

«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):** Физико-химическое моделирование геохимических процессов.
- 2. Уровень высшего образования:** подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
- 3. Направление подготовки:** 05.06.01 Науки о земле. Направленность (профиль) программы: 25.00.09 Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых.
- 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: 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.

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
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>BALANCE</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); 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. 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 бинокляров.

12. Язык преподавания: русский.

13. Преподаватель: д.г.-м.н. А.А. Борисов

ПРИЛОЖЕНИЕ

ФОНДЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

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

Итоговый контроль: реферат, зачет с оценкой.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) «Физико-химическое моделирование геохимических процессов» на основе карт компетенции выпускников

Результат обучения	Критерии и показатели оценивания результата обучения					Оценочные средства
по дисциплине (модулю)	по дисциплине (модулю), баллы					
	1	2	3	4	5	
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 аттестация) 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 «удовлетворительн» – 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. 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 μ_s : электростатическая теория.
7. Уравнение состояния Хелгесона-Киркхэма-Флауэрс (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

1. Основы термодинамики. Принцип минимума функции Гиббса системы G . Химический потенциал компонента системы μ . Фундаментальное уравнение для G и μ . Уравнение Гиббса-Дюгема.
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.
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 .
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.
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.
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 A и B , их зависимость от температуры и давления.
7. Исследование газовой-жидкой и расплавных включений в минералах как метод определения физико-химических условий процессов минералообразования: температур, давления и химического состава минералообразующих растворов. Термо- и криометрия.
8. Равновесия в многокомпонентных системах. Правила фаз. Мультисистемы. Потенциал Коржинского как критерий направленности процессов в открытых системах.
9. Современные методы расчёта равновесий в мультисистемах. Метод минимизации термодинамического потенциала. Ограничивающие условия баланса массы. Решение задачи минимизации: метод множителей Лагранжа и симплекс - метод.
10. Современные методы физико-химического анализа в геохимии. Атомно-адсорбционный метод анализа. Рентгенофазный и рентгенофлуоресцентный методы анализа. Электронно-зондовый анализ. Метод масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой.

11. 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*-х точке: выбор фазового состава (предварительный расчет) и точный расчет.
12. 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

1. Основы методики гидротермального эксперимента. Постановка опыта по исследованию растворимости рудных элементов в присутствии минерального буфера при 400°C , 1 кбар. Подготовка минеральных фаз и рабочих растворов. Подготовка и загрузка автоклавов.
2. Проведение гидротермального эксперимента. Исследование состава гидротермального раствора в равновесии с минеральным буфером (пирит-пирротин-магнетит) при $T = 400^{\circ}\text{C}$, $P = 500$ бар.
3. Снятие эксперимента. Закалка и разгрузка автоклавов. Рентгено-структурный анализ минералов после эксперимента. Атомно-адсорбционный анализ калия в закалочном растворе. Анализ полученных результатов.
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.
5. Зависимость растворимости рудных элементов в зависимости от температуры, давления и солевой нагрузки флюида. Сравнение результатов расчета с экспериментом.