

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ЕЛЕКТРОЗВАРЮВАННЯ ім. Є.О. ПАТОНА НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ
Відділ аспірантури при ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України

ЗАТВЕРДЖУЮ

Заступник директора
ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України
академік НАН України



С.І. Кучук-Яценко
(ініціали, прізвище)

«06» липня 2020 р.

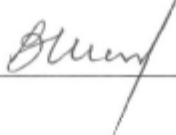
ТЕРМОДИНАМІКА І КІНЕТИКА МЕТАЛУРГІЙНИХ ПРОЦЕСІВ
шифр навчальної дисципліни за ОНП 3/І

ПРОГРАМА
навчальної дисципліни

рівень вищої освіти - доктор філософії
спеціальність - 136 – Металургія
освітня програма - Металургія

Затверджено на випускному
відділі за спеціальністю 136
«Металургія»

Інституту електрозварювання
ім. Є.О. Патона НАН України
Протокол №1 від 3.07.2020 р.
Завідувач випускового відділу
чл.-кор. НАН України, проф.


В.О. Шаповалов

Київ – 2020 р.

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Зав. відділу плазмово-шлакової металургії Інституту
електрозварювання ім. Є.О. Патона НАНУ
д.т.н., чл-кор., проф. Шаповалов Віктор Олександрович

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище, ім'я, по батькові)


(підпис)

Зав. відділу металургії і зварювання титанових сплавів Інституту
електрозварювання ім. Є.О. Патона НАНУ
д.т.н., чл-кор., проф. Ахонін Сергій Володимирович

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище, ім'я, по батькові)


(підпис)

Провідний науковий співробітник відділу плазмово-шлакової
металургії Інституту електрозварювання ім. Є.О. Патона НАНУ
д.т.н., Біктагіров Фаріт Камілович

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище, ім'я, по батькові)


(підпис)

Старший науковий співробітник відділу плазмово-шлакової
металургії Інституту електрозварювання ім. Є.О. Патона НАНУ
к.т.н. Якуша Володимир Вікторович

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище, ім'я, по батькові)


(підпис)

Вступ

Програму навчальної дисципліни

«Термодинаміка і кінетика металургійних процесів»
(назва навчальної дисципліни)

складено відповідно до освітньої програми

ОНП 3/І,
(ОПП/ОНП, назва)

ІІІ рівня вищої освіти доктор філософії
(рівень вищої освіти)

спеціальності 136 – металургія
(код і назва спеціальності)

Навчальна дисципліна належить до циклу професійної підготовки, шифр 3/І
(загальної / професійної підготовки)

Статус навчальної дисципліни обов'язкова
(обов'язкова / вибіркова)

Обсяг навчальної дисципліни 5 кредитів ЄКТС.

Міждисциплінарні зв'язки «Фізика рідкого стану і металургійна спадковість» – код 4/І»;

Дисципліна забезпечує виконання дисертаційної роботи доктора філософії.

1.1. Метою навчальної дисципліни є формування в аспірантів компетентностей:

- Здатність розроблення та реалізація проектів, включаючи власні дослідження (код ЗК 7);
- Здатність досліджувати проблеми із використанням системного аналізу та інших методів дослідження (код ЗК 12);
- здатність узагальнювати результати сучасних досліджень структури та властивостей матеріалів для вирішення наукових і практичних проблем, на основі фундаментальних та спеціальних знань синтезувати та створювати нові матеріали заданого функціонального призначення (код ФК 5);
- здатність проводити наукові дослідження в металургійній галузі на основі сучасних теорій термодинаміки, кінетики металургійних процесів, фізики рідкого стану і структуроутворення металів і сплавів (код ФК 13);
- здатність адаптувати і узагальнювати результати сучасних досліджень у металургійній галузі знань для вирішення наукових і практичних проблем (код ФК 15).

1.2. Завдання навчальної дисципліни

Згідно з вимогами освітньо-наукової програми аспіранти після засвоєння навчальної дисципліни мають продемонструвати такі результати навчання:

знання:

- Передових концептуальних та методологічних знань з металургії та на межі предметних галузей, а також дослідницьких навичок для проведення наукових і прикладних досліджень на рівні останніх світових досягнень (код ЗН 1);
- методик аналізу та синтезу знань при вирішенні проблем у широкому контексті металургійних та міждисциплінарних задач, у тому числі за умов невизначеності чи неповної інформації (код ЗН 4);
- новітніх світових досягнень науки, техніки та технологій в галузі металургія та суміжних сферах (код ЗН 5);
- сучасної вітчизняної та зарубіжної науково-технічної інформації в професійній сфері діяльності (код ЗН 12);
- сучасних теорій, положень, методів досліджень у металургійній галузі (код ЗН 14);
- термодинаміки та кінетики металургійних процесів (код ЗН 15).

уміння:

- використовувати необхідні для обґрунтування висновків докази, зокрема, результати теоретичного аналізу, експериментальних досліджень і математичного та/або комп'ютерного моделювання, наявні емпіричні дані (код УМ 2);
- застосовувати аналіз та синтез знань під час вирішення проблем в широкому контексті металургійних та міждисциплінарних задач за умов невизначеності чи неповної інформації (код УМ 7);
- постійно удосконалювати свій загальний інтелектуальний та професійний рівень (код УМ 18);
- розробляти нові методики досліджень у галузі металургії (код УМ 26);
- планувати і проводити аналітичні, імітаційні та експериментальні дослідження, критично оцінювати дані і робити висновки (код УМ 27);
- проводити наукові дослідження на основі сучасних теорій термодинаміки, кінетики металургійних процесів, фізики рідкого стану і структуроутворення металів і сплавів (код УМ 29).

2. Структура навчальної дисципліни

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 150 годин / 5 кредитів ECTS.

Навчальна дисципліна містить кредитний модуль: “ Термодинаміка і кінетика металургійних процесів ”.

Рекомендований розподіл навчального часу

Форма навчання	Семестри	Усього кредитів/годин	Розподіл навчального часу за видами занять			Семестрова атестація
			Лекції	Практичні заняття	СР аспіранта*	
Денна	1	5/150	36	18	96	Екзамен

* Розрахунок наведено в додатку А

3. Зміст навчальної дисципліни

Кредитний модуль 1. «Термодинаміка і кінетика металургійних процесів».

Розділ 1 Вступ. Основні поняття.

Тема 1.1 Завдання і зміст курсу. Термодинамічні системи.

Загальні положення. Короткий історичний аналіз розвитку термодинаміки і кінетики й застосування в металургійних процесах. Ізольовані, закриті і відкриті системи. Рівноважні та нерівноважні системи. Температура, теплота, теплоємність і кількісні газові закони. Стан речовини й рівняння Ван дер Ваальса.

Розділ 2 Перший, другий і третій закони термодинаміки.

Тема 2.1 Природа теплоти. Перший закон термодинаміки.

Збереження енергії. Додатки першого початку термодинаміки до металургії. Термохімія. Закон Гесса. Збереження енергії в хімічних реакціях. Ступінь повноти протікання реакції. Хімічна змінна.

Тема 2.2 Другий закон термодинаміки й поняття ентропії.

Передумови виникнення другого закону термодинаміки. Абсолютна шкала температур. Ентропія в зворотних і незворотних процесах. Приклади змінення ентропії, що викликані незворотними процесами. Зміни ентропії, що викликані фазовими переходами. Ентальпія ідеального газу. Деякі зауваження відносно другого закону термодинаміки й незворотних процесів.

Тема 2.3 Роль ентропії в хімічних реакціях.

Хімічний потенціал і хімічна спорідненість - рушійна сила хімічних реакцій. Загальні властивості хімічної спорідненості. Виробництво ентропії, обумовлене дифузією. Загальні властивості ентропії.

Тема 2.4 Третій закон термодинаміки.

Тепловий закон Нернста. Вироджений стан. Значення C_p і C_v при наближенні значення температури до абсолютного нуля.

Розділ III Рівноважна термодинаміка

Тема 3.1 Принципи екстремумів і загальні термодинамічні співвідношення.

Принципи екстремумів у природі. Принципи екстремумів і другий закон термодинаміки. Загальні термодинамічні співвідношення. Вільна енергія

Гіббса утворення і хімічний потенціал. Співвідношення Максвелла. Екстенсивні властивості і парціальні молярні величини. Поверхневий натяг.

Тема 3.2 Основи термодинаміки газів, рідин і твердих тіл.

Термодинаміка ідеальних газів. Термодинаміка реальних газів. Термодинамічні величини і співвідношення для чистих рідин і твердих тіл.

Тема 3.3 Фазові переходи.

Фазова рівновага і фазові діаграми. Правило фаз Гіббса і теорема Дюгема. Двокомпонентні і трикомпонентні системи. Побудова Максвелла і правило важеля. Фазові переходи.

Тема 3.4 Розчини.

Ідеальні і неідеальні розчини. Колігативні властивості. Розчинність і умови термодинамічної рівноваги. Функція змішування і надлишкові функції. Азеотропія.

Тема 3.5 Хімічні перетворення.

Перетворення речовини. Швидкості хімічних реакцій. Хімічна рівновага і закон діючих мас. Принцип детальної рівноваги. Виробництво ентропії в хімічних реакціях.

Тема 3.6 Термодинаміка випромінювання.

Щільність енергії та інтенсивність теплового випромінювання. Рівняння стану. Ентропія і адіабатичні процеси. Теорема Віна. Хімічний потенціал теплового випромінювання. Речовина, випромінювання і нульовий хімічний потенціал.

Розділ IV Флуктуації і стійкість

Тема 4.1 Теорія стійкості Гіббса.

Класична теорія стійкості. Теплова стійкість. Механічна стійкість. Стійкість і флуктуації числа молей.

Тема 4.2 Критичні явища і конфігураційна теплоємність.

Стійкість і критичні явища. Стійкість і критичні явища в бінарних розчинах. Конфігураційна теплоємність.

Тема 4.3 Стійкість і флуктуації, засновані на виробництві ентропії.

Стійкість і виробництво ентропії. Термодинамічна теорія флуктуацій.

Розділ V Лінійна нерівноважна термодинаміка

Тема 5.1 Нерівноважна термодинаміка. Основні положення.

Локальна рівновага. Локальне виробництво ентропії. Рівняння матеріального балансу. Збереження енергії у відкритих системах. Рівняння балансу ентропії.

Тема 5.2 Нерівноважна термодинаміка. Лінійний режим.

Лінійні феноменологічні закони. Співвідношення взаємності Онсагера і принцип симетрії. Термоелектричні явища. Дифузія. Хімічні реакції. Теплопровідність в анізотропних твердих тілах. Електрокінетичні явища. Співвідношення Сакса. Термодифузія.

Тема 5.3 Нерівноважні стаціонарні стани і їх стійкість. Лінійний режим.

Стаціонарні стани в нерівноважних умовах. Теорема про мінімум виробництва ентропії. Зміна виробництва ентропії в часі і стійкість стаціонарного стану.

Розділ VI Порядок через флуктуації

Тема 6.1 Нелінійна термодинаміка.

Системи, далекі від рівноваги. Загальні властивості виробництва ентропії. Стійкість нерівноважних стаціонарних станів. Лінійний аналіз.

Тема 6.2 Дисипативні структури.

Конструктивна роль незворотних процесів. Втрата стійкості, біфуркації і порушення симетрії. Хімічні коливання. Структурна нестійкість.

Розділ VII Кінетика хімічних реакцій

Тема 7.1 Кінетика гомогенних хімічних реакцій.

Формальна кінетика. Застосування кінетичної теорії газів. Теорія перехідного стану.

Тема 7.2 Ланцюгові реакції.

Загальні характеристики ланцюгових реакцій. Засади кількісної теорії ланцюгових реакцій.

Тема 7.3 Теорія гетерогенних реакцій.

Зовнішня і внутрішня масопередача. Кінетика кристалізації. Кінетика електродних процесів. Каталіз.

4. Рекомендований перелік практичних занять (комп'ютерних практикумів)

За час проведення практичних занять аспіранти виконують розрахунки, що доводять правомірність теоретичних відомостей, які наведені при вивченні окремих тем.

Практичне заняття № 1

Розрахунки процесів із використанням першого та другого законів термодинаміки.

Визначення роботи, енергії, теплового ефекту реакції тощо. Побудова S-T діаграм, робота, визначення зміни ентропії в різних металургійних процесах.

Практичне заняття № 2

Розрахунки процесів з використанням третього закону термодинаміки.

Визначення хімічної спорідненості. Розрахунки щодо зміни ентропії в металургійних реакціях.

Практичне заняття № 3

Розрахунки металургійних реакцій із визначенням енергії Гіббса.

Практичне заняття № 4

Стан ідеального газу. Рівняння Гіббса-Гельмгольца та межі його застосування.

Практичне заняття № 5

Фазова рівновага та фазові діаграми. Правило фаз Гіббса и теорема Дюгема. Двокомпонентні й трикомпонентні системи.

Практичне заняття № 6

Розчинність та умови термодинамічної рівноваги. Функція змішування та надлишкова функція. Хімічна рівновага та закон діючих мас.

Практичне заняття № 7

Нерівноважний стаціонарний стан та стійкість.

Практичне заняття № 8

Нелінійна термодинаміка. Дисипативні структури.

Практичне заняття № 9

Кінетика гомогенних хімічних реакцій. Кінетика кристалізації.

5. Рекомендовані індивідуальні завдання

Самостійна робота аспірантів включає підготовку до лекцій, модульної контрольної роботи, практичність занять й екзамену (див. Методичні вказівки до самостійної роботи). Розподілення часу на самостійну роботу наведено в додатку А.

6. Рекомендована література

6.1 Література базова:

1. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур: Пер. с англ. Ю. А. Данилова и В. В. Белого - М.: Мир, 2002. - 461 с.

2. Семиохин И.А. Физическая химия: учебник. — Изд-во МГУ, 2001. — 272 с.

3. Жуховицкий А.А. и Шварцман Л.А. Физическая химия: учебник. – М.: «Металлургиздат». – 1964.- 676 с.

6.2 Література допоміжна:

1. Киреев В.А. Краткий курс физической химии: учебник.-М.: «Химия». -1978.- 624 с.

2. Жуховицкий А.А. и Шварцман Л.А. Краткий курс физической химии: Учебник. – М.: «Металлургиздат». – 1979.- 368 с.

3. Гамбург Ю. Д. Химическая термодинамика: учебное пособие.-М.: «Химия». -2013.- 237 с.

4. Лямина Г.В., Лапова Т.В., Курзина И.В., Вайтулевич Е.А., Еремина А.Н. Химическая термодинамика: учебное пособие / под ред. Г.В. Ляминой. - Томск: Изд-во Том. гос. архит.-строит. ун-та, 2007. - 82 с.

5. Нарышкин Д. Г. Химическая термодинамика с Mathcad. Расчетные задачи: учебное пособие.- М.: РИОР: – ИНФРА-М. –2019. – 199с.

7. Засоби діагностики успішності навчання

Для поточного контролю успішності навчання рекомендується проведення однієї модульної контрольної роботи (на контрольні роботи виносяться питання лекційного курсу і СР аспірантів):

1. Перший, другий і третій закони термодинаміки. Рівноважна термодинаміка. Нерівноважна і нелінійна термодинаміка. Дисипативні структури.

Підсумковий контроль результатів навчання з дисципліни проводиться у формі екзамену.

Навчальна програма складена на основі ОНП підготовки докторів філософії спеціальності 136 – “Металургія”.

Програму розробили:

Зав. відділом
д.т.н. чл-кор., проф.



(підпис)

В.О. Шаповалов

Зав. відділом
д.т.н. чл-кор., проф.



(підпис)

С.В. Ахонін

п.н.с. д.т.н.



(підпис)

Ф.К. Біктагіров

с.н.с. к.т.н.



(підпис)

В.В. Якуша

Розрахунок часу на самостійну роботу

Час на самостійну роботу аспіранта складає:

$$T_{\text{CPA}} = 1,0t_{\text{Л}} + 1 \times t_{\text{ПЗ}} + 1\text{МКР} + \text{Екзамен} = \\ 1,0 \times 36 + 1 \times 18 + 12 + 30 = 96 \text{ годин}$$

Примітка: Л – лекції; ПЗ – практичні заняття; МКР – модульні контрольні роботи; Екзамен.