

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Директор по образовательной
деятельности

_____ С.Т. Князев
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1162444	Моделирование процессов в аналитической химии

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Аналитический контроль природных и технических объектов	Код ОП 1. 18.04.01/33.09
Направление подготовки 1. Химическая технология	Код направления и уровня подготовки 1. 18.04.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Кель Полина Владимировна	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	УрФУ
2	Пупышев Александр Алексеевич	доктор химических наук, профессор	Профессор	физико-химических методов анализа

Согласовано:

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ **Моделирование процессов в аналитической химии**

1.1. Аннотация содержания модуля

В структуре образовательной программы модуль «Моделирование процессов в аналитической химии» находится в части формируемой участниками образовательных отношений, по выбору студента. Модуль знакомит с принципами проведения частного и полного термодинамического анализа химических технологических и аналитических процессов, принципами и особенностями построения моделей, с возможностями и ограничениями программных комплексов, используемых для термодинамического моделирования. Модуль направлен на формирование навыков самостоятельного проведения термодинамического моделирования в приложении к решению технологических и аналитических задач.

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Термодинамическое моделирование	3
ИТОГО по модулю:		3

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	1. Физические методы анализа
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Термодинамическое моделирование	ПК-2 - Способен ставить и решать исследовательские задачи разработки методов аналитического контроля и оптимизации	З-2 - Характеризовать стандарты, методики и инструкции, определяющие порядок оформления документации по результатам исследований З-3 - Выбрать наиболее перспективные методы и средства планирования,

	<p>параметров анализа объектов исследования</p>	<p>организации и внедрения результатов разработок в области методов аналитического контроля и оптимизации параметров анализа</p> <p>У-3 - Применять наиболее перспективные методы и средства планирования, организации и внедрения результатов разработок в области методов аналитического контроля и оптимизации параметров анализа</p> <p>П-2 - Ставить конкретные научно-технические задачи разработки методов аналитического контроля и оптимизации параметров анализа объектов исследования</p> <p>Д-1 - Решать задачи, предполагающие выбор и многообразие актуальных возможных вариантов</p>
	<p>ПК-4 - Способен организовать и осуществить работы по непрерывному совершенствованию производственной деятельности</p>	<p>З-3 - Привести примеры математической обработки и анализа результатов экспериментов, в том числе с использованием информационных технологий</p> <p>У-3 - Осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов с использованием информационных технологий</p> <p>П-3 - Оформлять результаты математической обработки и анализа данных с использованием информационных технологий</p>

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Термодинамическое моделирование

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Кель Полина Владимировна	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	УрФУ
2	Пупышев Александр Алексеевич	доктор химических наук, профессор	Профессор	физико- химических методов анализа

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 7 от 15.03.2024 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Кель Полина Владимировна, Доцент, физико-химических методов анализа
- Пупышев Александр Алексеевич, Профессор, физико-химических методов анализа

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Введение	Общие сведения о математическом моделировании и термодинамическом моделировании. Основные понятия (объект моделирования, гипотезы, аналогии, модель); классификация видов моделирования, цели и задачи моделирования.
P2	Постановка задачи. Некоторые понятия и соотношения термодинамики	Постановка задачи. Термодинамические системы и их особенности. Параметры состояния и характеристические функции термодинамических систем. Понятие компонентов системы. Правило фаз Гиббса. Вариационные принципы термодинамики.
P3	Равновесное состояние отдельной химической реакции в системе частного термодинамического анализа	Виды химических реакций и их свойства. Закон действующих масс и константа равновесия. Изменение свободной энергии Гиббса химической реакции. Возможности, достоинства и недостатки частного термодинамического анализа.
P4	Полный термодинамический анализ	Методы, основанные на использовании констант равновесия независимых реакций. Методы, основанные на минимизации свободной энергии Гиббса системы и применении вариационных принципов термодинамики. Метод, основанный на максимизации энтропии системы и вариационных принципах термодинамики.

Р5	Содержание и методология термодинамического моделирования	Предпосылки термодинамического моделирования. Цели и задачи применения термодинамического моделирования Логическая схема выполнения термодинамического моделирования и стадии моделирования: постановка задачи, выбор расчетного инструмента, выявление всех возможных форм существования веществ в системе, определение термодинамических свойств составляющих систему веществ.
Р6	Методы термодинамического моделирования	Исходные термодинамические системы для моделирования. Содержание компонентов в исходной системе. Системы с образованием фаз переменного состава. Общие рекомендации проведения термодинамического моделирования. Общие принципы. Термическое разложение конденсированных веществ и их смесей. Восстановление металлов из конденсированных веществ. Образование тугоплавких соединений и твердых растворов из исходных конденсированных веществ. Моделирование процессов рафинирования и легирования жидких металлов. Термохимические процессы в пламенах и электротермических атомизаторах. Атомно-эмиссионная спектрометрия с дуговым возбуждением спектров и индуктивно связанной плазмой. Масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой. Достоверность результатов термодинамического моделирования.
Р7	Банки термодинамических свойств индивидуальных веществ и фаз	Справочные издания и базы данных на магнитных носителях. Термодинамические свойства веществ по сведениям из периодических изданий. Определение термодинамических свойств веществ расчетными способами.

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Термодинамическое моделирование

Электронные ресурсы (издания)

1. Добрынина, Н. Ю.; Электрохимия расплавов : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=695814> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Пупышев, А. А., Данилова, Д. А.; Термодинамическое моделирование для метода атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно связанной плазмой : учеб. пособие.; УГТУ-УПИ, Екатеринбург; 2005 (5 экз.)
2. Ватолин, Ватонин, Н. А., Моисеев, Г. К., Трусов, Б. Г.; Термодинамическое моделирование в

высокотемпературных неорганических системах; Металлургия, Москва; 1994 (5 экз.)

3. , Щепеткин, А. А.; Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов; Наука, Москва; 1982 (2 экз.)

4. ; Температурные зависимости приведенной энергии Гиббса некоторых неорганических веществ. Альтернативный банк данных АСТРА (OWN); РАН УрО, Екатеринбург; 1997 (2 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

Зональная научная библиотека УрФУ <http://lib.urfu.ru>

Научная электронная библиотека Elibrary.ru <https://www.elibrary.ru/>

Электронная библиотечная сеть "Лань" <http://e.lanbook.com/>

Портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ <http://study.urfu.ru/>

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Министерство образования и науки Российской Федерации (<http://минобрнауки.рф/>)

Федеральный портал «Российское образование» (<http://www.edu.ru/>)

ООО Научная электронная библиотека (<http://elibrary.ru/defaultx.asp>)

Электронный научный архив УрФУ (<https://elar.urfu.ru>)

Поисковая система <http://www.yandex.ru>

Поисковая система <http://www.google.com>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Термодинамическое моделирование

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM P7-Офис Профессиональный (Десктопная версия)

		<p>Периферийное устройство</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Оборудование, соответствующее требованиям организации учебного процесса в соответствии с санитарными правилами и нормами</p>	
2	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Оборудование, соответствующее требованиям организации учебного процесса в соответствии с санитарными правилами и нормами</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc</p> <p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p>
3	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Оборудование, соответствующее требованиям организации учебного процесса в соответствии с санитарными правилами и нормами</p>	Не требуется