



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	<i>13 Механічна інженерія</i>
Спеціальність	<i>132 Матеріалознавство</i>
Освітня програма	<i>Порошкова металургія та композиційні матеріали</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>денна (очна), он-лайн/офф-лайн</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс навчання, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>3 кредити ECTS, 90 годин</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>іспит</i>
Розклад занять	<i>лекція – раз на тиждень (20 годин); практика/семінар/консультації – 12 годин; самостійна робота 58 год., у тому числі на виконання індивідуальних/домашніх завдань 20 год, залік – 1 год</i>
Мова викладання	<i>українська</i>
Інформація про викладачів	<i>д-р хім. наук, проф., пров. наук. співр. Судавцова Валентина Савеліївна, 050 811 5326; sud.materials@ukr.net</i> <i>д-р хім. наук, старш. наук. співр., пров. наук. співр. Буланова Марина Вадимівна, 066 616 6172; mvbulanova2@gmail.com</i>
Розміщення курсу	<i>Google Classroom; доступ за запрошенням викладача</i>

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 багатоконпонентних гетерогенних систем, необхідних для становлення науковця, 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 матеріалознавства, проводити дослідно-інноваційну діяльність, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики.

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність до освоєння і системного аналізу через наукове сприйняття і критичне осмислення нових знань.

ЗК02. Здатність до критичного аналізу і креативного синтезу нових ідей.

ЗК03. Здатність до розв'язування складних завдань, розуміння відповідальності за результат роботи з урахуванням вимог до академічної та професійної доброчесності.

ЗК04. Здатність до оприлюднення наукових результатів перед академічною аудиторією та громадськістю як на національному, так і на міжнародному рівні.

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

ЗК06. Здатність оцінювати соціальну значимість результатів своєї діяльності, сприймати та використовувати в своїй роботі нові знання та технології, усвідомлювати принципи відкритої науки.

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

ЗК09. Здатність до самостійного освоєння нових технологій та методів дослідження.

Фахові компетентності:

ФК01. Здатність проводити інноваційну діяльність, що сприяє створенню нових знань у матеріалознавстві та суміжних міждисциплінарних галузях.

ФК02. Здатність застосовувати новітні підходи до аналізу інформації і застосування її для створення новітніх матеріалів та підвищення ефективності сучасних виробничих процесів.

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

ФК04. Здатність переосмислити наявне та створити нове цілісне знання та/або професійну практику і реалізувати проекти, включаючи власні дослідження, в сфері матеріалознавства та споріднених галузях.

ФК05. Спроможність спілкуватись в галузі матеріалознавства в діалоговому режимі в різномовному середовищі для ефективного публічного представлення і захисту отриманих наукових результатів, на вітчизняних та міжнародних наукових форумах, конференціях і семінарах.

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 і впровадження нових технологій і матеріалів з огляду на їх вплив на навколишнє середовище.

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

ФК09. Здатність до аналізу результатів сучасних досліджень в області матеріалознавства металевих, керамічних, композиційних та нано- матеріалів для вирішення наукових і практичних проблем і генерації нових знань.

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 технологічних факторів на властивості матеріалів.

РН02. Володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі матеріалознавства 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. Встановлювати закономірності управління складом, структурою та властивостями матеріалів різної природи та функціонального призначення на основі фізико-хімічних процесів у матеріалах, з метою створення матеріалів із заданими структурами та характеристиками.

РН05. Встановити закономірності та вивчити особливості поведінки матеріальних об'єктів шляхом використання фундаментальних принципів фізичного, математичного, фізико-хімічного та імітаційного моделювання, а також застосування методів теоретичного й експериментального аналізу структури та властивостей матеріалів.

РН09. Застосовувати у науковій та практичній діяльності провідні тенденції, ключові напрями та перспективи розробки нових матеріалів різної природи, основи сучасних технологій виготовлення конструкційних і функціональних матеріалів, «розумних» та біо-матеріалів, матеріалів спеціального (оборонного) призначення, з подовженим строком експлуатації та для відновлюваних джерел енергії.

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

РН18. Дотримуватись етичних норм, враховувати авторське право та норми академічної доброчесності при проведенні наукових досліджень, презентації їх результатів та у науково-педагогічній діяльності.

РН19. Знайти оригінальне рішення, направлене на розв'язання конкретної науково-технічної проблеми.

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:	
<i>Основи фізики</i>	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.
<i>Елементарна математика</i>	Знати розділи математики (алгебра, елементи аналізу, геометрія, диференційне та інтегральне числення); вміти розв'язувати простіші математичні задачі
<i>Основи загальної хімії</i>	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:	
<i>Наукова складова</i>	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.Судацова

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

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

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.Судацова

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.Судацова

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 рівноваги. 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 розшаруванням 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. Ізоконцентрата 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 сідловидною точкою. Вигляд просторової діаграми. Поверхні ліквідусу і солідусу та їх проекції. Ізотермічні та політермічні розрізи. Проекції поверхонь ліквідусу і солідусу. Ізотерми. Системи з розшаруванням 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.Судавацова. 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	
60-64	E	Задовільно
Менше 60	FX	Незадовільно
Не виконані умови допуску		Не допущено

9. Додаткова інформація з освітньої компоненти

Робочу програму освітньої компоненти (силабус):

Складено пров. наук. співр., д-р хім. наук, проф. Судацковою В.С.

пров. наук. співр., д-р хім. наук, старш. наук. співр. Булановою М.В.

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