Принцип минимума функции Гиббса системы G . Химический потенциал компонента системы μ . Фундаментальное уравнение для G и μ . Уравнение Гиббса-Дюгема.

Тема 2. Зависимость μ от температуры (минералы и газы). Абсолютная энтропия вещества. Уравнение Майера-Келли для температурной зависимости теплоёмкости. Зависимость μ от давления. Несжимаемые вещества (минералы). Учёт сжимаемости при сверхвысоких давлениях. Газы. Уравнение состояния идеального газа.

Тема 3. Вода. Уравнение состояния жидкой воды (уравнение Тейта). Температурная зависимость давления насыщенного пара H_2O . Критические температура и давление. Вода при сверхкритических параметрах состояния. Многопараметрическое уравнение состояния H_2O . Диэлектрическая проницаемость воды ϵ . Уравнение Кирквуда. Температурная и барическая зависимости ϵ .

Тема 4. Химический потенциал компонента водного раствора. Физический смысл уравнения Борна для сольватной составляющей химического потенциала μ_s : электростатическая теория. Поведение термодинамических характеристик водных частиц вблизи критической точки воды: влияние сольватной составляющей μ_s . Уравнение состояния Хелгесона-Киркхэма-Флауэрс (HKF). Температурная и барическая зависимости теплоёмкости и объёма в рамках модели HKF.

Тема 5. Поведение сильных электролитов в гидротермальных условиях. Зависимость химического потенциала от концентрации. Идеальные растворы и их физический смысл. Уравнение Рауля. Стандартное состояние компонента идеального раствора. Растворы газов. Твёрдые растворы. Идеальные разбавленные растворы и их физический смысл. Уравнение Генри. Стандартное состояние компонента идеального разбавленного раствора.

Тема 6. Учёт неидеальности поведения компонентов. Коэффициент активности. Учёт неидеальности газов. Уравнение состояния реального газа: уравнение Редлиха-Квонга. Коэффициент активности реального газа: влияние температуры и давления. Правило Льюиса-Рендалла для газовых смесей. Учёт неидеальности смешения газов. Причины неидеальности поведения растворов электролитов. Коэффициент активности иона. Уравнение Дебая-Хюккеля: физический смысл постоянных и, их зависимость от температуры и давления.

Тема 7. Исследование газовой-жидких и расплавных включений в минералах как метод определения физико-химических условий процессов минералообразования: температур, давления и химического состава минералообразующих растворов. Термо- и криометрия.

Тема 8. Равновесия в многокомпонентных системах. Правила фаз. Мультисистемы. Потенциал Коржинского как критерий направленности процессов в открытых системах.

Тема 9. Современные методы расчёта равновесий в мультисистемах. Метод минимизации термодинамического потенциала. Ограничивающие условия баланса массы. Решение задачи минимизации: метод множителей Лагранжа и симплекс - метод.

Тема 10. Современные методы физико-химического анализа в геохимии. Атомно-адсорбционный метод анализа. Рентгенофазный и рентгенофлюоресцентный методы анализа

Тема 11. Электронно-зондовый анализ. Метод масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой.

Тема 12. Программа BALANCE для расчёта равновесий в природных мультисистемах. Работа с программой. Создание файлов задачи (*. DAT): выбор независимых компонентов, матрица стехиометрических коэффициентов и вектора состава. Учет окислительно-восстановительных процессов. Расчёт и присоединение файла термодинамических потенциалов компонентов. Расчёт равновесия в заданной P - T - x точке: выбор фазового состава (предварительный расчет) и точный расчет.

Тема 13. Термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов. Методология построения модели и задачи моделирования. Термодинамические модели некоторых природных процессов: образование коры выветривания, гидротермальная система в океанической коре (чёрные курильщики).

Раздел 2. Практические приложения

Тема 1. Основы методики гидротермального эксперимента. Постановка опыта по исследованию растворимости рудных элементов в присутствии минерального буфера при 400 $^{\circ}\text{C}$, 1 кбар. Подготовка минеральных фаз и рабочих растворов. Подготовка и загрузка автоклавов.

Тема 2. Проведение гидротермального эксперимента. Исследование состава гидротермального раствора в равновесии с минеральным буфером (пирит-пирротин-магнетит) при $T = 400\text{ }^{\circ}\text{C}$, $P = 500$ бар.

Тема 3. Снятие эксперимента. Закалка и разгрузка автоклавов. Рентгено-структурный анализ минералов после эксперимента. Атомно-адсорбционный анализ калия в закалочном растворе. Анализ полученных результатов.

Тема 4. Методология построения термодинамической модели процессов инконгруэнтного растворения минералов. Расчет равновесного состава раствора в условиях эксперимента и закалочного раствора. Исследование растворимости рудных элементов в присутствии минерального буфера.

Тема 5. Зависимость растворимости рудных элементов в зависимости от температуры, давления и солевой нагрузки флюида. Сравнение результатов расчета с экспериментом.