

Робочий план
з вивчення дисципліни «Термодинаміка матеріалів» для аспірантів,
спеціальність 132 «Матеріалознавство»

Інститут надтвердих матеріалів ім. В. М. Бакуля НАН України.

ЗАТВЕРДЖУЮ
Директор Інституту надтвердих
матеріалів ім. В. М. Бакуля НАН
України,
академік НАН України

В.З. Туркевич
« 15 » грудня 2016 р.



1. Викладачі

Туркевич Володимир Зіновійович, академік НАН України, д.х.н., професор.

Контактний телефон: (044) 430-11-26; vturk@ism.kiev.ua

Наукові інтереси: Вивчення фізико-хімічних аспектів синтезу надтвердих матеріалів при високих тисках і температурах, дослідження термодинаміки та кінетики спонтанної кристалізації алмазу і кубічного нітриду бору при високих тисках і температурах, теплофізичне приладобудування.

Логінова Ольга Борисівна, д.х.н., старший науковий співробітник.

Контактний телефон: (044)468-86-41; Loginova@nas.gov.ua

Наукові інтереси: Дослідження процесів отримання надтвердих матеріалів при високих тисках; дослідження електрофізичних властивостей надтвердих матеріалів; вивчення структури і фазового складу надтвердих матеріалів методами рентгенівської дифрактометрії; дослідження теплофізичних процесів.

2. Назва, код дисципліни та кількість кредитів.

«Термодинаміка матеріалів» спеціальність 132 «Матеріалознавство», код: 132, кількість кредитів – 5.

3. Пререквізити навчальної дисципліни: знати основні розділи фізики: молекулярна фізика, динаміка, кінематика; закони механіки: робота, потужність, одиниці вимірювання потужності, роботи, зв'язок закономірностей в різних системах; розділи математики: алгебра, елементи аналізу, геометрія, диференціальне й інтегральне числення, логарифмування; розділи загальної і неорганічної хімії: екзотермічні і ендотермічні хімічні процеси, теплові ефекти, реакції, швидкості хімічних реакцій, хімічна рівновага, дисоціація і асоціація; здатність продемонструвати розуміння ширшого міждисциплінарного інженерного контексту і його основних принципів; здатність демонструвати розуміння питань використання технічної літератури та інших джерел інформації в теплоенергетичній галузі; основи

поняття термодинамічного підходу до створення металевих, керамічних, полімерних, композиційних та надтвердих матеріалів для інструментів та деталей техніки; особливості побудови діаграм стану сполук і композитів; сучасні підходи до вивчення термодинамічних показників матеріалів; знати основні етапи науково-дослідного процесу та особливостей його перебігу й організації; розуміти особливості організації та планування одноосібної та колективної наукової діяльності.

Постреквізити: в результаті вивчення дисципліни будуть отримані знання, що допоможуть точно сформулювати проблему, мету і завдання дослідження з урахуванням конкретних фізичних умов; правильно інтерпретувати отриману інформацію для прийняття оптимальних в даних умовах рішень; пов'язувати вирішення виникаючих на практиці завдань спеціальності з фізичною природою даних фізичних явищ і знаходити фізично правильні рішення; бути компетентним в постановці завдань і фізичної інтерпретації законів і явищ; демонструвати навички роботи в науково-дослідному колективі; аналізувати роботу теплотехнічного обладнання, при необхідності розробляти і обґрунтовувати рішення щодо його вдосконалення; застосовувати основні методи фізико-математичного аналізу для вирішення природничо-наукових завдань; правила експлуатації основних приладів і обладнання; методи обробки й інтерпретації результатів експерименту; вміння використовувати методи математичного моделювання фізичних і хімічних процесів і явищ в науковій практиці; аналізувати і вибирати термодинамічні показники матеріалів, будувати динарами стану сполук і композитів; читати та оформляти технічну документацію; використовувати отримані знання при виконанні дослідження та захисті її результатів у вигляді дисертації на здобуття наукового ступеню доктора філософії.

4. Вимоги навчальної дисципліни.

Вивчення курсу «Термодинаміка матеріалів» являється обов'язковим. Об'єм навчального навантаження складає 5 кредитів із них 60 годин – лекції, 90 години – самостійна робота. Вивчення наукової дисципліни вимагає обов'язкове відвідування аудиторних занять, активну участь в обговоренні питань, якісне і своєчасне виконання завдань самостійної роботи, а також участь у всіх видах контролю.

5. Характеристика дисципліни.

Завдання учбової дисципліни. Освоїти сучасні поняття та уявлення щодо термодинамічних основ створення сучасних інструментальних та конструкційних матеріалів.

Мета викладання дисципліни – опанування загальними уявленнями щодо термодинаміки інструментальних та конструкційних матеріалів, новітніми знаннями щодо термодинамічних основ створення сучасних надтвердих матеріалів.

План викладання дисципліни:

Назва змістовних модулів і тем	Кількість годин		
	усього	у тому числі	
		аудиторні	само-

			стійна робота
Модуль 1			
Змістовний модуль 1. Капілярні явища в матеріалознавстві			
Тема 1. Коротка історія виникнення термодинаміки як феноменологічної науки. Завдання термодинаміки. Технічна і хімічна термодинаміка (Логінова О.Б.)	5	2	3
Тема 2. Основні відомості про поверхневі, міжфазні, контактні явища (Логінова О.Б.): – класифікація дисперсних системи; – вклад Леонардо да Вінчі, рівняння капілярності Журена; – силове визначення поверхневого натягу, рівняння Лапласа, капілярний тиск; – рівняння Юнга, адгезія та когезія; – крайовий кут змочування, змочування – універсальний метод діагностики поверхні.	5	2	3
Тема 3. Закони термодинаміки (Логінова О.Б.): – перший закон термодинаміки, теплота, робота, внутрішня енергія, самочинні та несамочинні процеси. – другий закон термодинаміки, ентропія; – закон зростання ентропії в ізольованій системі; – рівняння Больцмана, теорема Нернста, ентропія як міра хаосу і неупорядкованості системи; – межі застосування законів термодинаміки.	5	2	3
Тема 4. Теорія капілярності Гіббса (Логінова О.Б.): – поверхня розділу і надлишкові величини; – поверхневий натяг і питома вільна поверхнева енергія; – Рівняння адсорбції Гіббса; – сучасні погляди на природу поверхневих явищ; – сили молекулярної взаємодії.	5	2	3
Тема 5. Термодинамічні параметри і види термодинамічних процесів (Логінова О.Б.): – термодинамічні функції; – ентальпія та ентропія; – закони Гесса і Кірхгофа; – рівняння Гіббса-Гельмгольца; – зміна енергія Гіббса і енергії Гельмгольца при	5	2	3

протіканні процесу; – рівноважні та нерівноважні процеси; – рівняння Гіббса-Дюгема.			
Тема 6. Термодинамічні функції в теорії розчинів (Логінова О.Б.): – закони Генрі і Рауля; – рівняння Жуховицького та Павлова-Попеля; – зв'язок активності, густини розплавів з діаграмами стану; – поверхневий натяг і структура металевого розплаву; – природна термогравітаційна конвекція. Конвекційне впорядкування, комірки Бернара. – капілярна конвекція. Ефект Марангони.	5	2	3
Тема 7. Методи вимірювання змочування для низькотемпературних та високотемпературних систем (Логінова О.Б.): – гістерезис змочування, порядковий гістерезис; – вплив деформації твердого тіла на кут змочування, вплив шорсткості поверхні на кут змочування, рівняння Венцеля-Дерягіна, рівняння Кассі для змочування неоднорідних поверхонь, вплив пористості твердої фази на кут змочування; – супергідрофобні поверхні, ефект «ЛОТОСА», ефект Лейденфроста; – капілярні явища для нанотехнологій; – змочування як метод діагностики поверхні на нано- та макрорівнях.	5	2	3
Змістовний модуль 2. Методи визначення термодинамічних і теплофізичних характеристик матеріалів			
Тема 8. Термічний аналіз (Туркевич В.З.): – криві охолодження; – прямий термічний аналіз; – диференційний термічний аналіз; – термогравіметрія.	5	2	3
Тема 9. Калориметрія (Туркевич В.З.): – кількісний термічний аналіз; – диференційна скануюча калориметрія; – калориметр Кальве; – калориметр зміщування.	5	2	3
Тема 10. Метод електрорушійних сил. Метод вимірювання парціального тиску газової фази (Туркевич В.З.): – зв'язок парціальног тиску та швидкості	5	2	3

сублімації; – робота переносу заряду; – число Фарадея; – схема гальванічного елементу.			
Змістовний модуль 3. Хімічна термодинаміка та фазові рівноваги			
Тема 11. Термодинамічна рівновага (Туркевич В.З.): – вчення про рівновагу системах; – термодинамічні і хімічні потенціали та їх застосування у вченні про рівновагу в гомогенних і гетерогенних системах.	5	2	3
Тема 12. Властивості гомогенних систем. (Туркевич В.З.): – термодинамічна класифікація гомогенних рідких систем; – ідеальні розчини; – регулярні розчини; – ідеально-асоційовані розчини; – термодинамічна класифікація гомогенних твердих систем; – розчини заміщення та проникнення; – термодинамічні моделі для опису різних типів розчинів; – загальні властивості діаграм гомогенних систем.	5	2	3
Тема 13. Хімічна термодинаміка гетерогенних систем (Туркевич В.З.): – принцип рівноваги Гіббса; – класифікація різних типів рівноваги; – умови рівноваги гетерогенних систем; – правило фаз Гіббса; – основні поняття; – аналіз правила фаз; – закон діючих мас.	5	2	3
Тема 14. Діаграми стану однокомпонентних систем (Туркевич В.З.): – побудова діаграм стану однокомпонентних систем методом геометричної термодинаміки; – основні положення вчення про фазові переходи першого і другого роду; – рівноважні р-Т діаграми вуглецю і нітриду бору.	5	2	3
Тема 15. Діаграми стану подвійних систем (Туркевич В.З.): – діаграми стану подвійних систем з необмеженою розчинністю компонентів в	5	2	3

рідкому та твердому станах; – термодинамічний вивід діаграм стану; – вигляд діаграми при наявності поліморфізму чистих компонентів; – результати експериментальних досліджень та термодинамічних розрахунків діаграм стану подвійних систем 3-d перехідних металів під атмосферним та високим тиском.			
Модуль 2			
Змістовний модуль 4. Капілярні явища в матеріалознавстві			
Тема 1. Змочування як комплексний процес (Логінова О.Б.): Розтікання, моделі розтікання, інтенсивність взаємодії між рідкою і твердою фазами; – адсорбція, ізотерми адсорбції Гіббса, Лангмюра, БЕТ; – моделі адсорбції, вибіркова адсорбція активного компонента металевого розплаву – умова гарного змочування в системі; – дифузія, закон Фіка, фактори впливу на коефіцієнт дифузії в твердих тілах; – хімічний потенціал та його вплив на процес змочування; – взаємозв'язок між типом діаграми стану, структурою межі поділу фаз після затвердіння і видом ізотерми змочування.	5	2	3
Тема 2. Класифікації основних випадків змочування, (Логінова О.Б.): – зворотні і незворотні процеси; – хімічна і фізична взаємодія; – подібність природи рідини і твердого тіла в рівноважних системах - принцип Єременка; – Природа хімічного зв'язку, квантові числа, принцип Паулі, правило Хунда. <i>s</i>-, <i>p</i>-, <i>d</i>- та <i>f</i>-елементи, хімічна активність металів та їх місце в таблиці Менделєєва, ентальпія утворення карбідів.	5	2	3
Тема 3. Фізико-хімічні фактори, що контролюють процес змочування твердих тіл металевими розплавами (Логінова О.Б.): – хімічна спорідненість компонентів розплаву до речовини твердої фази; – гранична розчинність металу-добавки і компонентів твердої фази, а також продуктів взаємодії в основному металі;	5	2	3

– ефективна концентрація металу-добавки в розплаві базового металу; – Гістерезисні явища, обумовлені станом поверхні твердої фази.			
Тема 4, 5. Принцип подібності природи рідини і твердого тіла в рівноважних системах (Логінова О.Б.): – закономірності змочування і контактної взаємодії в системах розплав-тверда фаза різної фізико-хімічної природи; – системи метал-метал; – системи метал-карбіди, бориди, нітриди металів, МАХ-фази; – системи метал-фази на основі вуглецю; – системи метал-оксиди, сульфідів, фториди; – вплив сублімації продуктів реакції на процес змочування.	10	4	6
Тема 6. Капілярність в системах кристал-ростове середовище (Логінова О.Б.): – роль капілярних явищ в процесах плавлення, змочування твердої фази власним розплавом, кристалізації евтектичних сплавів; – роль капілярних явищ в процесах фазових переходів; – теорія кристалізації, гомогенне і гетерогенне утворення зародка нової фази, число центрів кристалізації і лінійна швидкість росту; – структура поверхні розділу, її властивості і форма росту кристаллу, критерії Джексона і Кана; – анізотропія поверхневої енергії, правило Гіббса-Кюри-Вульфа.	5	2	3
Тема 7 Капілярні явища і процес кристалізації алмазу. Фізико-хімічні основи кристалізації алмазу з розплаву в умовах термодинамічної стабільності (Логінова О.Б.): – способи вирощування кристалів алмазу; – взаємозв'язок між типом діаграми стану, видом ізотерми змочування та ступенем перетворення графіту в алмаз; – анізотропія змочування і форма росту кристалів алмазу, структура металевих розплавів та її вплив на процес кристалізації алмазу;	5	2	3

– класифікація добавок в ростові середовища за їхньою дією на процес кристалізації алмазу.			
Тема 8. Роль капілярних явищ в процесах спікання, зварювання і пайки неметалів з металами (Логінова О.Б.): – взаємозв'язок між типом діаграми стану, структурою межі поділу фаз після затвердіння і видом ізотерми змочування; – вибір ростових середовищ для вирощування кристалів алмазу, зв'язок для композиційних матеріалів, припоїв для активної пайки; – капілярна і термомеханічна задача в процесі спікання та при отриманні паяних з'єднань; – зварювання та пайка; – вплив хімічного модифікування поверхні на адгезію фаз, ефект Кіркендалла, ефект Ребіндера.	5	2	3
Змістовний модуль 5. Методи визначення термодинамічних і теплофізичних характеристик матеріалів			
Тема 9. Методи та апарати для створення високого тиску. Методи досліджень фазових перетворень під високим тиском. Термічний аналіз під високим тиском (Туркевич В.З.): – газостати; – твердо фазні апарати високого тиску; – алмазні ковадла; – дослідження перетворень під високим тиском; – вимірювання температури; – термічний аналіз.	5	2	3
Тема 10. Використання синхротронного випромінювання для досліджень під високим тиском (Туркевич В.З.): – типи синхротронів; – енергія та тип пучків; – типи пристроїв для створення синхротронного випромінювання; – апарати високого тиску, що встановлюються на синхротронах.	5	2	3
Змістовний модуль 6. Хімічна термодинаміка та фазові рівноваги			
Тема 11. Діаграми стану подвійних систем з необмеженою розчинністю компонентів в рідкому стані і обмеженою розчинністю в твердому стані (Туркевич В.З.): – термодинамічний вивід діаграми стану з евтектичною рівновагою та перитектичною	5	2	3

рівновагою; – трикутник Таммана; – вигляд діаграми при наявності поліморфізму чистих компонентів; – нерівноважна кристалізація системи; – результати експериментальних досліджень та термодинамічних розрахунків діаграм стану систем Ni-C та Co-C під атмосферним та високим тиском. Система аміак-нітрид бору під високим тиском.			
Тема 12. Діаграми стану подвійних систем з обмеженою розчинністю компонентів в рідкому стані (Туркевич В.3.): – термодинамічний вивід кривої розшарування; – кристалізація з двох рідких фаз; – монотектична рівновага; – випадки повної відсутності розчинності як в твердому, так і в рідкому стані; – діаграми стану подвійних систем з хімічними сполуками, їх термодинамічний вивід; – конгруентна та інконгруентна кристалізація; – синтектична рівновага; – системи з утворенням сполук в області твердих розчинів; – дальтонідні та бертолідні фази; – результати експериментальних досліджень та термодинамічних розрахунків діаграм стану систем Fe-C, Mn-C під атмосферним та високим тиском. Система нітрид літію-нітрид бору під високим тиском.	5	2	3
Тема 13–15. Системи сполук (Туркевич В.3.): – системи простого евтектичного типу; – системи з хімічними сполуками, що плавляться конгруентно та інконгруентно; – системи з твердими розчинами без утворення хімічних сполук; – результати експериментальних досліджень та термодинамічних розрахунків діаграм стану потрійних систем Fe-Ni-C, Fe-Co-C, Mn-Ni-C під атмосферним та високим тиском; – системи з обмеженою розчинністю в рідкому стані; – поліморфні перетворення в потрійних системах.	15	6	9
Разом	150	60	90

6. Контроль знань

В основі методів контролю знань використовуються поточне індивідуальне опитування та екзаменаційна оцінка. Екзамен проводиться на другому році навчання.

Екзамен включає відповіді на шість питань: три питання з екзаменаційного білету та три додаткових питання. Оцінка відповідей на питання: – з екзаменаційного білету 25%; – додаткові 7%. Оцінка за індивідуальне опитування – до 4%.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за навчальну діяльність	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90–100	+A, A, -A	відмінно
82–89	+B, B, -B	добре
74–81	+C, C, -C	задовільно
64–73	+D, D, -D	
60–63	E	незадовільно з можливістю повторного складання іспиту
35–59	FX	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни
0–34	F	

Список базової літератури

1. Карапетянц М.Х. Химическая термодинамика. М. – Л.: Госхим-издат, 1953. – 611 с.
2. [Акопян А.А. Химическая термодинамика](#). – М.: Высшая школа, 1963. – 527 с.
3. Никольский Б.П. Физическая химия. – Л.: Химия, 1987. – 880 с.
4. Герасимов Я.И. Курс физической химии/ – М.: Химия – 1970 – Том I. – 592 с.
5. Товбин М.В. Физическая химия. – Киев: Вища школа, 1975. – 458 с.
6. Яцимирський В.К. Фізична хімія. – ВТФ «Перун», 2007. – 512 с.
7. Русанов А.М. Фазовые равновесия и поверхностные явления. – Л.: Химия, 1967. – 388 с.
8. Адам Н.К. Физика и химия поверхностей. М. – Л: Госхимиздат, 1947. – 552 с.
9. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. – М.: Мир, 1979. – 568 с.
10. Гиббс Дж.В. Термодинамические работы. М. – Л.: Гостехиздат, 1947. – 522 с.
11. Осипов А.И. Термодинамика вчера, сегодня, завтра. Часть 1. Равновесная термодинамика // Соросовский образовательный журнал. – 1999. – № 4. – С. 79–85.
12. Осипов А.И. Термодинамика вчера, сегодня, завтра. Часть 2. Неравновесная термодинамика // Соросовский образовательный журнал. – 1999. – №5. – С. 91–97.
13. Туркевич В.З. Хімічна термодинаміка та фазові рівноваги в системах з вуглецем і нітридом бору. Навчальний посібник. – К.: Київський ВГЦ Університет, 2004. – 86 с.

ПОГОДЖЕНО

Завідувач кафедри

Д.Т.Н., С.Н.С.

 О.О. Бочечка

