



Термодинаміка матеріалів та кінетика процесів

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>третій освітньо-науковий (доктор філософії)</i>
Галузь знань	<i>13 Механічна інженерія</i>
Спеціальність	<i>132 Матеріалознавство</i>
Освітня програма	<i>Матеріалознавство</i>
Статус дисципліни	<i>Нормативна</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)/ заочна / дистанційна / змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>I курс, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>6 кредитів ECTS, 26 годин лекцій, 39 годин практичні заняття</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Іспит / Модульна контрольна робота</i>
Розклад занять	<i>Лекція -1 раз на тиждень, практичні – 3 рази на 2 тижні</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: <i>.д.ф.-м.н, професор, Зауличний Ярослав Васильович, mail:Zaulychnyy@ukr.net</i> Практичні заняття: <i>.д.ф.-м.н., професор, Зауличний Ярослав Васильович</i>
Розміщення курсу	<i>Google classroom</i>

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Вивчаючи дисципліну, *Термодинаміка матеріалів та кінетика процесів*, аспіранти узагальнюють власні знання з різних дисциплін матеріалознавства та одержують досвід аналізу фазових перетворень, кінетики зародження і росту фаз та процесів формування матеріалів з заданими властивостями. Також аспіранти навчаються використовувати отримані знання для вибору термодинамічних умов для розробки новітніх технологічних процесів синтезу матеріалів та з'ясування фізико-хімічної природи отриманих нових властивостей.

Метою викладання навчальної дисципліни є формування у аспіранти здатностей:

- *Здатність проводити теоретичні й експериментальні дослідження, математичне й комп'ютерне моделювання матеріалознавчих задач.*
- *Здатність аналізувати стан проблеми в галузі матеріалознавства, ідентифікувати шляхи вирішення та синтезувати нове знання на основі власного досвіду розв'язання проблеми.*
- *Здатність адаптувати і узагальнювати результати сучасних досліджень структури та властивостей матеріалів для вирішення наукових і практичних проблем, модернізації, конструювання та створення нових матеріалів, компонентів та процесів.*
- *Здатність на основі фундаментальних та спеціальних знань проектувати та створювати нові матеріали заданого функціонального призначення.*

а також розвивати програмні, загальні та фахові компетентності, зокрема:

Програмні компетентності: Здатність проводити критичний аналіз, оцінку і синтез нових та складних ідей;

Після засвоєння навчальної дисципліни аспірант повинен знати:

- термодинамічні принципи матеріалознавства та закономірності кінетики процесів в матеріалах .
- закономірності керування складом, структурою та властивостями матеріалів різної природи та функціонального призначення
- фундаментальні принципи фізичного, математичного, фізико-хімічного та імітаційного моделювання в матеріалознавстві
- теоретичні засади створення нових матеріалів заданого функціонального призначення: композиційних, наноструктурованих

аспірант повинен уміти.:

- Застосовувати знання наукових принципів матеріалознавства для модернізації та створення нових матеріалів та процесів.

2. пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Дисципліна викладається в першому семестрі підготовки за освітньо-науковими програмами підготовки докторів філософії. Для успішного засвоєння дисципліни, аспірант повинен володіти набором компетентностей магістерського рівня, зокрема:

- здатності до системного мислення, аналізу та синтезу
- здатності виявляти, ставити та вирішувати проблеми
- здатності генерувати нові ідеї та реалізовувати їх у вигляді обґрунтованих інноваційних рішень
- здатності використовувати новітні інформаційні технології
- здатності до подальшого автономного та самостійного навчання на основі новітніх науково-технічних досягнень

Дисципліна забезпечує розширення наукового кругозору в галузі матеріалознавства та інженерії матеріалів чим формує заключний набір компетенцій та інтегральну компетенцію. Результати вивчення дисципліни можуть бути використані при виконанні рНd-дисертації під час планування експериментів та обґрунтуванні і оцінці наукових результатів.

3. Зміст навчальної дисципліни

Дисципліна – “термодинаміка матеріалів та кінетика процесів” містить один змістовний модуль: “термодинаміка матеріалів та кінетика процесів”

Розділ 1. Основи термодинаміки конденсованого стану.

Вступ. Закони термодинаміки і статистичний зміст функцій стану. Рівняння стану.

Термодинамічні параметри, потенціали та їх основні співвідношення.

Розділ 2. Термодинамічні умови та діаграми стану фазових рівноваг

Умови рівноваги в гетерогенній системі. Фазовий простір та правило фаз Гіббса

Діаграми фазових рівноваг в одно- та двокомпонентних системах. Методи побудови діаграм станів.

Розділ 3. Аналіз діаграм фазових рівноваг в двокомпонентних системах Діаграми станів з необмеженою і обмеженою розчинністю компонентів в твердих і рідких фазах з евтектичною та перитектичною рівновагою фаз.

Діаграми станів при поліморфізмі компонентів з евтектоїдною та перитектоїдною рівновагою фаз.

Діаграми станів з полімор-фізмом обох компонент, рівновагою евтектичного типу і відсутністю розчинності в твердих фазах та з екстектичною рівновагою фаз. Фазові рівноваги в наносистемах.

Розділ 4. Аналіз кінетики необоротних процесів фазових переходів на основі діаграм фазових рівноваг

Аналіз фазових переходів в реальних системах за принципами термодинаміки незворотних процесів. Кристалізація твердих розчинів. Дендритна ліквідація.

Евтектична кристалізація і будова евтектичних сплавів. Вплив термокінетичних параметрів на характеристики евтектичного зерна.

Кінетика росту фаз при перитектичному і екстектичному перетвореннях.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література

1. Палехін В. П. Курс фізики : підручник - Частина 2. МОЛЕКУЛЯРНА ФІЗИКА І ТЕРМОДИНАМІКА . – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2013. – 516 с.
2. О.Й.Соколовський, С.Ф.Лягушин, С.О.Соколовський. Посібник із термодинаміки та статистичної фізики - Д.: РВВ ДНУ, 2005. - 40 с.
3. П. С. Харлашин, Т. М. Чаудрі, М. Я. Меджибожський. Основи термодинаміки і кінетики сучасних сталеплавильних процесів [Текст] : підручник для студентів вузів / П. С. Харлашин, Т. М. Чаудрі, М. Я. Меджибожський ; ПДТУ. Каф. металургії сталі ім. І.Г.Казанцева. - Маріуполь : [б. и.], 2009. - 339 с.
4. В.Ю. Ольшанецький, Ю.І. Кононенко. Конспект лекцій з дисципліни "Термодинаміка і кінетика фазових перетворень" для студентів спеціальності 132 «Матеріалознавство» частина II – Запоріжжя: ЗНТУ. 2018. - 94 с.
5. Мазур В.И., Мазур А.В. Введение в теорию сплавов. -Д.: Лири ЛТД, 2009. -264 с.
6. Бунин К.П., Баранов А.А., Таран Ю.Н. Анализ фазовых равновесий и кристаллизации металлических сплавов (учебное пособие).- Днепропетровск; Металлургический институт,- 1973. -133 с.
7. Мазур В.И., Таран Ю.Н. Фазовые равновесия и фазовые превращения. Киев: УМК ВО.- 1988.- 88 с
8. Shibata H., Aral Y., Suzuki M., Emi T. Kinetics of peritectic transformation in Fe-C.//MMT, 31B.- 2000.- P. 981- 991. 8.
9. Marquis E.A. Seidman D.N. Coarsening kinetics of nanoscale Al₃Sc precipitates in an Al-Mg-Sc alloy.// Acta Met.- 53, 2005. - P. 259-4268.

Додаткова література

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. -М.: Наука, 1976. -503 с.
2. Ансельм А.Н. Основы статистической физики и термодинамики. . -М.: Наука, 1973. -424 с.
3. Румер Ю.Б., Ривкин М.Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. . -М.: Наука, 1972. -400 с.
10. Млодзеевский А.Б. Геометрическая термодинамика. М.; Изд. МГУ- 1956,- 92 с.
11. Витторф Н.М. Теория сплавов в применении к металлическим системам.- СПб: Изд. Эрлих.- 1909.- 433 с.
12. Глазов В.М., Павлова Л.М. Химическая термодинамика и фазовые равновесия. - М.; Металлургия.- 1981,- 336 с.
13. Курц В., Зам П.Р. Направленная кристаллизация втектических материалов.- М.: Металлургия.- 1980. - 272 с.
14. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей.- Л,- Наука. -1975.- 592 с.

15. Ладьянов В.И. Структурные особенности и процессы завердевания эвтектических аморфообразующих систем.//Научные труды межд. научн, конф. EUTECTICA VII. Теория и практика металлургии.- №4-5.- 2006.- с.99 - 103.

Перераховані книги є основоположними як в тематиці навчальної дисципліни у цілому, так і для розробки і дослідження нових матеріалів, зокрема. Електронні версії книг доступні в інтернеті.

Рекомендується ознайомитись зі змістом вказаних базових та додаткових джерел, більш глибоко опрацювати рекомендовані викладачем розділи, що відповідають тематиці лекцій та практичних занять. Для окремих розділів доцільно створити електронний конспект.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Зміст лекційних занять

Лекція 1. Вступ. I і II закони термодинаміки. Узагальнені координати системи. Фазові точки і лінії. Фазовий простір. Теорема Ліувілля. Фізичний та статистичний зміст ентропії, внутрішньої і вільної енергії енергії. Рівняння стану. (Література: [1],[2])

Лекція 2. Термодинамічні параметри: температура, тиск, об'єм та потенціали (теплова функція, вільні енергії Гельмгольца та Гіббса) і їх основні співвідношення. (Література: [2], [3], [12])

Лекція 3. Хімічний потенціал атомів компонентів і умови рівноваги в гетерогенній системі. Фазовий простір та правило фаз Гіббса. [3], [4].

Лекція 4. Діаграми фазових рівноваг в одно- та двокомпонентних системах. Методи побудови діаграм станів. (Література: [4], [5]).

Лекція 5. Концентраційна залежність вільної енергії та діаграми станів з необмеженою і обмеженою розчинністю компонентів в твердих і рідких фазах з евтектичною рівновагою фаз. (Література: [4], [6], [9]).

Лекція 6. Діаграми станів з обмеженою розчинністю компонентів в твердих і рідких фазах з перитектичною рівновагою фаз та з поліморфізмом однокомпонентного кристалу. (Література: [4], [6]).

Лекція 7. Аналіз двокомпонентних діаграм станів при поліморфізмі компонентів з евтектоїдною та перитектоїдною рівновагою фаз. (Література: [4], [6]).

Лекція 8. Діаграми станів з поліморфізмом обох компонент, рівновагою евтектичного типу і відсутністю розчинності в твердих фазах та з екстектичною рівновагою фаз. Фазові рівноваги в наносистемах. (Література: [4], [8]).

Лекція 9. Фазові рівноваги в наносистемах. Аналіз фазових переходів в реальних системах за принципами термодинаміки незворотних процесів (Література: [4], [8]).

Лекція 10. Кристалізація твердих розчинів. Дендридна ліквіація (Література: [4], [13]).

Лекція 11. Евтектична кристалізація. Вплив термодинамічних параметрів на характеристики евтектичного зерна. (Література: [4], [14]).

Лекція 12. Кінетика росту фаз при перитектичному перетворенні. (Література: [4], [7]).

Лекція 13. Кінетика росту фаз при екстектичному перетворенні. (Література: [4], [7], [11]).

Перелік тем практичних занять.

1. Узагальнені координати (УзК) системи. Фазові точки і лінії. Фазовий простір. Доведення теореми Ліувілля про нестискуваність фазового простору. Визначення імовірності знаходження УзК випадкової системи в елементарному об'ємі фазового простору. (2 години)
2. Канонічний розподіл. Визначення імовірності того, що енергія системи, координати якої належать об'єму $d\Gamma$, знаходиться в надвузькому інтервалі енергій в околі $\bar{\epsilon}_{\text{середнє}}$. (2 години).

3. *Визначення ентропії через кількість станів системи, координати яких достовірно потрапляли в об'єм $d\Gamma$ з енергіями в околі $\mathcal{E}_{\text{середнє}}$, котра є мірою розупорядкування системи. (2 години).*
4. *Виявлення залежності вільної енергії від середньої енергії, ентропії та температури системи і статистична інтерпретація її фізичного змісту (2 години).*
5. *З'ясування фізичного змісту термодинамічних параметрів: температури, тиску, об'єму та термодинамічних потенціалів (теплова функція, вільні енергії Гельмгольца та Гіббса) і їх основних співвідношень. (2 години).*
6. *Визначення умови фазових рівноваг в гетерогенних, в тому числі в одно- та двокомпонентних системах. (2 години).*
7. *Визначення умови фазових рівноваг в гетерогенних, в тому числі в одно- та двокомпонентних системах. (2 години).*
8. *Побудова діаграм стану методом диференціальної скануючої калориметрії стрибків електропровідності. (2 години).*
9. *Аналіз концентраційної залежності вільної енергії та діаграми станів з необмеженою розчинністю компонентів в твердих і рідких фазах. (2 години).*
10. *Аналіз концентраційної залежності вільної енергії та діаграми станів з обмеженою розчинністю компонентів в твердих і рідких фазах. (2 години).*
11. *Аналіз діаграм станів з евтектичною рівновагою фаз. (2 години).*
12. *Аналіз діаграм станів з перитектичною рівновагою фаз. Самостійна робота студента/аспіранта. (2 години).*
13. *Аналіз діаграм станів з поліморфізмом компонента в одно- і двокомпонентних системах. (2 години).*
14. *Аналіз діаграм станів з поліморфізмом обох компонент, рівновагою евтектичного типу і відсутністю розчинності в твердих фазах та з екстектичною рівновагою фаз. (2 години).*
15. *Аналіз фазових рівноваг в наносистемах. Аналіз фазових переходів в реальних системах за принципами термодинаміки незворотних процесів. (2 години).*
16. *З'ясування природи і механізмів кристалізації твердих розчинів, дендридної ліквідації. (2 години).*
17. *Вивчення процесів евтектичної кристалізації і впливу термо-кінетичних параметрів на характеристики евтектичного зерна. (2 години).*
18. *Аналіз кінетики росту фаз при перитектичному перетворенні. (2 години).*
19. *Аналіз кінетики росту фаз при перитектичному перетворенні. (2 години).*
20. *Модульна контрольна (1 година).*

Самостійна робота аспірантів (загальна тривалість 115 годин) з дисципліни полягає в

- *самостійному опрацюванні літературних джерел для розширення розуміння лекційних тем, для фокусування розглянутих методів аналізу взаємного зв'язку властивостей матеріалів на власні наукові дослідження, що відповідають напрямку дисертації доктора філософії – в розрахунку 2 години на лекційне заняття $13 \times 1 = 13$ годин;*
- *при підготовці до практичних занять – в розрахунку 1,5 години на 1 годину практичного заняття $38 \times 1,5 = 57$ годин;*
- *при підготовці до модульної контрольної 15 годин;*
- *підготовці до підсумкової атестації – іспиту (30 годин).*

Політика та контроль

6. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, які ставляться перед студентом:

- *Пропущене без поважної причини лекційне заняття студент повинен відпрацювати шляхом написання конспекту-реферату об'ємом 8-10 тис. знаків, не враховуючи рисунків та таблиць;*
- *Завдання пропущеного практичного заняття аспірант повинен самостійно виконати в час, узгоджений з викладачем і представити в письмовій формі проведений аналіз змісту*

термодинамічних функцій, фазових діаграм, кінетичних процесів фазових переходів. Якщо пропуск відбувся без поважної причини – з загальної оцінки за практичне заняття знімається 10% за кожні дві години пропуску.

- Під час усіх видів аудиторних занять забороняється використання мобільних телефонів у звуковому режимі, дозволяється обмежене використання месенджерів у беззвучному режимі. Під час практичних занять дозволяється застосування персональних комп'ютерів для пошуку інформації, побудови фазових діаграм за заданими термодинамічними параметрами, використання власних термодинамічних параметрів, отриманих в результаті проведених досліджень, тощо.
- Результати виконаних практичних робіт оформлюються у письмовому вигляді (звіті) з застосуванням текстового редактора. Звіт супроводжується виведенням термодинамічних співвідношень параметрів і функцій, графіками залежностей, описами діаграм та кінетичних процесів фазових перетворень, які підтверджують виконання завдань. За дистанційної чи змішаної форми навчання звіт оформлюється під час google meet або зoot конференцій, після чого надається доступ для перевірки викладачу. За звичайної аудиторної форми навчання звіт виконується письмово або в будь-якому текстовому редакторі і на перевірку надається у виконаному вигляді. Безпосередній захист відбувається у формі співбесіди, запитань-відповідей.
- Заохочувальні бали можуть бути призначені за особливі успіхи у навчанні – переважно використання для аналізу фазових діаграм досліджуваних матеріалів, термодинамічних даних і кінетичних параметрів з власних досліджень за темою дисертаційних робіт. Сумарна кількість заохочувальних балів може складати від 1 до 10 балів.
- Політикою дедлайнів передбачається необхідність своєчасного виконання завдань. Конспект-реферат за пропущену лекцію має бути виконаний і поданий на перевірку не пізніше 2-х тижнів з часу пропущеної лекції. Звіти з практичних занять виконуються і подаються на перевірку не пізніше 2-х тижнів з моменту завершення. Усі письмові документи мають бути захищені до закінчення теоретичного навчання в семестрі.
- Усі учасники освітнього процесу: викладачі і рНд-студенти в процесі роботи вивчення дисципліни мають керуватись принципами академічної доброчесності, передбаченими «Кодексом честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут»» <https://kpi.ua/code>.

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

Поточний контроль:

- Експрес-опитування або тестування на лекційних заняттях – максимум 1 бал, всього 13 балів. Бали за опитування на пропущених лекціях компенсуються виконанням конспекту-реферату (див. п.6)
- Захист звітів з практичних робіт всього максимально 47 балів:
 - o Практичні заняття 1 – 10 максимум 2 бали
 - o Практичні заняття 11 – 19 максимум 3 бали
- Модульна контрольна робота в вигляді тестових завдань проводиться на 17 тижні. Максимальна оцінка 10 балів за тест.

Календарний контроль: провадиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.

Семестровий контроль: екзамен

Умови допуску до семестрового контролю: семестровий рейтинг більше 60 балів за умови виконання усіх практичних робіт та кількості балів за видами:

- Лекційні заняття не менше 5
- Модульна контрольна робота не менше 4
- Практичні заняття не менше 26 балів.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

<i>Кількість балів</i>	<i>Оцінка</i>
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

**Складено професор каф. Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії,
д.ф.-м.н., професор, Зауличний Ярослав Васильович**

Ухвалено

кафедрою ВТМ та ПМ (протокол № _3_ від _11 вересня 2020 р. __)

Погоджено Методичною комісією ІМЗ ім. Є.О.Патона (протокол № 1 від 23 вересня 2020 р.)