**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ**

**Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича**

**ЗАТВЕРДЖЕНО:**
В.о. директора ІПМ НАН України
Чл.-кор. НАН України

_____ Г.А.Баглюк

**СХВАЛЕНО**
Вченою радою ІПМ НАН України

Протокол № 6 від 24 жовтня 2023 р

# 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 2023**

## 1. Загальна характеристика курсу

| | |
|---|---|
| **Назва дисципліни** | **Кінетика і термодинаміка нерівноважних процесів** |
| **Адреса викладання дисципліни** | вул.Омеляна Пріцака, 3, Інститут проблем матеріало-знавства ім. І.М.Францевича НАН України, Київ, 03680, Україна |
| **Галузь знань, шифр та назва спеціальності** | 10 «Природничі науки», 102 «Хімія» |
| **Викладачі дисципліни** | д.х.н., проф., пров.н.с. В.С.Судавцова |
| **Контактна інформація викладачів** | 050 811 5326; sud.materials@ukr.net – В.С.Судавцова |
| **Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються** | В дні лекцій за попередньою домовленістю |
| **Інформація про дисципліну** | 1. Знати основні поняття курсів, “Фізична хімія”, «Хімічна термодинаміка»,, «Математичний аналіз».<br>2. Вміти формулювати основні положення і закони фізична хімії, термодинаміки; застосовувати основні закони до розв’язання проблем.<br>3. Володіти елементарними навичками пошуку та аналізу інформації, опрацювання спеціалізованої літератури. Курс розроблено потрібен для вирішення проблем, які виникають при виконанні дисертаційної роботи. Курс охоплює основи хімічної кінетики і термодинаміки нерівноважних процесів. |
| **Коротка анотація дисципліни** | Дисципліна «Кінетика і термодинаміка нерівноважних процесів викладається у 4 семестрі 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.<br>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 4 семестрі в обсязі 2 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). |
| **Мета та цілі дисципліни** | – 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 нестаціонарними, 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 |
| **Вимоги навчальної дисципліни** | Курс є дисципліною варіативної частини циклу професійної підготовки аспірантів.<br>Обсяг курсу – 2 кредити ECTS, 20 год аудиторних занять, з них 10 год лекційних занять, та 40 год самостійної роботи (очна форма навчання). Вивчення наукової дисципліни вимагає обов'язкове відвідування аудиторних занять, активну участь в обговорені питань, якісне і своєчасне виконання завдань самостійної роботи, а також участь у всіх видах контролю. |
| **Підсумкова форма контролю знань** | Залік |
| **Очікувані результати навчання** | *Після завершення цього курсу студент буде:*<br>- ***знати:***<br>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<br>- **вміти:**<br>Визначати порядки і □константа 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 Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, 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. |
| **Ключові слова** | Хімічна кінетика, різних типів реакцій, порядок і □константа швидкості, нерівноважна термодинаміка |
| **Пререквізити** | 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. |
| **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 формальної кінетики”** Формальна кінетика. 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. | 3 | 1 | 6 |
| **Змістовний модуль 2. «Закони і принципи сучасної хімічної кінетики”** 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 | 3 | 1 | 6 |
| **Змістовний модуль 3. «Закони і поняття** нерівноважної **термодинаміки»** **Тема 3** Вступ. Предмет і метод курсу. 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. Тема 4. Необоротні термодинамічні процеси. 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. | 3 | 2 | 7 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| **Змістовний модуль 4. «** Принципи лінійної нерівноважної термодинаміки**»**<br>Тема 5.. Принципи лінійної нерівноважної термодинаміки. Принцип локальної рівноваги. Рівняння Онзагера руху макросистеми. Принцип Кюрі для ізотропних систем. Принцип симетрії кінетичних коефіцієнтів. Співвідношення Онзагера.<br>Тема 6. Приклади зв'язаних потоків: термомеханічний, термоелектричний та термомагнітний ефекти, термодифузія(ефект Соррe). Термодинамічні процеси у відкритих нерівноважних системах. Вироблення ентропії та дисипація енергії у відкритій системі. Теорема Пригожина. Стійкість стаціонарного стану | 3 | 2 | 7 |
| **Змістовний модуль 5. «**Формалізм нелінійної термодинаміки **»**<br>Тема 7. Формалізм нелінійної термодинаміки. Системі, 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 Онсагера для спряжених процесів в положенні далекому від стану термодинамічної рівноваги | 4 | 2 | 7 |
| **Змістовний модуль 6. «**Стохастична інтерпретація динамічних рівнянь та дисипативні структури. **»**<br>Тема 8. Стохастична інтерпретація динамічних рівнянь нелінійної нерівноважної термодинаміки. Варіаційні принципи нелінійної термодинаміки.<br>Тема 9. Дисипативні структури у суттєво нерівноважних системах. Просторові, часові та просторово-часові дисипативні структури. | 4 | 2 | 7 |
| | 20 | 10 | 40 |
| **Практичні заняття 1**<br>*Розв'язання задач з хімічної кінетики* | 5 | 2 | 3 |
| **Практичне заняття 2.**<br>*Розв'язання задач з* нерівноважної *термодинаміки.* | 5 | 2 | 3 |
| ***Всього практичні*** | **10** | **4** | **6** |

## 3. Контроль знань

В основі методів контролю знань використовуються поточне індивідуальне опитування та залік. Залік проводиться на другому році навчання.

**Шкала оцінювання: національна та ECTS**

| Оцінка ECTS | Сума балів за навчальну діяльність | Оцінка за національною шкалою |
|---|---|---|
| A | 90–100 | Відмінно |
| B | 82–89 | Добре |
| C | 74–81 | |
| D | 64–73 | Задовільно |
| E | 60–63 | Достатньо |
| $F_X$ | 35–59 | Незадовільно з можливістю повторного складання |
| F | 1–34 | Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням курсу |

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

Основна:


1. Є.П. Ковальчук, О.В. Решетняк. Фізична хімія: Підручник. – Львів: Видав- ничий цент ЛНУ імені Івана Франка, 2007.
2. Роїк О.С., Усенко Н.І. Фізична хімія. термодинаміка та електрохімія. (Навчальний посібник для студентів хімічних факультетів) Київ-2022 , 308
3. 2. Wright M. R. An Introduction to Chemical Kinetics. - John Wiley & Sons, 2004.-429 p. 3. House J. E. Principles of Chemical Kinetics. – Elsevier, 2007.-326 p
4. Діюк В.Є. Кінетичний аналіз експериментальних даних Київський національний університет імені Тараса Шевченка (-) · · Київ : ВПЦ "Київський університет" 2011.
5. Л.А. Булавін, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сисоєв. Нерівноважна термодинамика. Ч. 1. Рівняння дифузії. К.: ВЦ Київський университет, 2003.
6. Булавін, Л. А., Гаврюшенко, Д. А., Сисоєв, В. М. Нерівноважна термодинаміка: Київ: Київський університет імені Тараса Шевченка, 2014. 31с.


Додаткова:


1. Волчанський, О. В., Гур'євська, О. М., Подопригора, Н. В. Термодинаміка і статистична фізика: навчальний посібник: [для студ. ф.-м. фак. вищ. пед. навч. закл.]: Кіровоград: ТОВ «Сабоніт», 2012. 431с.
2. Мороз, І. О., Завражна, О. М. Основи статистичної термодинаміки та елементи нанотермодинаміки: Суми: СумДПУ імені А. С. Макаренка, 2016. 240с.
3. Demirel, Y. Nonequilibrium thermodynamics: Transport and rate processes in physical, chemical and biological systems: Nonequilibrium Thermodynamics: Transport and Rate Processes in Physical, Chemical and Biological Systems: Third Edition. 2014