

# НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича



**ЗАТВЕРДЖЕНО:**

Директор ІПМ НАН України  
Академік НАН України

*Ю.М. Солонін*  
Солонін Ю.М.

**СХВАЛЕНО:**

Вченою радою ІПМ НАН України

Протокол № 4 від 28.09.2021р.

**Силабус з навчальної дисципліни  
”Кінетика і термодинаміка нерівноважних процесів”,  
складається в межах ОПН підготовки доктора філософії  
третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти  
для здобувачів за спеціальністю 102 Хімія**

**Київ 2021**

## 1. Загальна характеристика курсу

<b>Назва дисципліни</b>	<b>Кінетика і термодинаміка нерівноважних процесів</b>
<b>Адреса викладання дисципліни</b>	вул. Кржижановського, 3, Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України, Київ, 03680, Україна
<b>Галузь знань, шифр та назва спеціальності</b>	10 «Природничі науки», 102 «Хімія»
<b>Викладачі дисципліни</b>	д.х.н., проф., пров.н.с. В.С.Судаєвцева
<b>Контактна інформація викладачів</b>	050 811 5326; <a href="mailto:sud.materials@ukr.net">sud.materials@ukr.net</a> – В.С.Судаєвцева
<b>Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються</b>	В дні лекцій за попередньою домовленістю
<b>Інформація про дисципліну</b>	Для оволодіння курсом необхідно: 1. Знати основні поняття курсів “Фізична хімія”, «Хімічна термодинаміка», «Математичний аналіз». 2. Вміти формулювати основні положення і закони фізичної хімії, термодинаміки; застосовувати основні закони до розв’язання проблем. 3. Володіти елементарними навичками пошуку та аналізу інформації, опрацювання спеціалізованої літератури. Курс розроблено для вирішення проблем, які виникають при виконанні дисертаційної роботи. Курс охоплює основи хімічної кінетики і термодинаміки нерівноважних процесів.
<b>Коротка анотація дисципліни</b>	Дисципліна «Кінетика і термодинаміка нерівноважних процесів» викладається в обсязі 2 кредитів, в тому числі 20 годин лекцій. Закінчується заліком. Предмет дисципліни “Кінетика і термодинаміка нерівноважних процесів” вивчає закони хімічної кінетики, збереження маси, енергії та імпульсу, рівняння балансу ентропії, лінійні та нелінійні співвідношення між термодинамічними силами та потоками, процеси самоорганізації у відкритих нерівноважних системах. Є дисципліною за варіативною частиною підготовки аспірантів зі спеціальності 102 Хімія для освітньої програми підготовки доктора філософії, яка викладається в Інституті проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України в 3-4 семестрі в обсязі 2 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
<b>Мета та цілі дисципліни</b>	– отримання знань з основ хімічної кінетики різних типів реакцій, лінійної та нелінійної термодинаміки нерівноважних необоротних процесів та їх застосування для розв’язання практичних задач, пов’язаних з нестационарними, нерівноважними потоками речовини, енергії та заряду у відкритих системах – оволодіння основними методами і принципами хімічної кінетики різних типів реакцій, нерівноважної термодинаміки необоротних процесів у відкритих системах необхідними в практичній діяльності аспірантів. Формувати здатність розв’язувати складні задачі і проблеми дослідницького та/або інноваційного характеру при виконанні дисертаційної роботи. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності. Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації з різних джерел. Здатність сприймати новоздобуті знання та інтегрувати їх із уже наявними, а також самостійно опановувати знання і навички, необхідні для розв’язання складних задач і проблем у нових для себе деталізованих предметних областях
<b>Вимоги навчальної</b>	Курс є дисципліною варіативної частини циклу професійної підготовки

<b>дисципліни</b>	аспірантів. Обсяг курсу – 2 кредити ECTS, 20 год аудиторних занять, з них 20 год лекційних занять, та 40 год самостійної роботи (очна форма навчання). Вивчення наукової дисципліни вимагає обов'язкове відвідування аудиторних занять, активну участь в обговоренні питань, якісне і своєчасне виконання завдань самостійної роботи, а також участь у всіх видах контролю.
<b>Підсумкова форма контролю знань</b>	Залік
<b>Очікувані результати навчання</b>	<i>Після завершення цього курсу студент буде:</i> - <b>знати:</b> Основні поняття хімічної кінетики різних типів реакцій та визначення термодинаміки; особливості перебігу термодинамічних процесів у відкритих системах, що перебувають у станах близькому та далекому від термодинамічної рівноваги; умови утворення дисипативних структур та приклади таких структур - <b>вміти:</b> Визначати порядок і константу швидкості хімічної реакції, термодинамічні потоки та сили, їх зв'язок з ентропією системи, на основі цього визначати стан системи, стійкість станів термодинамічної системи. Самостійно працювати з відповідною літературою з хімічної кінетики різних типів реакцій, нерівноважної термодинаміки. Демонструвати обізнаність у сучасних уявленнях та перспективах розвитку хімічної кінетики різних типів реакцій і нерівноважної термодинаміки відкритих систем як галузі природничих наук, що розвиваються. Розуміти підходи до створення новітніх матеріалів, володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі хімії та бути здатним застосовувати їх до професійної діяльності на межі предметних галузей. Опитування відбувається в процесі лекцій.
<b>Ключові слова</b>	Хімічна кінетика різних типів реакцій, порядок і константа швидкості, енергія активації, нерівноважна термодинаміка
<b>Пререквізити</b>	Для вивчення курсу аспіранти потребують базових знань з вищої математики, основних розділів загальної і неорганічної хімії (теплові ефекти, швидкості хімічних реакцій, хімічна рівновага); хімічної термодинаміки, здатність демонструвати розуміння питань використання технічної літератури; здатність розуміти і використовувати термодинамічний підхід до створення металевих, керамічних композиційних матеріалів; розуміти особливості організації та планування наукової діяльності.
<b>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу</b>	Презентація, лекції, дискусія
<b>Необхідне обладнання</b>	Мультимедійне обладнання

## 2. План викладання дисципліни

Тема, план	Кількість годин		
	Усього	у тому числі	
		аудиторні	Самостійна робота
<b>Змістовний модуль 1. «Кінетика нерівноважних процесів»</b>			
<b>Тема 1. «Формальна кінетика».</b> <i>Основні поняття хімічної кінетики - питома швидкість, молекулярність. Класифікація реакцій. Основний постулат хімічної кінетики. Визначення порядків і константа швидкості хімічної реакції реакцій. Односторонні реакції нульового, першого, другого, третього і дробового порядків. Методи визначення кінетичного порядку хімічних реакцій. Диференціальні і інтегральні методи. Реакції складних типів. Кінетичний аналіз оборотних, паралельних і послідовних реакцій першого порядку.</i>	8	2	6
<b>Тема 2 «Закони і принципи сучасної хімічної кінетики»</b> <i>Принцип стаціонарності Боденштейна і область його застосування. Ланцюгові і фотохімічні реакції. Гетерогенні процеси. Елементарні процеси зародження, продовження, розгалуження і обриву ланцюгів. Півострів спалаху. Кінетичний аналіз реакції окиснення водню. Тепловий вибух і умови самозапалення на третій межі значень тиску і температури. Реакції в потоці. Залежність швидкості хімічних реакцій від температури. Правило Вант-Гоффа і рівняння Арреніуса</i>	10	2	8
<b>Всього за модулем</b>	<b>18</b>	<b>4</b>	<b>14</b>
<b>Змістовний модуль 2. «Закони і поняття нерівноважної термодинаміки»</b>			
<b>Тема 3 «Вступ. Предмет і метод курсу».</b> <i>Зв'язок нерівноважної термодинаміки з іншими розділами науки. Рівноважна і нерівноважна термодинаміка. Зв'язок нерівноважної термодинаміки з іншими розділами науки - молекулярної фізики і фізичної хімії. Ізольовані, відкриті та закриті системи.</i>	6	2	4
<b>Тема 4. «Необоротні термодинамічні процеси».</b> <i>Причини необоротності. Необоротні процеси теплопередачі, адіабатичного розширення, дифузії. Термодинамічні потоки та сили. Сили у випадку хімічних реакцій, потоку градієнта температури, концентрації, хімічного потенціалу, напруженості електричного поля.</i>	6	2	4
<b>Тема 5. «Принципи лінійної нерівноважної термодинаміки».</b> <i>Принцип локальної рівноваги. Рівняння Онзагера руху макросистеми. Принцип Кюрі для ізотропних систем. Принцип симетрії кінетичних коефіцієнтів. Співвідношення Онзагера.</i>	6	2	4
<b>Тема 6. «Зв'язані потоки».</b> <i>Приклади зв'язаних потоків: термомеханічний, термоелектричний та термомагнітний ефекти, термодифузія (ефект Сорре). Термодинамічні процеси у відкритих нерівноважних системах. Вироблення ентропії та дисипація енергії у відкритій системі. Теорема Пригожина. Стійкість стаціонарного стану</i>	6	2	4
<b>Тема 7. «Формалізм нелінійної термодинаміки».</b> <i>Системи, що знаходяться у стані, далекому від термодинамічної рівноваги. Загальні властивості вироблення ентропії. Лінійний аналіз стійкості нерівноважних стаціонарних станів. Циклічні процеси. Еволюція відкритих нерівноважних систем. Критерій Гленсдорфа-Пригожина. Модифіковані рівняння Онзагера для спряжених процесів в положенні далекому від стану термодинамічної рівноваги</i>	6	2	4

<b>Тема 8. «Стохастична інтерпретація динамічних рівнянь нелінійної нерівноважної термодинаміки».</b> <i>Варіаційні принципи нелінійної термодинаміки. Дисипативні структури у суттєво нерівноважних системах. Просторові, часові та просторово-часові дисипативні структури.</i>	6	2	4
<b>Всього за модулем</b>	<b>36</b>	<b>12</b>	<b>24</b>
<b>Практичні заняття 1</b> <i>Розв'язання задач з хімічної кінетики</i>	2	2	0
<b>Практичне заняття 2.</b> <i>Розв'язання задач з нерівноважної термодинаміки.</i>	4	2	2
<b>Всього</b>	<b>60</b>	<b>20</b>	<b>40</b>

### 3. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

#### Основна:

1. Є.П. Ковальчук, О.В. Решетняк. Фізична хімія: Підручник. – Львів: Видавничий цент ЛНУ імені Івана Франка, 2007.
2. Еремін Е.Н. Основы химической кинетики: Учебн. пособие. Вища школа, 1976.
3. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики: Учебн. пособие. М.: Высш. школа, 1984.
4. С.Р. де Гроот, П. Мазур. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.
5. И. Пригожин, Д. Кондепуди. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002.
6. Р. Хаазе. Термодинамика необратимых процессов. М.: Мир, 1967.
7. И. Дьярмати. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1974.
8. Д.Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
9. Л.А. Булавін, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сисоев. Нерівноважна термодинамика. Ч. 1. Рівняння дифузії. К.: ВЦ Київський університет, 2003.

#### Додаткова:

1. И.Ф. Бахарева. Нелинейная неравновесная термодинамика. Изд-во Саратовского ун-та, 1976.
2. . И. Пригожин. Введение в термодинамику необратимых процессов. И.: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001.
3. 9. И.П. Базаров, Э.В. Геворкян, П.Н. Николаев. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. Изд. МГУ, 1989.
4. Е.П. Агеев. Неравновесная термодинамика в вопросах и задачах.
5. Денисов Е.Т. Кинетика гомогенных химических реакций. – М.: Химия, 1978.