



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



Силабус (робоча програма) навчальної дисципліни

КІНЕТИКА І ТЕРМОДИНАМІКА НЕРІВНОВАЖНИХ ПРОЦЕСІВ KINETICS AND THERMODYNAMICS OF NONEQUILIBRIUM 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	Вибіркова
Форма навчання	денна (очна)
Рік підготовки, семестр	2 курс навчання, весняний семестр
Обсяг дисципліни	3 кредити ECTS, 90 годин
Семестровий контроль/ контрольні заходи	Залік
Розклад занять	<i>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</i>
Мова викладання	українська
Інформація про викладачів	Д.х.н., проф., пров.н.с. Судацова Валентина Савеліївна, 050 811 5326; sud.materials@ukr.net
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 і навички, необхідні для проведення наукових досліджень в рамках виконання дисертаційної роботи. Курс охоплює основи хімічної кінетики та термодинаміки нерівноважних процесів, необхідних для становлення науковця-хіміка, що працює у галузі створення новітніх високотехнологічних матеріалів.

Предмет освітньої компоненти - застосування хімічної кінетики та термодинаміки нерівноважних процесів для визначення швидкості перебігу хімічних і

фізичних процесів, визначення умов, що забезпечують високу ступінь виходу продуктів реакцій, 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.

ЗК08. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

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 напрямів 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:

- 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.

РН04. Визначати об'єкт і суб'єкт, предмет досліджень, використовуючи гносеологічні підходи до розв'язання наукових і практичних проблем.

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.

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.

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 складати 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. 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.

Тема 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

Тема 3. Закони і поняття нерівноважної термодинаміки

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. . Закони і поняття нерівноважної термодинаміки

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.

Тема 5. Принципи лінійної нерівноважної термодинаміки

Принципи лінійної нерівноважної термодинаміки. Принцип локальної рівноваги. Рівняння Онзагера руху макросистеми. Принцип Кюрі для ізотропних систем. Принцип симетрії кінетичних коефіцієнтів. Співвідношення Онзагера.

Тема 6. Термодинамічні процеси у відкритих нерівноважних системах.

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

Тема 7. Формалізм нелінійної термодинаміки

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 Онзагера для спряжених процесів в положенні далекому від стану термодинамічної рівноваги

Тема 8. Стохастична інтерпретація динамічних рівнянь

Стохастична інтерпретація динамічних рівнянь нелінійної нерівноважної термодинаміки. Варіаційні принципи нелінійної термодинаміки.

Тема 9. Дисипативні структури

Дисипативні структури у суттєво нерівноважних системах. Просторові, часові та просторово-часові дисипативні структури

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. Є.П. Ковальчук, О.В. Решетняк. Фізична хімія: Підручник. – Львів: Видавничий центр 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 термодинаміка. Ч. 1. Рівняння дифузії. К.: ВЦ Київський університет, 2003.
6. Булавін, Л. А., Гаврюшенко, Д. А., Сисоєв, В. М. Нерівноважна термодинаміка: Київ: Київський університет імені Тараса Шевченка, 2014. 31с.

Додаткова література:

1. Волчанський, О. В., Гур'євська, О. М., Подопрігора, 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

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: 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., проф. Судавцовою В.С.

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