



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>2 рік, 3 семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>6 кредитів</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Екзамен / МКР</i>
Розклад занять	<i>http://rozklad.kpi.ua/</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор: .д.ф.-м.н., професор, Зауличний Ярослав Васильович, mail:Zaulychnyy@ukr.net Практичні заняття: .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

В дисципліні “Термодинаміка матеріалів та кінетика процесів” узагальнюються знання з різних дисциплін матеріалознавства та проводиться аналіз фазових перетворень, кінетики зародження і росту фаз та процесів формування матеріалів із заданими властивостями. Також розглядається принцип вибору термодинамічних умов для розробки новітніх технологічних процесів синтезу матеріалів та фізико-хімічної природа отриманих нових властивостей.

Метою навчальної дисципліни є формування у здобувачів 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 здобувач повинен знати:

- *Термомодинамічні 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.*

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 третьому семестрі підготовки за освітньо-науковими програмами підготовки докторів філософії. Для успішного засвоєння дисципліни, здобувач 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 компетентності та інтегральну компетентність. Результати вивчення дисципліни можуть бути використані під час виконання PhD-дисертації для планування експериментів та обґрунтуванні і оцінці наукових результатів.

3. Зміст навчальної дисципліни

Розділ 1. Основи термодинаміки конденсованого стану.

Тема 1. 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 за поліморфізму компонентів з евтектоїдною та перитектоїдною рівновагою

фаз.

Діаграми станів з поліморфізмом 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. Дендридна ліквідація.

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

Кінетика росту фаз за перитектичного і екстектичного перетворення.

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.: Лира 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

10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. -М.: Наука, 1976. -503 с.
11. Ансельм А.Н. Основы статистической физики и термодинамики. . -М.: Наука, 1973. -424 с.
12. 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 завершенания эвтектических аморфообразующих систем // Научные труды межд. научн. конф. EUTECTICA VII. Теория и практика металлургии.- №4-5.- 2006.- с.99 - 103.

Наведені джерела є основоположними як в тематиці навчальної дисципліни у цілому, так і для розробки і дослідження нових матеріалів, зокрема. Електронні версії книг доступні в мережі інтернет.

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)

5.1. Лекційні заняття

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.

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

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

Лекція 4. Діаграми фазових рівноваг в одно- та двокомпонентних системах. Методи побудови діаграм станів.

Лекція 5. Концентраційна залежність вільної енергії та діаграми станів з необмеженою і обмеженою розчинністю компонентів в твердих і рідких фазах з евтектичною рівновагою фаз.

Лекція 6. Діаграми станів з обмеженою розчинністю компонентів в твердих і рідких фазах з перитектичною рівновагою фаз та з поліморфізмом однокомпонентного кристалу.

Лекція 7. Аналіз двокомпонентних діаграм станів за поліморфізму компонентів з евтектоїдною та перитектоїдною рівновагою фаз.

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.

Лекція 9. Фазові рівноваги в наносистемах. Аналіз фазових переходів в реальних системах за принципами термодинаміки незворотних процесів

Лекція 10. Кристалізація твердих розчинів. Дендритна ліквідація

Лекція 11. Евтектична кристалізація. Вплив термокінетичних параметрів на характеристики евтектичного зерна.

Лекція 12. Кінетика росту фаз за перитектичного перетворення.

Лекція 13. Кінетика росту фаз за екстектичного перетворення.

5.2. Практичні заняття

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 ΔG , знаходиться в надвузькому інтервалі енергій в околі $\bar{\epsilon}$ середнє. (2 години).

3. Визначення ентропії через кількість станів системи, координати яких достовірно потрапляли в об'єм ΔG , з енергіями в околі ϵ 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. (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, дендритної ліквідації. (2 години).
17. Вивчення процесів евтектичної кристалізації і впливу термо-кінетичних параметрів на характеристики евтектичного зерна. (2 години).
18. Аналіз кінетики росту фаз за перитектичного перетворення. (2 години).
19. Аналіз кінетики росту фаз за перитектичного перетворення. (1 години).
20. **Модульна контрольна робота** (2 години).

6. Самостійна робота студента/аспіранта

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 – з розрахунку 1 година на лекційне заняття $13 \times 1 = 13$ годин;
- підготовці до практичних занять – в розрахунку 1,5 години на 1 годину практичного заняття $38 \times 1,5 = 57$ годин;
- підготовці до модульної контрольної роботи 15 годин;
- підготовці до семестрової атестації – екзамену 30 годин.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, які ставляться перед здобувачем:

- Завдання пропущеного практичного заняття здобувач повинен самостійно виконати в час, узгоджений з викладачем і представити в письмовій формі проведений аналіз змісту термодинамічних функцій, фазових діаграм, кінетичних процесів фазових переходів.
- 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) із застосуванням текстового редактора. Звіт включає 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 зоом конференцій, після чого надається доступ для перевірки викладачу. За аудиторної форми навчання звіт виконується письмово або в будь-якому текстовому редакторі і на перевірку надається у паперовому 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 здобувачі в процесі вивчення дисципліни мають керуватись принципами академічної доброчесності, передбаченими «Кодексом честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут»» <https://kpi.ua/code>.

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

8.1. Види контролю

Поточний контроль:

- Захист звітів з практичних робіт
- Поточний контроль: експрес-контроль на лекціях, тестування
- Модульна контрольна робота в вигляді тестових завдань проводиться на 17 тижні.
- Семестровий контроль: екзамен.

Рейтингова оцінка з дисципліни складається із двох складових:

- Стартової, що складає 50 балів – оцінювання результатів виконання 19 лабораторних робіт, МКР і 3 тем для самостійного опрацювання;
- Екзаменаційної, що складає 50 балів – призначена для оцінювання окремих запитань (завдань) на екзамені.

Умовою допуску до екзамену є зарахування усіх практичних робіт, МКР і завдань із самостійної роботи студента. Кожна практична робота оцінюється у 2 бали; кожна з 3 тем СРС – 2 бали; МКР – 6 балів.

$$O_{\text{стартова}} = \sum O_{\text{ПР}} + O_{\text{МКР}} + \sum O_{\text{СРС}} = 19 \cdot 2 + 6 + 3 \cdot 2 = 50 \text{ балів.}$$

Стартовий рейтинг має скласти не менше 30 балів (60 % тах $O_{\text{стартова}}$).

Здобувачі можуть отримати додатково 5 балів за активну роботу на заняттях.

Здобувачі, що набрали упродовж семестру не менше 30 балів допускаються до складання екзамену.

Екзамен проводиться у формі усного опитування. На підготовку запитань білета відводиться 1 астрономічна година.

Кожний білет складається із 2 теоретичних запитань, які наведені у розділі «Лекційні заняття».

Максимальна оцінка за правильну відповідь на кожне теоретичне питання складає 25 балів.

Сумарна максимальна оцінка складає 50 балів, відповідно:

- «відмінно», повна відповідь, не менше 90% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до рівня «умінь», (повне, безпомилкове розв'язування завдання);
- «добре», достатньо повна відповідь, не менше 75% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до рівня «умінь або є незначні неточності (повне розв'язування завдання з незначними неточностями);
- «задовільно», неповна відповідь, не менше 60% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до «стереотипного» рівня та деякі помилки (завдання виконане з певними недоліками);
- «незадовільно», відповідь не відповідає умовам до «задовільно».

Оцінка за відповідь знижується по кожному з питань – за принципові помилки у відповіді на 15-10 балів, за неповну відповідь на 10-5 балів, за неправильне використання термінів на 5 балів. Позитивною вважається екзаменаційна оцінка, що складає не менше 30 балів (60 % тах $O_{\text{екзаменаційна}}$).

Після оцінювання відповідей здобувача на екзамені (виконання екзаменаційної контрольної роботи) викладач підсумовує стартові бали та бали за екзамен, зводить до рейтингової оцінки та переводить до оцінок за університетською шкалою.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
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

8.2. Критерії нарахування балів.

Модульна контрольна робота.

Робота складається із 30 питань, відповіді на які максимально оцінюється у 6 балів, відповідно:

- 6 бали – повна відповідь, не менше 90% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до рівня «умінь», (повне, безпомилкове розв'язування завдання);
 - 4 бали – достатньо повна відповідь, не менше 75% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до рівня «умінь або є незначні неточності (повне розв'язування завдання з незначними неточностями);
 - 2 бал – неповна відповідь, не менше 60% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до «стереотипного» рівня та деякі помилки (завдання виконане з певними недоліками);
- 0 балів – відповідь не відповідає умовам до «задовільно».

Практичні роботи.

Виконане завдання практичної роботи максимально оцінюється у 2 бали, відповідно:

- 2 бали – повна відповідь, не менше 90% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до рівня «умінь», (повне, безпомилкове розв'язування завдання);
- 1,5 бали – достатньо повна відповідь, не менше 75% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до рівня «умінь або є незначні неточності (повне розв'язування завдання з незначними неточностями);
- 1 бал – неповна відповідь, не менше 60% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до «стереотипного» рівня та деякі помилки (завдання виконане з певними недоліками);
- 0 балів – відповідь не відповідає умовам до «задовільно».

Самостійна робота студента.

Теми, що виносяться для самостійного опрацювання оцінюються у 2 бали кожна. Повнота розкриття теми впливає на кількість нарахованих балів.

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Кредитний модуль повністю забезпечений навчально-методичною літературою, перелік якої студенти отримують на початку курсу. Також на початку семестру надається силабус, рейтингова система оцінки знань та перелік завдань для самостійної роботи, контрольні питання на поточний та підсумковий контроль. Всі необхідні методичні матеріали для вивчення дисципліни розміщені у системі "Електронний кампус".

Для покращення сприйняття матеріалу, бажано демонструвати упродовж аудиторних занять максимальну кількість прикладів практичного прояву явищ, що обговорюються, тощо.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено:

професор, д. ф.-м. н., професор, Зауличний Ярослав Васильович

Ухвалено кафедрою високотемпературних матеріалів та порошкової металургії (протокол № 3 від 11 вересня 2020 р.)

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