

«ОДОБРЕНО»

Ученым советом ИГЕМ РАН
Протокол № 7 от 12.10.2016 г.
Председатель Ученого совета
д.г.-м.н., К.В. Лобанов



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

- 1. Код и наименование дисциплины (модуля):** Термодинамика минералов и фазовые равновесия.
- 2. Уровень высшего образования:** подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
- 3. Направление подготовки:** 05.06.01 Науки о земле. Направленность (профиль) программы: 25.00.05 Минералогия, кристаллография.
- 4. Место дисциплины (модуля) в структуре программы аспирантуры:** 1.В.3 - вариативная часть.
- 5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):**

Код компетенции по ФГОС	Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ПК-1	Владение современной методологией теоретических и экспериментальных научных исследований в соответствии с направленностью (профилем) программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных технологий; представлять полученные результаты на научных конференциях и публиковать результаты научных исследований в ведущих отечественных и зарубежных профильных журналах	ЗНАТЬ: основы современных аналитических методов и технологий научных исследований по направленности (профилю) программы; основные информационно-коммуникационные технологии, З(ПК-1)-I; современное состояние науки в области направленности (профиля) программы, З(ПК-1)-II; УМЕТЬ: сопоставлять результаты, полученные разными аналитическими методами исследований; использовать современные информационно-коммуникационные технологии в научно-исследовательской деятельности, У(ПК-1)-I; разрабатывать и совершенствовать методики экспериментальных исследований по направленности (профилю) программы, У(ПК-1)-II; ВЛАДЕТЬ: навыками анализа, обобщения и систематизации результатов научно-исследовательской деятельности с применением современных компьютерных и информационных технологий, В(ПК-1)-II

ПК-2	Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской деятельности; получение новых и актуальных научных результатов, выдвижение и обоснование новых гипотез в соответствии с направленностью (профилем) программы	ЗНАТЬ: историю становления и развития основных научных школ, полемику и взаимодействие между ними; общие закономерности развития наук о Земле и современное состояние научных исследований по направленности (профилю) программы, З(ПК-2)-I; УМЕТЬ: выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах в области наук о Земле; критически оценивать любую поступающую информацию, вне зависимости от источника, У(ПК-2)-I; ВЛАДЕТЬ: навыками сбора, обработки, интерпретации и презентации данных по теме исследования; навыками критического анализа и оценки современных научных достижений по решению исследовательских и практических задач в соответствии с направленностью (профилем) программы, В(ПК-2)-I;
ПК-3	Способность обобщать и использовать результаты исследований для выявления новых явлений, закономерностей, гипотез и теоретических положений в области направленности (профиля) программы	ЗНАТЬ: современные результаты отечественных и зарубежных исследований, гипотезы и научные теории, пути решения практических задач по направленности (профилю) программы, З(ПК-3)-I; УМЕТЬ: использовать опубликованные результаты современных исследований для совершенствования методов развития научных знаний, У(ПК-3)-I; ВЛАДЕТЬ: навыками использования современных прецизионных методов исследования для решения поставленных научных задач, В(ПК-3)-I

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) приведены в Приложении.

6. 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).

7. Входящие требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия:

ЗНАТЬ: методы экспериментального моделирования минеральных равновесий, расчета термодинамических констант минералов, расплавов и флюидов, методы термодинамических расчетов, основные пакеты компьютерных программ, используемых при термодинамическом моделировании природных процессов.

УМЕТЬ: определять степень равновесности минералов в породах по текстурно-структурным соотношениям; оценивать достоверность химических анализов существующих минералов и способы их пересчета на миналы твердых растворов; владеть навыками построения диаграмм в координатах интенсивных параметров, отвечающих основным природным системам; работать с базами термодинамических данных для чистых веществ, твердых растворов и сложных надкритических флюидов; анализировать и интерпретировать полученную информацию; излагать в устной и письменной форме результаты своего исследования и аргументированно отстаивать свою точку зрения в дискуссии.

ВЛАДЕТЬ: навыками анализа термодинамики природных систем; владеть базовыми компьютерными программами для термодинамических расчетов и моделирования.

8. Образовательные технологии: классические лекционные технологии.

9. 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	ДЗ	П	Всего
ТЕРМОДИНАМИКА ПРИРОДНЫХ СИСТЕМ: общие понятия о породообразующих фазах; основные термодинамические законы и соотношения; модели твердых растворов, методы их количественной калибровки; модели флюидных смесей и расплавов, методы их количественной калибровки.	48	4	8				12	36		36
СВОЙСТВА ВАЖНЕЙШИХ ПОРОДООБРАЗУЮЩИХ РАСТВОРОВ: твердые растворы важнейших породообразующих силикатов и оксидов; свойства сложных водосодержащих флюидов; свойства сухих и флюидсодержащих расплавов; термодинамическое моделирование петрологических процессов; основы метода геотермобарометрии.	66	4	8				12	36	18	54
ОСНОВНЫЕ ПОДХОДЫ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ПЕТРОЛОГИИ: реконструкция трендов Р-Т эволюции метаморфизма; интерпретация структурных соотношений минералов в породах, использование микрозондовых анализов зональных минералов; роль процессов диффузии и перекристаллизации в формировании гетерогенности химического состава минералов; численное моделирование процессов фракционирования в минеральных системах; компьютерные программы TWQ и GEOPATH.	102	4	8				12	72	18	90
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); ДЗ - выполнение домашних заданий; П - подготовка рефератов и тп.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы аспирантов: файлы презентаций лекций, основная, дополнительная и учебная литература (см. п. 11).

11. Ресурсное обеспечение:

Основная литература:

1. Перчук А.Л., Сафонов О.Г., Сазонова Л.В., Тихомиров П.Л., Плечов П.Ю., Шур М.Ю. Основы петрологии магматических и метаморфических процессов: Учебное пособие. Москва МГУ, Геологический факультет. Университетская книга, 2015. 472 с. ISBN 978-5-91304-578-2
2. Перчук А.Л., Сафонов О.Г., Плечов П.Ю. Введение в петрологию: Учебное пособие. М.: ИНФРА-М, 2014. 130 с. ISBN 978-5-16-010122-4
3. Шур М.Ю., Носова А.А., Ширяев А.А., Сафонов О.Г., Япакурт В.О., Перчук А.Л. Методы петрологических исследований: Учебное пособие. М.: ИНФРА-М, 2014. 104 с. ISBN 978-5-16-010115-6

Дополнительная литература:

1. Коржинский Д.С. Теоретические основы анализа парагенезисов минералов. М.: Наука, 1973. 285 с.
2. Пригожин И., Дефей Р. Химическая термодинамика. Новосибирск.: Наука, 1966. 819 с.
3. Аранович Л.Я. Минеральные равновесия многокомпонентных твердых растворов. М.: Наука, 1991. 254 с.
4. Колл. авторов. Петрография и петрология магматических, метаморфических и метасоматических горных пород. Под ред. В.С. Попова и О.А. Богатикова. М., «Логос», 2001.
5. Перчук Л.Л., Рябчиков И.Д. Фазовое соответствие в минеральных системах. М.: Наука, 1976.
6. Жариков В.А. Основы физико-химической петрологии. М.: Изд-во МГУ, 1976. 420 с.
7. Spear F.S. Metamorphic phase equilibria and Pressure-Temperature-Time Paths. Washington DC: MSA monographs, 1993. 799 p.

Рекомендуемые периодические издания:

1. Петрология (Изд. МАИК «Наука»)
2. Journal of Petrology (Oxford Journals)
3. Lithos (Elsevier)
4. Contributions to Mineralogy and Petrology (Springer)
5. Доклады Академии Наук (Изд. МАИК «Наука»)
6. Геология рудных месторождений (Изд. МАИК «Наука»)
7. Геохимия (Изд. МАИК «Наука»)
8. Nature (Nature Publishing Group)

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 использование просвечивающих и отражающих поляризационных микроскопов, а также бинокуляров.

12. Язык преподавания: русский.

13. Преподаватель: д.х.н. Н.Н. Акинфиев

ПРИЛОЖЕНИЕ

ФОНДЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

оценки результатов обучения по дисциплине (модулю) «Термодинамика минералов и фазовые равновесия»

Итоговый контроль: реферат, зачет с оценкой.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) «Термодинамика минералов и фазовые равновесия» на основе карт компетенции выпускников

Результат обучения	Критерии и показатели оценивания результата обучения					Оценочные средства
	1	2	3	4	5	
по дисциплине (модулю)	по дисциплине (модулю), баллы					
Знать основы современных аналитических методов и технологий научных исследований по направленности (профилю) программы; основные информационно-коммуникационные технологии, З(ПК-1)-I	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование
Знать современное состояние науки в области направленности (профиля) программы, З(ПК-1)-II	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование
Уметь сопоставлять результаты, полученные разными аналитическими методами исследований; использовать современные информационно- коммуникационные технологии в научно-исследовательской деятельности, У(ПК-1)-I	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование
Уметь разрабатывать и совершенствовать методики экспериментальных исследований по направленности (профилю) программы, У(ПК-1)-II	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование
Владеть навыками анализа, обобщения и систематизации результатов научно-исследовательской деятельности с применением современных компьютерных и информационных технологий, В(ПК-1)-II	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование
Знать историю становления и развития основных научных школ, полемику и взаимодействие между ними; общие закономерности развития наук о Земле и современное состояние научных исследований по направленности (профилю) программы, З(ПК-2)-I	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование

Уметь выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах в области наук о Земле; критически оценивать любую поступающую информацию, вне зависимости от источника, У(ПК-2)-I	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование
Владеть навыками сбора, обработки, интерпретации и презентации данных по теме исследования; навыками критического анализа и оценки современных научных достижений по решению исследовательских и практических задач в соответствии с направленностью (профилем) программы, В(ПК-2)-I	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование
Знать современные результаты отечественных и зарубежных исследований, гипотезы и научные теории, пути решения практических задач по направленности (профилю) программы, З(ПК-3)-I	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование
Уметь использовать опубликованные результаты современных исследований для совершенствования методов развития научных знаний, У(ПК-3)-I	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование
Владеть навыками использования современных прецизионных методов исследования для решения поставленных научных задач, В(ПК-3)-I	0	1-29	30-59	60-89	90-100	Собеседование

В ходе проведения собеседования, результат освоения компетенции оценивается по сто бальной шкале, согласно таблице освоения результатов. Аспирант получает допуск к зачету (промежуточная аттестации) и к экзамену (итоговая аттестация) если среднее количество баллов освоения компетенций более 30.

Характеристика балльной системы:

Показатели уровня сформированности компетенций знания, практические умения, опыт деятельности, которые должен получить и уметь продемонстрировать обучающийся после освоения дисциплины	Баллы
Дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос, показана совокупность осознанных знаний об объекте, проявляющаяся в свободном оперировании понятиями, умении выделить существенные и несущественные его признаки, причинно-следственные связи. Ответ формулируется в терминах науки, изложен литературным языком, логичен, доказателен, демонстрирует авторскую позицию аспиранта. Могут быть допущены недочеты в определении понятий, исправленные аспирантом самостоятельно в процессе ответа.	100-90
Дан полный, но недостаточно последовательный ответ на поставленный вопрос, но при этом показано умение выделить существенные и несущественные признаки и причинно-следственные связи. Ответ логичен и изложен в терминах науки. Могут быть допущены 1-2 ошибки в определении основных понятий, которые аспирант затрудняется исправить самостоятельно.	89-60
Дан недостаточно полный и недостаточно развернутый ответ. Логика и последовательность изложения имеют нарушения. Допущены ошибки в раскрытии понятий, употреблении терминов. Аспирант не способен самостоятельно выделить существенные и несущественные признаки и причинно-следственные связи. Аспирант может конкретизировать обобщенные знания, доказав на примерах их основные положения только с помощью преподавателя. Речевое оформление требует поправок, коррекции.	59-30

Дан неполный ответ, представляющий собой разрозненные знания по теме вопроса с существенными ошибками в определениях. Присутствуют фрагментарность, нелогичность изложения. Аспирант не осознает связь данного понятия, теории, явления с другими объектами дисциплины. Отсутствуют выводы, конкретизация и доказательность изложения. Речь неграмотная. Дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя не приводят к коррекции ответа аспиранта не только на поставленный вопрос, но и на другие вопросы дисциплины.	29-1
Не получены ответы по базовым вопросам дисциплины.	0

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 состоит из 2-3 параграфов, в которых раскрывается 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 25-30 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 вопросов к промежуточному контролю (темы рефератов, вопросы для индивидуального собеседования):

1. Общие понятия о породообразующих фазах.
2. Основные термодинамические законы и соотношения.
3. Модели твердых растворов, методы их количественной калибровки.
4. Модели флюидных смесей и расплавов, методы их количественной калибровки.
5. Твердые растворы важнейших породообразующих силикатов и оксидов.
6. Свойства сложных водосодержащих флюидов.
7. Свойства сухих и флюидсодержащих расплавов.
8. Термодинамическое моделирование петрологических процессов.
9. Реконструкция трендов Р-Т эволюции метаморфизма.
10. Методы минимизации термодинамических потенциалов природных систем.
11. Количественные системы минеральных фаций метаморфических, магматических и метасоматических пород.
12. Геодинамическая интерпретация данных термодинамического моделирования.

ПРОГРАММА

дисциплины (модуля) «Термодинамика минералов и фазовые равновесия»

Раздел 1. Термодинамика природных систем

Тема 1. Общие понятия о породообразующих фазах: твердые растворы, расплавы, газовые смеси. Способы выражения состава растворов. Основные типы изоморфных замещений.

Тема 2. Основные термодинамические законы и соотношения. Первый, второй и третий законы термодинамики. Энтропия как мера статистической неупорядоченности. Потенциалы систем при различных параметрах состояния и связь между ними. Типы природных систем и их термодинамические потенциалы. Условия химического и механического равновесия.

Тема 3. Модели твердых растворов, методы их количественной калибровки. Регулярные, атермальные и реальные растворы. Одно- и многопозиционные растворы. Связь энталпии и энтропии смешения. Теория взаимных многопозиционных растворов. Внутренние корреляции состава природных минералов – индикаторы отклонений от идеальности. Принцип кислотно-основного взаимодействия компонентов в твердых растворах. Условия стабильности и распад в твердых растворах. Экспериментальные методы исследования свойств смешения твердых растворов: фазовые равновесия, калориметрия, ячейка Кнудсена, электрохимический метод на основе твердых электролитов.

Тема 4. Модели флюидных смесей и расплавов, методы их количественной калибровки. Идеальные и реальные газы. Понятие сжимаемости. Уравнение Ван-дер-Вальса. Вириальные уравнения, наиболее распространенные в петрологии. Молекулярно-статистическая теория газовых смесей. Уравнение Леннард-Джонса. Закон Дальтона для газовых смесей. Правило Льюиса-Рэндла. Неидеальные смеси реальных газов. Уравнение Ван Лаара. Степень полимеризации силикатных расплавов. Соотношения микроскопического и макроскопического подходов при описании термодинамических свойств расплавов. Модели смешения. Экспериментальные методы их калибровки: измерения Р-В-Т свойств, флюидно-минеральные равновесия, диаграммы плавкости.

Раздел 2. Свойства важнейших породообразующих растворов

Тема 1. Твердые растворы важнейших породообразующих силикатов и оксидов. Особенности твердых растворов оливина, граната, орто- и клинопироксенов, амфиболов, слюд, кордиерита, хлоритов, полевых шпатов, шпинелей и ромбоэдрических оксидов. Твердые растворы глубинных зон Земли.

Тема 2. Свойства сложных водосодержащих флюидов. Свойства систем вода – неполярный газ и многокомпонентных флюидных смесей. Расслоение во флюидных системах и его роль в глубинном петрогенезе. Системы вода – сильный электролит, системы первого и второго типа, а также особенности строения их фазовых диаграмм. Влияние сильных электролитов на поведение летучих компонентов водных флюидных смесей.

Тема 3. Свойства сухих и флюидсодержащих расплавов. Основные типы диаграмм плавкости сухих силикатных систем. Диаграммы плавкости в системах силикат – вода, силикат – CO₂ и силикат – неполярный газ. Зависимость температуры начала плавления от давления в сухих и флюидсодержащих расплавах.

и диссертационных системах. Роль водорода в плавлении глубинных зон Земли. Вторая критическая точка в системах силикат – вода и возможность образования малоплотных расплавов-растворов.

Тема 4. Термодинамическое моделирование петрологических процессов. Основы метода геотермобарометрии. Многоминеральная геотермобарометрия и проблема локальности равновесий в геологических процессах. Метод расчета минеральных равновесий на основе систем нелинейных уравнений констант реакций. Метод минимизации свободной энергии Гиббса. Диаграммы химических потенциалов систем с вполне подвижными компонентами.

Раздел 3. Основные подходы термодинамического моделирования в петрологии

Тема 1. Реконструкция трендов Р-Т эволюции метаморфизма. Интерпретация структурных соотношений минералов в породах, использование микрозондовых анализов зональных минералов. Роль процессов диффузии и перекристаллизации в формировании гетерогенности химического состава минералов. Численное моделирование процессов фракционирования в минеральных системах. Компьютерные программы TWQ и GEOPATH.

Тема 2. Методы минимизации термодинамических потенциалов природных систем. Прямая и обратная задачи термодинамического моделирования в геологии. Минимизация потенциалов закрытых и открытых систем. Уравнения баланса масс и дополнительная информация, получаемая с помощью этого подхода. Знакомство с работой компьютерных программ DOMINO, PERPLEX, MELTs. Примеры решения петрологических задач на основе метода минимизации.

Тема 3. Количественные системы минеральных фаций метаморфических, магматических и метасоматических пород. Минеральные парагенезисы метаморфических пород различного валового состава. Фации кислотности метасоматических пород. Фации щелочности гранитоидов. Тренды эволюции магматических минеральных ассоциаций при кристаллизации в закрытых и открытых системах.

Тема 4. Геодинамическая интерпретация данных термодинамического моделирования. Эволюция термодинамического режима в различных геодинамических обстановках. Соотношения давление–глубина и проблема глубинности в геологии. Термодинамические режимы «холодной» и «горячей» субдукции. Термодинамическая «память» минералов и минеральных ассоциаций.