

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича



ЗАТВЕРДЖЕНО:

Директор ІПМ НАН України
Академік НАН України

Солонін Ю.М.

СХВАЛЕНО:

Вченою радою ІПМ НАН України

Протокол № 4 від 28.09.2021р.

**Силабус з навчальної дисципліни
«Фізико-хімічні основи розробки нових матеріалів та технологічних процесів (теоретичні основи та застосування до систем металів)»,
складається в межах ОПН підготовки доктора філософії
третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти
для здобувачів за спеціальностями**

10 «Природничі науки» - 102 «Хімія», 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

13 – «Механічна інженерія» - 132 «Матеріалознавство»

1. Загальна характеристика курсу

| | |
|--|--|
| Назва дисципліни | Фізико – хімічні основи розробки нових матеріалів та технологічних процесів (застосування до оксидних систем) |
| Адреса викладання дисципліни | вул. Кржижановського, 3, Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ, 03142, Україна |
| Галузь знань, шифр та назва спеціальності | 10 «Природничі науки» - 102 «Хімія», 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» 13 – «Механічна інженерія» - 132 «Матеріалознавство» |
| Викладачі дисципліни | д.х.н., проф., пров.н.с. В.С.Судавцова д.х.н., с.н.с., пров.н.с. М.В.Буланова |
| Контактна інформація викладачів | 050 811 5326; sud.materials@ukr.net – В.С.Судавцова 066 616 6172; mvbulanova2@gmail.com – М.В. Буланова |
| Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються | В дні лекцій за попередньою домовленістю |
| Інформація про дисципліну | Курс розроблено таким чином, щоб надати слухачам знання, необхідні для проведення наукових досліджень в рамках виконання дисертаційної роботи. Курс охоплює основи хімічної термодинаміки та фізико-хімічного аналізу багатокомпонентних гетерогенних систем, необхідних для становлення науковця-хіміка, що працює у галузі створення новітніх високотехнологічних матеріалів. |
| Коротка анотація дисципліни | Дисципліна “Фізико – хімічні основи розробки нових матеріалів та технологічних процесів (теоретичні основи та застосування до систем металів)” є дисципліною за нормативною частиною підготовки аспірантів зі спеціальностями 102 «Хімія», 105 «Прикладна фізика та наноматеріали», 132 «Матеріалознавство» для освітньої програми підготовки доктора філософії, яка викладається в Інституті проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України в 1 семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). |
| Мета та цілі дисципліни | Метою навчальної дисципліни “Фізико – хімічні основи розробки нових матеріалів та технологічних процесів (теоретичні основи та застосування до систем металів)” є формування фундаментальних знань для розробки матеріалів із заданим та керованим комплексом властивостей. Цілями дисципліни є освоїти основи хімічної термодинаміки; методи розрахунків для визначення можливостей і напрямків перебігу хімічних і фізичних процесів; навчитися розуміти, яким чином термодинамічні властивості фаз перетворюються в геометричний образ – діаграму стану; навчитися читати діаграми стану подвійних, потрійних і багатокомпонентних гетерогенних систем і застосовувати ці знання при плануванні дослідження і аналізі отриманих результатів. |
| Вимоги навчальної дисципліни | Курс є дисципліною нормативної частини циклу професійної підготовки аспірантів. |

| | |
|---|--|
| | Обсяг курсу – 3 кредити ECTS, 30 год аудиторних занять (з них 20 год. лекційних занять, 10 год. практичних) та 60 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. |
| Підсумкова форма контролю знань | Іспит |
| Очікувані результати навчання | <i>Після завершення цього курсу студент буде:</i> - знати: 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. - вміти: інтегрувати існуючі методики та методи одержання сучасних матеріалів та адаптувати їх для розв'язання наукових завдань при проведенні дисертаційних досліджень. |
| Ключові слова | <i>Компонент, фаза, система, термодинамічні властивості, діаграма стану, РФА, ДТА, мікроструктура</i> |
| Пререквізити | Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з основних розділів фізики (молекулярна фізика, динаміка, кінематика); закони механіки (робота, потужність, одиниці їх вимірювання, зв'язок одиниць вимірювання в різних системах); розділи математики (алгебра, елементи аналізу, геометрія, диференційне та інтегральне числення); розділи загальної і неорганічної хімії (екзотермічні і ендотермічні процеси, теплові ефекти, швидкості хімічних реакцій, хімічна рівновага); здатність демонструвати розуміння питань використання технічної літератури; здатність розуміти використання термодинамічного підходу до створення металевих, керамічних композиційних матеріалів; розуміти особливості організації та планування наукової діяльності. |
| Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу | Презентація, лекції, дискусія |
| Необхідне обладнання | Мультимедійне обладнання |

2. План викладання дисципліни

| Тема, план | Кількість годин | | |
|---|-----------------|--------------|-------------------|
| | усього | у тому числі | |
| | | аудиторні | Самостійна робота |
| Змістовний модуль 1. «Закони хімічної термодинаміки» В.С.Судаєвцова | | | |
| Тема 1 «Основні поняття хімічної термодинаміки». В.С.Судаєвцова <i>Система, класифікація систем. Властивості (параметри) системи. Стани системи (стабільний, нестабільний, метастабільний). Процеси (рівноважний, нерівноважний, зворотній, незворотній). Термодинамічна рівновага. Рівняння стану. Тепло і робота.</i> | 3 | 1 | 2 |
| Тема 2. «Перший закон термодинаміки». | 4 | 1 | 3 |

| | | | |
|---|-----------|----------|-----------|
| <i>Внутрішня енергія. Формулювання і аналітичний вираз I закону термодинаміки. Застосування до різних процесів. Ентальпія. Основні закони термодинаміки. Закон Гесса. Формула Кірхгофа. Теплоємність твердих речовин за Ейнштейном і Дебаєм.</i> | | | |
| Тема 3. «Другий і третій закони термодинаміки». <i>Самочинний і не самочинний процес. Ентропія. Формулювання II закону термодинаміки та аналітичний вираз. Об'єднане рівняння I і II законів. Їх порівняння. Статистичний характер II начала термодинаміки. Постулат Планка (III закон термодинаміки).</i> | 5 | 2 | 3 |
| Тема 4. «Термодинамічні потенціали та характеристичні функції». <i>Вільна енергія Гельмгольца. Потенціал Гіббса. Залежність потенціалу Гіббса від температури та тиску. Фазові переходи I і II роду. Термодинамічні характеристики хімічної реакції. Вимірювання потенціалу Гіббса реакції.</i> | 4 | 1 | 3 |
| Практичне заняття 1. <i>Розв'язання задач з хімічної термодинаміки</i> | 4 | 1 | 3 |
| Всього за модулем | 20 | 6 | 14 |
| Змістовний модуль 2. «Однокомпонентні системи» М.В.Буланова | | | |
| Тема 5. «Рівновага між фазами в однокомпонентній гетерогенній системі». <i>Поняття «система», «компонент», «фаза». Фази однокомпонентної гетерогенної системи. Правило фаз Гіббса. Принципи Курнакова. Умови рівноваги між фазами. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса. Отримання діаграми стану однокомпонентної системи із застосуванням рівняння Клапейрона-Клаузіуса</i> | 4 | 1 | 3 |
| Тема 6. «Фазові діаграми однокомпонентних систем». <i>Аналіз діаграми стану однокомпонентної системи. Геометричний вигляд бі-, моно- та інваріантної рівноваг. Застосування правила фаз. Діаграма стану води. Енантіотропні і монотропні перетворення. Діаграми стану сірки, ZrO_2, CO_2, Fe.</i> | 4 | 2 | 2 |
| Всього за модулем | 8 | 3 | 5 |
| Змістовний модуль 3. «Двокомпонентні системи» В.С.Судавцова, М.В.Буланова | | | |
| Тема 7. «Термодинаміка розчинів». В.С.Судавцова <i>Гетерогенна суміш і розчин з точки зору хімічної термодинаміки. Одиниці визначення концентрації. Парціальні молярні величини компонентів розчинів. Хімічний потенціал. Закон Гіббса-Дюгема. Ідеальні розчини. Закони Рауля і Генрі. Реальні розчини. Надлишкові величини. Термодинамічна активність. Відхилення від закону Рауля.</i> | 6 | 2 | 4 |
| Тема 8. «Двофазна рівновага». М.В.Буланова <i>Термодинамічний вивід діаграми стану типу «сигара». Ліквідус і солідус. Діаграми стану з мінімумом і максимумом. Тверді розчини. Типи твердих розчинів. Розчини заміщення. Правила Юм-Розері. Розчини проникнення. Металохімічні фактори. Діаграми стану з розширенням розчину. Застосування правила фаз і правила важеля. Аналіз зміни фазового складу і хімічного складу фаз при охолодженні. Приклади діаграм стану та їх аналіз.</i> | 6 | 2 | 4 |
| Тема 9. «Трифазна рівновага». М.В.Буланова <i>Термодинамічний вивід діаграми стану евтектичного типу. Ліквідус, солідус і сольвус. Застосування правила фаз і правила важеля. Аналіз зміни фазового складу і хімічного складу фаз при кристалізації. Приклади діаграм стану та їх аналіз. Порівняння з системою перитектичного типу. Основні типи фазових діаграм подвійних систем. Інваріантні рівноваги в подвійних системах. Діаграми стану подвійних систем з конгруентною та інконгруентною сполукою. Системи з поліморфними перетвореннями фаз.</i> | 5 | 2 | 3 |
| Практичне заняття 2. <i>Опис діаграми стану подвійних систем.</i> | 3 | 1 | 2 |
| Всього за модулем | 20 | 7 | 13 |
| Змістовний модуль 4. «Діаграми стану трикомпонентних систем» М.В.Буланова | | | |
| Тема 10. «Двофазна рівновага». <i>Вісі діаграми стану. Представлення складу. Ізоконцентрація і промінь. Випадок, якщо обмежуючі подвійні системи утворюють неперервні ряди твердих розчинів типу «сигара». Вигляд просторової діаграми стану. Поверхні ліквідусу і солідусу та їх проєкції.</i> | 5 | 2 | 3 |

| | | | |
|--|-----------|-----------|-----------|
| <i>Ізотермічні та політермічні розрізи. Проекції поверхонь ліквідусу і солідусу. Ізотерми. Діаграма стану з сідлою точкою. Вигляд просторової діаграми. Поверхні ліквідусу і солідусу та їх проекції. Ізотермічні та політермічні розрізи. Проекції поверхонь ліквідусу і солідусу. Ізотерми. Системи з розширенням твердого розчину. Приклади.</i> | | | |
| Тема 11. «Трифазні рівноваги евтектичного і перитектичного типів». <i>Вигляд просторової діаграми стану. Поверхні ліквідусу і солідусу та їх проекції. Первинні фази. Трифазний об'єм. Лінійчасті поверхні. Застосування правила фаз. Ізотермічні та політермічні розрізи. Проекції поверхонь ліквідусу і солідусу. Ізотерми. Діаграма плавкості. Аналіз зміни фазового складу і хімічного складу фаз при кристалізації. Реакційні схеми. Випадок, коли трифазна рівновага є інваріантною.</i> | 6 | 2 | 4 |
| Тема 12. «Чотирифазна рівновага евтектичного типу». <i>Поняття про потрійну евтектику. Побудова схематичних проекцій поверхонь ліквідусу і солідусу. Діаграма плавкості. Коноди. Характеристика площин, ліній та точок на діаграмі плавкості із застосуванням правила фаз. Аналіз зміни фазового складу і хімічного складу фаз при кристалізації. Ізотермічні та політермічні розрізи. Реакційна схема. Випадок, коли в обмежувачій подвійній системі утворюється конгруентна сполука. Випадок, коли в двох або всіх подвійних системах утворюються конгруентні сполуки. Триангуляція.</i> | 5 | 2 | 3 |
| Практичне заняття 3. <i>Побудова політермічних перерізів.</i> | 5 | 2 | 3 |
| Практичне заняття 4. «Чотирифазна рівновага перехідного типу». <i>Проекції поверхонь ліквідусу і солідусу. Діаграма плавкості. Коноди. Характеристика площин, ліній та точок на діаграмі плавкості із застосуванням правила фаз. Аналіз зміни фазового складу і хімічного складу фаз при кристалізації. Ізотермічні та політермічні розрізи. Реакційна схема.</i> | 6 | 2 | 4 |
| Практичне заняття 5. «Чотирифазна рівновага перитектичного типу». <i>Потрійна сполука – конгруентна та інконгруентна. Їх відмінність у діаграмі плавкості. Характеристика площин, ліній та точок на діаграмі плавкості із застосуванням правила фаз. Аналіз зміни фазового складу і хімічного складу фаз при кристалізації. Ізотермічні та політермічні розрізи. Реакційна схема. Види інваріантних чотирифазних перетворень у потрійних системах. Порівняння їх геометричних образів.</i> | 4 | 1 | 3 |
| Практичне заняття 6. <i>Побудова політермічних перерізів.</i> | 3 | 1 | 2 |
| Практичне заняття 7. «Представлення чотирьохкомпонентної системи». <i>Представлення складу. Розрізи.</i> | 5 | 1 | 4 |
| Практичне заняття 8. <i>Розв'язання задач.</i> | 3 | 1 | 2 |
| Всього за модулем | 42 | 14 | 28 |
| Всього | 90 | 30 | 60 |

3. Контроль знань

В основі методів контролю знань використовуються поточне індивідуальне опитування. Для аспірантів спеціальності 102 – іспит на першому році навчання, для аспірантів спеціальностей 105, 132 – залік на першому році навчання.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

| Сума балів за навчальну діяльність | Оцінка ECTS | Оцінка за національною шкалою |
|------------------------------------|-------------|-------------------------------|
| 90-100 | -A, A, +A | відмінно |
| 82-89 | -B, B, +B | добре |

| | | |
|-------|-----------|--|
| 74–81 | -C, C, +C | задовільно |
| 64–73 | -D, D, +D | |
| 60-63 | E | незадовільно з можливістю повторного складання іспиту |
| 35–59 | FX | незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни |
| 0-34 | F | |

4. Список базової літератури

1. П. Эткинс, Дж. де Паула. Физическая химия. М.: Мир, 2007.
2. М.В.Товбин. Физическая химия. Киев: Вища школа, 1975.
3. М.Х. Карапетьянц. Химическая термодинамика. М-ва, Ленинград: ГНТИ химической литературы, 1949.
4. Люпис. Химическая термодинамика в материаловедении. М.: Мир, 1985.
5. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. – М., 1991.
6. Майер Р. Химическая термодинамика. – М.: Мир. –1991.
7. Физическое материаловедение (под ред. Р.Кана и П.Хаазена). 3-е изд. Москва, Металлургия, т. 2, 1987.
8. Alan Prince. Alloy Phase Equilibria. On-line version.
9. Hugh Shercliff and Mike Ashby. Phase diagrams and phase transformations. 5th Edition, March 2009, Cambridge. www.teachingresources.grantadesign.com
10. Рябин В.А., Остроумов М.А., Свит Т.Ф. Термодинамические свойства веществ (Справочник). – Л.: “Химия”. – 1977. – 388 с.
11. В.П.Древинг. Правило фаз. М.: Изд-во Московского университета, 1954.
12. В.Г.Кудін, В.А.Макара, В.С.Судавцова. Фазові рівноваги в сплавах. К.: Логос, 2010.
13. Данілов В.І. Вибрані праці. Київ. Наукова думка. 1971.
14. С.С.Штейнберг. Металловедение. Металлургиздат. Свердловск. 1961.
15. Ю.Н.Таран, В.И.Мазур. Структура эвтектических сплавов. М.: Металлургия, 1978.
16. Корольков А.М. Литейные свойства металлов и сплавов. М.: Изд-во АН СССР, 1960.
17. В.З.Туркевич. Хімічна термодинаміка та фазові рівноваги у системах з вуглецем і нітридом бору. Київ, 2001.
18. Петров Д.А. Двойные и тройные системы. М.: Металлургия, 1986.
19. У.Пирсон. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. М.:Мир, 1977.
20. А.Н.Задиранов, А.М.Кац. Теоретические основы кристаллизации металлов и сплавов: учеб. пособие. М. 2008.
21. Ю. Стародубцев, В. Белозеров. Аморфные металлические материалы // Силовая электроника, 2009, № 2.
22. С. Suryanarayana Mechanical alloying and milling // Progress in Materials Science 46 (2001) 1-184.
23. Н.К.Толочко, А. А. Андрушевич. Кластерная структура расплавов // Литье и металлургия. – 2013. – 4 (73). – С. 59 – 64.
24. Y. Shen, J.H. Perepezko. Al-based amorphous alloys: Glass-forming ability, crystallization behavior and effects of minor alloying additions // J/ Alloys and Compounds. – 2017. – 707. – P. 3-11.
25. Arthur D. Pelton. Physical Metallurgy (Fifth Edition). Chapter 3 “Thermodynamics and Phase Diagrams” // 2014. P. 203-303. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-53770-6.00003-4>.
26. M.Hillert. Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations. Second Edition // Cambridge University Press. – 2008.
27. R. Schmid-Fetzer. Phase Diagrams: The Beginning of Wisdom // J. Phase Equilibria and Diffusion – 2014. – 35. – P. 735–760. DOI: 10.1007/s11669-014-0343-5