

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики
А.С. Батурин**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Дополнительные главы физической химии
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Количество контрольных работ, заданий: 1

Программу составил: В.С. Николаев

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 12.02.2024

Аннотация

Дисциплина предназначена для ознакомления обучающихся с дополнительными разделами физической химии, электрохимии, физического материаловедения, основными способами расчета термодинамических величин для различных материалов с использованием теории функционала электронной плотности и включения полученных результатов в мезоскопические модели химических и электрохимических процессов.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- ознакомление обучающихся с дополнительными разделами физической химии, электрохимии, физического материаловедения, основными способами расчета термодинамических величин для различных материалов с использованием теории функционала электронной плотности и включения полученных результатов в мезоскопические модели химических и электрохимических процессов.

Задачи дисциплины

- формирование представлений о способах составления многомасштабных моделей сложных химических и электрохимических процессов в веществе, формирование понимания о способах расчета основных величин, входящих в физико-химические модели процессов в различных средах, с использованием вычислительных методов классической молекулярной динамики и теории функционала электронной плотности.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- связующие положения термодинамики, статистической физики, неорганической химии и теории кинетики химических реакций;
- основные положения электрохимии, теории коррозии, принципы работы батарей и аккумуляторов;
- границы применимости методов классической молекулярной динамики и теории функционала электронной плотности при расчете микроскопических характеристик химических и электрохимических процессов.

уметь:

- формировать многомасштабные модели химических и электрохимических процессов в различных средах с учетом особенностей строения вещества;
- применять методы компьютерного моделирования для расчета ключевых характеристик химических и электрохимических микропроцессов.

владеть:

- практическими навыками использования методов классической молекулярной динамики и теории функционала электронной плотности для расчета ключевых характеристик химических и электрохимических микропроцессов.

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

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение		1		5
2	Химический потенциал как парциальная молярная величина		2		7
3	Термодинамические величины в химии		1		6
4	Теория активированного комплекса. Динамика химических реакций		2		7
5	Методы расчета термодинамических величин при помощи DFT		2		7
6	Теория электродных процессов		2		5
7	Классификация и количественная характеристика электрохимических цепей		1		6
8	Принципы работы батарей и аккумуляторов. Методы расчета электрохимических величин при помощи DFT		1		6
9	Теория коррозионных процессов		1		6
10	Модель точечных дефектов как многомасштабная модель коррозии		2		5
11	Сдача и защита курсовых заданий		15		
Итого часов			30		60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

1. Введение

Строение и состояние вещества. Макроскопические системы и их состояние. Химическая связь. Нековалентные взаимодействия. Газы. Жидкости. Кристаллы. Растворы. Полимеры. Состояния макроскопических систем. Параметры состояния и уравнение состояния. Внутренняя энергия. Энтропия. Состав растворов. Парциальные молярные величины. Основы атомистического моделирования. Молекулярная динамика. Теория функционала электронной плотности. Расчетные характеристики в методах атомистического моделирования.

2. Химический потенциал как парциальная молярная величина

Химический потенциал компонента раствора. Зависимость химического потенциала от состава. Активность компонента раствора. Уравнение Гиббса-Дюгема. Стандартные состояния. Методы расчета химического потенциала по результатам атомистического моделирования и способы выбора стандартного состояния.

3. Термодинамические величины в химии

Уравнение химической реакции. Скорость химической реакции. Химическое равновесие. Тепловые эффекты химических реакций. Уравнение изотермы химической реакции и константа равновесия. Связь константы равновесия и изменения стандартной энергии Гиббса в химической реакции. Термодинамические функции ионов в растворе. Приближения для расчета термодинамических характеристик процессов в атомистическом моделировании.

4. Теория активированного комплекса. Динамика химических реакций

Элементарный акт химического превращения. Константа скорости элементарной реакции. Энергия активации и ее отличие от стандартной энергии Гиббса. Предэкспоненциальный множитель. Обобщенная координата химической реакции. Поверхность потенциальной энергии. Экспериментальные методы исследования переходного состояния в химической реакции – фемтосекундные лазерные импульсы. Когерентные волновые пакеты и их расщепление.

5. Методы расчета термодинамических величин при помощи DFT

DFT-расчет синтеза аммиака с использованием гетерогенного катализа. Обобщение теории переходного состояния на многомерный случай. Методы поиска структуры переходного состояния для проведения квантово-химических расчетов. Метод «упругой ленты». Энергия нулевых колебаний. Методы расчета вкладов в энтропию молекул колебательного и вращательного движений.

6. Теория электродных процессов

Электрохимический потенциал как обобщение химического. Потенциал Гальвани. Потенциал Вольта. Реальный потенциал. Работа выхода заряженной частицы из среды. Равновесие на границах металл/металл и на границах металл/раствор. Электрохимическое равновесие. Двойной электрический слой и его структура. Электрохимическая ячейка.

7. Классификация и количественная характеристика электрохимических цепей

Понятие электрохимической цепи. Равновесие в электрохимической цепи. Окислительно-восстановительные полуреакции и понятие электродного потенциала. Устройство стандартного водородного электрода. Ряд напряжений. Окислительные и восстановительные функции металлов.

8. Принципы работы батарей и аккумуляторов. Методы расчета электрохимических величин при помощи DFT

Устройство pH-метров. Ионоселективные электроды. Датчики активности кислорода. Первичные и вторичные источники тока. Сухие и щелочные батареи. Литий-ионные, свинцово-кислотные и литий-воздушные аккумуляторы. Топливные ячейки. Способы расчета характеристик электрохимических микропроцессов с использованием теории функционала электронной плотности.

9. Теория коррозионных процессов

Совместимость материалов со средой. Химическая коррозия металлов, в том числе газовая. Состав и структура оксидов. Эпитаксия. Механизм химической газовой коррозии. Влияние внутренних и внешних факторов на кинетику коррозии. Электрохимическая коррозия. Вагнеровские модели. Электролиты. Работа гальванического элемента. Причины гетерогенности поверхности металлов. Электродные потенциалы. Смешанный потенциал. Электрохимическая защита. Коррозия в жидкометаллических средах.

10. Модель точечных дефектов как многомасштабная модель коррозии

Основные отличия модели точечных дефектов от модели Вагнера. Коррозионный потенциал. Проводимость железохромистой шпинели. Составление многомасштабной модели коррозии стали в контакте с водными растворами. Оптимизация параметров полученной модели. Влияние состава стали на кинетику коррозии.

11. Сдача и защита курсовых заданий

Сдача первого задания. Сдача второго задания. Сдача третьего задания. Защита курсовых заданий.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная доской и мультимедийным проектором и экраном.
У всех студентов должен быть доступ к персональному компьютеру.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Физическое материаловедение: Учебник для вузов: В 6 т./Под общей ред. Б.А. Калина. – М.: МИФИ, 2007.
2. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель, Пер. с англ. Физматгиз, 1963.
3. Физико-химические основы материаловедения / Г. Готтштайн, под ред. В.П. Зломанова, 2009.
4. Статистическая термодинамика / Ч. Киттель, 1977.
5. Физическая химия: Учеб. для биол. ф-тов университетов и пед. вузов. – 2-е изд., испр. и доп./ Кнорре Д.Г., Крылова Л.Ф., Музыкантов В.С. – М.: Высш.шк., 1990. – 416 с.: ил.
6. Теоретическая физика. Том V. Статистическая физика, часть 1. книга / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, 1976 .
7. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем / Д. Френкель, Б. Смит

Дополнительная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Термодинамика оксидов: Справ. изд. / Куликов И.С., М.: Металлургия, 1986, 344 с.
2. Электрохимия / Б. Б. Дамаскин, О. А. Петрий, Г. А. Цирлина. — 2-е изд., испр. и перераб. — М.: Химия, КолосС, 2006. — 672 с.: ил.
3. Density functional theory: a practical introduction/ D. Sholl, J. Steckel, John Wiley & Sons, Inc., 2009.
4. Коррозия и защита металлов/ А.Н. Ватолин, В.В. Рогачев, ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2008.
5. Время в химии/ А.Л. Бучаченко, Соросовский образовательный журнал, Т. 7, № 8, 2001.
6. Molecular Reaction Dynamics/ R. D. Levine, Cambridge University Press, 2005.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Для занятий потребуется следующее программное обеспечение:

Интернет-браузер, MS Word, MS Power Point, LaTeX, Adobe Reader, Anaconda Python distribution.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет	
Разработчик:	В.С. Николаев

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Дополнительные главы физической химии» обучающийся должен:

знать:

- связующие положения термодинамики, статистической физики, неорганической химии и теории кинетики химических реакций;
- основные положения электрохимии, теории коррозии, принципы работы батарей и аккумуляторов;
- границы применимости методов классической молекулярной динамики и теории функционала электронной плотности при расчете микроскопических характеристик химических и электрохимических процессов.

уметь:

- формировать многомасштабные модели химических и электрохимических процессов в различных средах с учетом особенностей строения вещества;
- применять методы компьютерного моделирования для расчета ключевых характеристик химических и электрохимических микропроцессов.

владеть:

- практическими навыками использования методов классической молекулярной динамики и теории функционала электронной плотности для расчета ключевых характеристик химических и электрохимических микропроцессов.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Темы курсовых работ:

1. Экспериментальные методы исследования структуры и времени жизни переходного состояния в химических превращениях.
2. Вычислительные методы поиска и расчета энергии переходного состояния в химических превращениях с использованием теории функционала электронной плотности.

3. Методы определения потенциалов электрохимических ячеек с привлечением атомистических расчетов.
4. Модель точечных дефектов как попытка создать многомасштабную модель коррозии.
5. Структура двойного электрического слоя на границе металл-раствор.
6. Систематизация методов расчета термодинамических характеристик химических и электрохимических процессов с использованием подходов атомистического моделирования.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Задания для выполнения и защиты курсовых работ:

1. Записать связь между термодинамической активностью и концентрацией частиц идеального газа, вывести выражение для химического потенциала идеального газа.
2. Рассчитать температурную зависимость давления кислорода над фазой оксида произвольного металла, пользуясь табличными величинами для стандартного изменения энергии Гиббса в реакции образования выбранного оксида.
3. Объяснить, почему термин «потенциал фазы» может применяться только к проводящим фазам, содержащим конечное число частиц.
4. Записать электрохимическую реакцию, которая протекает на стандартном водородном электроде, и объяснить, почему химический потенциал ионов произвольного типа в растворе можно отсчитывать от химического потенциала иона водорода H^+ ?
5. Объяснить, каким образом выбираются стандартные состояния для отсчета химического потенциала атомов вещества.
6. Описать цель и алгоритм использования метода «упругой ленты» при поиске переходного состояния в расчетах методами теории функционала электронной плотности.
7. Определить, какая из окислительно-восстановительных пар в наборе $2H^+/H_2$ и Li/Li^+ будет играть роль окислителя, а какая – роль восстановителя?
8. Объяснить, каким образом в приближении идеального газа можно рассчитать химический потенциал молекул произвольного типа с использованием теории функционала электронной плотности?
9. Определить, за счет каких процессов возникает разность потенциалов между границами оксидной пленки в ходе коррозии металла?
10. Описать функции основных элементов, входящих в электролитическую ячейку.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Оценка за семестр (дифференцированный зачет) выставляется по результатам выполнения и защиты всех домашних заданий и курсовой работы (среднее арифметическое).