



Національна академія наук України
Інститут проблем матеріалознавства
ім. І.М. Францевича



Силабус (робоча програма) навчальної дисципліни
**ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ОСНОВИ РОЗРОБКИ НОВИХ МАТЕРІАЛІВ ТА
ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ**
**PHYSICO-CHEMICAL BASIS OF THE DEVELOPMENT OF NEW
MATERIALS AND TECHNOLOGICAL PROCESSES**

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	10 «Природничі науки»
Спеціальність	102 «Хімія»
Освітня програма	Фізична хімія неорганічних матеріалів
Статус дисципліни	Обов'язкова
Форма навчання	денна (очна)
Рік підготовки, семестр	1 курс навчання, осінній семестр
Обсяг дисципліни	3 кредити ECTS, 90 годин
Семестровий контроль/ контрольні заходи	іспит
Розклад занять	лекція – (20 годин); практика/семінар/консультації – 1 раз на два тижні (12 годин); самостійна робота 58 год., у тому числі на виконання індивідуальних/домашніх завдань 20 год, іспит – 1 год
Мова викладання	українська
Інформація про викладачів	Д.х.н., проф., пров.н.с. Судавацова Валентина Савеліївна, 050 811 5326; sud.materials@ukr.net Д.х.н., с.н.с., пров.н.с. Буланова Марина Вадимівна, 066 616 6172; mvbulanova2@gmail.com
Розміщення курсу	Google Classroom; доступ за запрошенням викладача

Програма навчальної дисципліни

1. Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчення та результати навчання

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 багатокomпонентних гетерогенних систем, необхідних для становлення науковця-хіміка, що працює у галузі створення новітніх високотехнологічних матеріалів.

Предмет освітньої компоненти - застосування хімічної термодинаміки для визначення умов перебігу хімічних і фізичних процесів, оптимального планування робіт та компетентного аналізу результатів щодо створення нових матеріалів.

Метою освітньої компоненти є формування у здобувачів вищої освіти (з.в.о.) рівня PhD компетентностей:

Інтегральна компетентність:

Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі хімії та хімічного матеріалознавства, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань, оволодіння методологією наукової та науково-педагогічної діяльності, проведення самостійного наукового дослідження, результати якого мають наукову новизну, теоретичне та практичне значення.

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність до освоєння і системного аналізу через наукове сприйняття і критичне осмислення нових знань в предметній та міжпредметних галузях.

ЗК02. Здатність до критичного аналізу і креативного синтезу нових ідей, які можуть сприяти в академічному і професійному контекстах технологічному, соціальному та культурному прогресу суспільства, базованому на знаннях.

ЗК03. Здатність до розв'язування складних завдань, розуміння відповідальності за результат роботи з урахуванням бюджетних витрат та персональної відповідальності.

ЗК04. Здатність до спілкування з колегами, академічною аудиторією та громадськістю як на національному, так і на міжнародному рівні для реалізації інноваційного проекту або вирішення наукової проблеми.

ЗК05. Здатність до самовдосконалення, адаптації та дії в нових ситуаціях, креативність, прагнення працювати самостійно.

ЗК06. Здатність оцінювати соціальну значимість результатів своєї діяльності, бути відповідальним громадянином, усвідомлювати рівні можливостей та гендерні проблеми.

ЗК07. Розуміння значення дотримання етичних норм та авторського права при проведенні наукових досліджень, презентації їх результатів та у науково-педагогічній діяльності.

ЗК09. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

Фахові компетентності:

ФК01. Наявність глибоких обґрунтованих знань в галузі фізичної хімії, детальне розуміння підходів до аналізу інформації і застосування її до створення новітніх матеріалів, вміння проводити експериментальні і теоретичні дослідження у галузі фізичної хімії.

ФК02. Знання сучасного стану і напрямків розвитку хімії неорганічних матеріалів на міжнародному, міждержавному, державному та регіональному рівнях.

ФК03. Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі хімії з урахуванням міжгалузевих зв'язків для забезпечення потреб у високоефективних матеріалах, енерго- та ресурсозберігаючих технологіях.

ФК04. Здатність реалізувати проекти, включаючи власні дослідження, які дають можливість переосмислити наявне та створити нове цілісне знання та/або професійну практику і розв'язання значущих соціальних, наукових, культурних, етичних та інших проблем хімії, зокрема, фізичної хімії неорганічних матеріалів.

ФК05. Спроможність спілкуватись в галузі хімії в діалоговому режимі в різномовному середовищі.

ФК06. Здатність до ініціювання інноваційних комплексних технічних проектів, лідерства та повної автономності під час їх реалізації.

ФК07. Соціальна відповідальність за результати прийняття стратегічних технічних рішень, пов'язаних з навколишнім середовищем.

ФК08. Здатність до постійного самовдосконалення у професійній сфері, планування та реалізації експерименту, відповідальність за навчання інших при проведенні науково-педагогічної діяльності та наукових досліджень в галузі хімії.

ФК09. Розуміння теоретичних засад, що лежать в основі методів досліджень стану навколишнього середовища, методології проведення теоретичних і експериментальних досліджень.

Програмні результати навчання. Після засвоєння освітньої компоненти аспіранти мають продемонструвати такі результати навчання:

РН01. Проявляти наукові погляди та підходи при проведенні експертного аналізу наукових даних, оцінювати вплив фізико-хімічних факторів на властивості матеріалів.

РН02. Володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі хімії та бути здатним застосовувати їх до професійної діяльності на межі предметних галузей.

РН03. Інтегрувати існуючі методики та методи досліджень та адаптувати їх для розв'язання наукових завдань при проведенні дисертаційних досліджень.

РН05. Визначити закономірності та особливості поведінки матеріальних об'єктів.

РН11. Використовувати сучасні інформаційні джерела національного та міжнародного рівня для оцінки стану вивченості об'єкту досліджень і актуальності наукової проблеми.

РН12. Демонструвати навички роботи з сучасним обладнанням при проведенні експериментальних досліджень з хімії.

РН14. Вміти доступно, на високому науковому рівні доносити сучасні наукові знання та результати досліджень до професійної та непрофесійної аудиторії.

РН19. Дотримуватись етичних норм, враховувати авторське право та норми академічної доброчесності при проведенні наукових досліджень, презентації їх результатів та у науково-педагогічній діяльності.

PH20. Використовувати набуті знання та компетенції з хімії для реалізації оригінального рішення, направлено на розв'язання конкретної науково-технічної проблеми.

PH21. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.

2. Місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою

Перелік освітніх компонент, знань та умінь, володіння якими необхідні аспіранту для успішного засвоєння освітньої компоненти:

Пререквізити:	
Основи фізики	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з основних розділів фізики (молекулярна фізика, динаміка, кінематика), знати закони механіки (робота, потужність, одиниці їх вимірювання), вміти переводити одиниці вимірювання властивостей з одних систем в інші.
Елементарна математика	Знати розділи математики (алгебра, елементи аналізу, геометрія, диференційне та інтегральне числення); вміти розв'язувати простіші математичні задачі
Основи загальної хімії	Знати періодичний закон і таблицю Д.І. Менделєєва, електронну будову атомів; Вміти скласти рівняння різних хімічних реакцій, урівнювати стехіометричні коефіцієнти, проводити розрахунки з їх використанням
Постреквізити:	
Наукова складова	Планування і виконання експериментальних досліджень з використанням сучасних методів та методик дослідження, критичний аналіз результатів досліджень.

3. Зміст освітньої компоненти

Тема 1. Основні поняття хімічної термодинаміки. В.С.Судавцова

Система, класифікація систем. Властивості (параметри) системи. Стани системи (стабільний, нестабільний, метастабільний). Процеси (рівноважний, нерівноважний, зворотній, незворотній). Термодинамічна рівновага. Рівняння стану. Теплоота і робота.

Тема 2. Перший закон термодинаміки. В.С.Судавцова

Внутрішня енергія. Формулювання і аналітичний вираз I закону термодинаміки. Застосування до різних процесів. Ентальпія. Основні закони термохімії. Закон Гесса. Формула Кірхгофа. Теплоємність твердих речовин за Ейнштейном і Дебаєм.

Тема 3. Другий і третій закони термодинаміки. В.С.Судавцова

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).

Тема 4. Термодинамічні потенціали та характеристичні функції. В.С.Судавцова

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.

Тема 5. Рівновага між фазами в однокомпонентній гетерогенній систем. М.В.Буланова

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.

Тема 6. Фазові діаграми однокомпонентних систем. М.В.Буланова

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.

Тема 7. Термодинаміка розчинів. В.С.Судавцова

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.

Тема 8. Двокомпонентна система. Двофазна рівновага. М.В.Буланова

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.

Тема 9. Двокомпонентна система. Трифазна рівновага. М.В.Буланова

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.

Тема 10. Трикомпонентна система. Двофазна рівновага. М.В.Буланова

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 проекції. Ізотермічні та політермічні розрізи. Проекції поверхонь ліквідусу і солідусу. Ізотерми. Діаграма стану з сідлоподібною 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.

Тема 11. Трикомпонентна система. Трифазні рівноваги евтектичного і перитектичного типів. М.В.Буланова

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.

Тема 12. Трикомпонентна система. Чотирифазні рівноваги. М.В.Буланова

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 обмежуючій подвійній системі утворюється конгруентна сполука. Випадок, коли в двох або всіх подвійних системах утворюються конгруентні сполуки. Триангуляція. Потрійна сполука

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці інституту, а також може бути надана в електронному вигляді. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні.

Базова література:

1. 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
2. Alan Prince. Alloy Phase Equilibria. 1966. On-line version.
3. Hugh Shercliff and Mike Ashby. Phase diagrams and phase transformations. 5th Edition, March 2009, Cambridge. www.teachingresources.grantadesign.com

4. В.Г.Кудін, В.А.Макара, В.С.Судавцова. Фазові рівноваги в сплавах. К.: Логос, 2010.
5. В.З.Туркевич. Хімічна термодинаміка та фазові рівноваги у системах з вуглецем і нітридом бору. Київ, 2001.
6. 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>.
7. M.Hillert. *Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations*. Second Edition // Cambridge University Press. – 2007.
8. David R. Gaskell, *Introduction to Metallurgical Thermodynamics* // Hemisphere Pub. Corp., McGraw-Hill, 2nd ed. 1981.
9. Alloy Phase Diagrams. ASM International. On-line version

Додаткова література:

10. Данілов В.І. Вибрані праці. Київ. Наукова думка. 1971.
11. Бялік О.М., Черненко В.С., Писаренко В.М., Москаленко Ю.Н.. *Металознавство*. Вид. ІВЦ "Політехніка", 2001, с. 41-47.
12. C. Suryanarayana *Mechanical alloying and milling* // *Progress in Materials Science* 46 (2001) 1-184.
13. 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.
14. M. Selleby, M. Hillert. Problems to be solved on the Thermo-Calc data bank system // Dept. Materials Science and Engineering, KTH, Stockholm, Sweden. Based on the textbook by Mats Hillert: *Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations* 2nd edition, Cambridge University Press, 2007.
15. R.E. Smallman, A.H.W. Ngan. *Modern Physical Metallurgy (Eight Edition)*.
16. A.K. Jena, M.C. Chaturvedi. *Phase transformations in materials*. Prentice Hall, New Jersey, 1992.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Передбачено комплексний підхід, що поєднує лекції та семінари, а також розгляд питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій застосовується ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені в Google Classroom. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої. Метою практичних занять є закріплення теоретичних знань, отриманих на лекціях та в процесі самостійної роботи з літературними джерелами в ході вивчення освітньої компоненти.

6. Самостійна робота

Самостійна робота включає повторення лекційного матеріалу, опрацювання рекомендованої літератури, що дозволяє розширити та поглибити знання з дисципліни, підготовку до практичних завдань та заліку.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Відвідування лекційних та семінарських занять, які можуть проводитись як он-лайн, так і офф-лайн, є обов'язковим. У випадку відсутності на занятті аспіранти зобов'язані повідомити викладача заздалегідь і надати документальне підтвердження

причини відсутності, якщо це можливо. На початку кожної лекції проводиться опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою та підвищення зацікавленості. Під час сигналу повітряної тривоги заняття негайно припиняється, а всі учасники навчального процесу повинні пройти в найближче укриття. Для завершення заняття організується додатковий час.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів. Заохочувальні бали можуть нараховуватись викладачем за активну участь у заняттях, виконання творчих робіт з освітньої компоненти або додаткового проходження он-лайн профільних курсів з отриманням відповідного сертифікату. Але їх сума не може перевищувати 25% від рейтингової шкали. Штрафні бали в рамках освітньої програми не передбачені.

Політика дедлайнів та перескладань. Дедлайни здачі завдань та контрольних робіт є обов'язковими. У разі поважних причин, аспіранти можуть звернутись до викладача для можливої зміни продовження термінів. Запити на продовження дедлайну повинні бути подані заздалегідь.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

В рамках навчальної дисципліни передбачено кілька видів контролю та систему рейтингування результатів навчання, а саме:

Поточний контроль: опитування під час лекцій та на семінарських заняттях.

Семестровий контроль: іспит.

Рейтингова система оцінювання формується з суми балів, набраних під час поточного та семестрового контролю. Рейтинг аспіранта R розраховується за 100 бальною шкалою та складається з балів, що він отримує протягом семестру (стартовий рейтинг) S та диференційованого заліку C . Додаткові бали D можна отримати за активну участь у заняттях, виконання творчих робіт з освітньої компоненти або додаткового проходження он-лайн профільних курсів з отриманням відповідного сертифікату. Таким чином, сумарний рейтинговий бал розраховується як

$$R=S + C + D$$

Стартовий рейтинг S складається з балів, що аспірант отримує за відвідування занять (1 бал), активну роботу на занятті (2 бали), правильну відповідь при поточному опитуванні (2 бали), виконання творчого завдання (5 балів). Максимальна сума балів, яку аспірант може набрати протягом семестру (стартовий рейтинг), складає 50 балів. Умовою допуску до заліку є кількість рейтингових балів не менше 30.

На заліку аспіранти виконують письмову тестову роботу, що складається з 50 питань. Кожне запитання (завдання) оцінюється в 1 бал. Умовою успішної здачі заліку є кількість отриманих за залікову роботу балів не менше 30.

Сумарний рейтинговий бал розраховується за формулою:

$$R=S + C + D,$$

де S – стартовий рейтинг;

C – залік;

D – додаткові бали.

Відповідність між кількістю балів, оцінкою за національною шкалою та шкалою ECTS наведена в таблиці.

Кількість балів

Шкала ECTS

Оцінка за національною шкалою

90-100	A	Відмінно
85-89	B	Добре
75-84	C	
65-74	D	Задовільно
60-64	E	
Менше 60	FX	Незадовільно
Не виконані умови допуску		Не допущено

9. Додаткова інформація з освітньої компоненти

Робочу програму освітньої компоненти (силабус):

Складено пров.н.с., д.х.н., проф. Судавцовою В.С.

пров.н.с., д.х.н., с.н.с. Булановою М.В.

Ухвалено Вченою радою Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича Національної академії наук України (протокол №10 від «06» серпня 2024 р.).