



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



Силабус (робоча програма) навчальної дисципліни

ФАЗИ І ФАЗОВІ ПЕРЕТВОРЕННЯ В ГЕТЕРОГЕННИХ СИСТЕМАХ
PHASES AND PHASE TRANSFORMATIONS IN HETEROGENEOUS
SYSTEMS

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	дисципліна вільного вибору
Форма навчання	денна (очна)
Рік підготовки, семестр	2курс навчання, осінній семестр
Обсяг дисципліни	3 кредити ECTS, 90 годин
Семестровий контроль/ контрольні заходи	залік
Розклад занять	лекція – раз на тиждень (32 години); практика/семінар/консультації – 1 раз на два тижні (16 годин); самостійна робота 42 год., у тому числі на виконання індивідуальних/домашніх завдань 20 год, залік – 1 год
Мова викладання	українська
Інформація про викладачів	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 багатокомпонентних гетерогенних систем, необхідних для становлення науковця-хіміка, що працює у галузі створення новітніх високотехнологічних матеріалів.

Предмет освітньої компоненти – характер і властивості фаз багатокомпонентних систем, механізми процесів при фазових перетвореннях, їх аналіз з принципів хімічної термодинаміки.

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 хімії та хімічного матеріалознавства.

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 фізичної 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:

- 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.

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.

РН18. Планувати, організовувати та координувати роботу дослідницької групи, вміти організовувати колективну роботу.

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

РН20. Використовувати набуті знання та компетенції з хімії для реалізації оригінального рішення, направлено на розв'язання конкретної науково-технічної проблеми.

РН21. 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:	
Фізико – хімічні основи розробки нових матеріалів та технологічних процесів	Для вивчення курсу аспіранти потребують базових знань зі спеціальних дисциплін (глибинні знання зі спеціальності) та знань з дисциплін, що розвивають загальнонаукові компетентності, які вивчають на першому та другому році навчання в аспірантурі.
Поверхневі явища та інженерія поверхні	
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. Поняття про фізико-хімічну взаємодію.

Основні поняття: компонент, фаза, система. Зв'язок між діаграмою стану і термодинамічними властивостями фаз. Фази на діаграмі стану (розплав, тверді розчини, проміжні фази). Класифікація твердих розчинів та умови їх утворення. Основні види проміжних фаз. Аморфізація – метастабільний стан системи та її передбачення, виходячи з діаграм стану.

Тема 2. Фазова стабільність та фазові перетворення

Стабільний, нестабільний та метастабільний стани. Фактори, що визначають стабільність фази. Зміна термодинамічних властивостей при фазових перетвореннях. Фазові перетворення першого і другого роду. Класифікація фазових перетворень, виходячи з умов утворення та росту нової фази.

Тема 3. Роль структурних дефектів при фазових перетвореннях

Границі розділу. Термодинаміка границь розділу. Границі тверде тіло-газ та тверде тіло-рідина. Нуль-вимірні, одно-вимірні, дво-вимірні та три-вимірні дефекти будови твердого тіла. Границі розділу у твердих тілах. Когерентні границі з напруженнями і без напружень, напівкогерентні границі з дислокаціями невідповідності, некогерентні границі.

Тема 4. Дифузія в кристалах

Відхилення від рівноваги. Елементарний акт дифузії. Точкові дефекти в кристалах: вакансія (дефект за Шотткі); міжвузольний атом; дефект за Френкелем; домішковий атом; атоми домішки, що відрізняються за валентністю від атомів кристала. Енергія точкового дефекту і ймовірність його утворення. Атомні процеси при фазових перетвореннях: флуктуації енергії, термодинаміка, кінетика, енергія активації. Атомні механізми дифузії: вакансійний; простий міжвузольний; міжвузольний з витісненням; дифузія по структурних дефектах. Дифузійний потік у однофазовій системі. Дифузійний потік у двофазовій двокомпонентній системі. Вихідна дифузія. Дифузія по дислокаціях і границях зерен. Співвідношення коефіцієнтів дифузії.

Тема 5. Кристалізація з розплаву

Подібність будови рідини і твердого тіла: непрямі свідчення, дифракція рентгенівських променів. Сучасні уявлення про будову рідини. Будова рідких сплавів. Гомогенне зародкоутворення. Термодинамічні умови утворення зародку при кристалізації чистого металу. Критичний розмір зародку. Переохолодження. Залежність числа зародків та швидкості їх росту від величини переохолодження. Гетерогенне зародкоутворення. Роль розчинних і нерозчинних домішок.

Тема 6. Механізм і кінетика росту кристалів. Форми росту кристалів.

Кінетика росту зародкових центрів нової фази. Форми росту кристалів. Нормальний і плоский ріст кристалів. Тангенціальний та нормальний ріст кристалів. Утворення дендритної структури. Еволюція дендритної структури під час кристалізації. Дендритний параметр. Шляхи зменшення розміру зерна при кристалізації.

Тема 7. Евтектична кристалізація

Дифузійний розподіл компонентів при евтектичній кристалізації. Роздільний і парний ріст евтектичних фаз. Морфологія евтектик.

Тема 8. Зародкоутворення у твердому стані

Гомофазні та гетерофазні флуктуації. Гомогенне зародження нової фази Флуктуація критичного розміру та критичний зародок. Роль пружної енергії при гомогенному зародженні. Швидкість гомогенного зародження.

Тема 9. Фазові перетворення у твердих тілах, які потребують дифузію на коротку і дальню відстань.

Поліморфне перетворення. Масивне перетворення. Реакція виділення. Евтектоїдне перетворення. Комірчасте перетворення (cellular decomposition). Снінодальний розпад.

Тема 10. Політермічні розрізи – термодинамічне узагальнення фазових перетворень в гетерогенній системі.

Приклади побудови політермічних розрізів.

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. Alan Prince. Alloy Phase Equilibria. 1966. On-line version.
2. Hugh Shercliff and Mike Ashby. Phase diagrams and phase transformations. 5th Edition, March 2009, Cambridge. www.teachingresources.grantadesign.com
3. 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>.
4. M.Hillert. Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations. Second Edition // Cambridge University Press. – 2007.
5. David R. Gaskell, *Introduction to Metallurgical Thermodynamics* // Hemisphere Pub. Corp., McGraw-Hill, 2nd ed. 1981.
6. A.K. Jena, M.C. Chaturvedi. Phase transformations in materials. Prentice Hall, New Jersey, 1992.
7. Мазур В.И., Мазур А.В. Введение в теорию сплавов. Учебное пособие. Д.: Лира ЛТД, 2009.

Додаткова література:

8. Данілов В.І. Вибрані праці. Київ. Наукова думка. 1971.
9. Бялік О.М., Черненко В.С., Писаренко В.М., Москаленко Ю.Н.. Металознавство. Вид. ІВЦ "Політехніка", 2001, с. 41-47.
10. Ю.Н.Таран, В.И.Мазур. Структура эвтектических сплавов. М.: Металлургия, 1978.
11. Н.К.Толочко, А. А. Андрушевич. Кластерная структура расплавов // Литье и металлургия. – 2013. – 4 (73). – С. 59 – 64.
12. 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.

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: залік.

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., 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.).