

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет

Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи
Павленко В.О.



“08” травня 2019 року



**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ФІЗИЧНА ХІМІЯ НЕВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМ**

для студентів

галузі знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **“бакалавр”**
освітня програма **Хімія**
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання **денна**

Навчальний рік **2019/2020**

Семестр **VIII**

(VIII семестр програми підготовки за ОР «бакалавр»)

Кількість кредитів ECTS **3 кредити**

Мова викладання, навчання та оцінювання

українська

Форма заключного контролю **іспит**

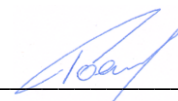
Викладач (лектор): **Роїк Олександр Сергійович**

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.

на **2021/2022** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2019

Розробник: **Роїк Олександр Сергійович**, доц., д.х.н., доц. _____



ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізичної хімії



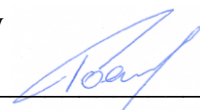
(Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від “09” квітня 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від “08” травня 2019 року

Голова науково-методичної комісії _____



(Роїк О.С.)

Протокол № від “__” _____ 20__ року

Голова науково-методичної комісії _____

(_____)

1. Мета дисципліни – засвоєння студентами основних теоретичних положень, які дозволяють пояснити взаємозв'язок між атомною структурою та фізико-хімічними властивостями речовин, у яких відсутня трансляційна симетрія (рідин, аморфних сплавів, стекол, полімерів). Ознайомлення із основними експериментальними та модельними методами дослідження атомного впорядкування некристалічних матеріалів. Формування практичних навичок у застосуванні одержаних знань при моделюванні металічних розплавів та аморфних сплавів, аналізу даних диференціальної скануючої калориметрії отриманих при відпалі аморфних плівок.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни

Даний курс базується на знаннях наступних загальних курсів: фізичної хімії, кристалохімії, вищої математики та фізики.

3. Анотація навчальної дисципліни

Представлена навчальна дисципліна “Фізична хімія неупорядкованих систем” дає студентам уявлення про взаємозв'язок між атомною структурою неупорядкованих систем (рідин, аморфних сплавів, стекол, полімерів) та їх фізико-хімічними властивостями. Окремим розділом розглядаються особливості структури та властивостей квазікристалічних металічних фаз, у яких присутній дальній порядок, але відсутня трансляційна симетрія. Дається опис експериментальних та модельних методів дослідження атомного впорядкування некристалічних матеріалів. Розглядаються різноманітні методи отримання аморфних речовин із рідкого, газоподібного та кристалічного станів. Описується процес аморфізації, поняття критичної швидкості охолодження та фактори, які впливають на її величину. Пояснюються причини низької термічної стабільності аморфних металічних сплавів та вплив на неї низькотемпературного відпалювання. Показується, що відмінність механічних, хімічних, магнітних властивостей кристалічних та аморфних матеріалів пояснюється відсутністю трансляційної симетрії і, відповідно, анізотропії для останніх.

4. Завдання (навчальні цілі):

- сформулювати уявлення про взаємозв'язок атомна структура – фізико-хімічні властивості розплавів (рідин), аморфних сплавів, стекол, полімерів;
- ознайомити студентів із застосуванням законів хімічної термодинаміки та кінетики для опису процесів, які мають при формуванні аморфного стану;
- надати необхідний теоретичний базис для розуміння експериментальних та модельних методів дослідження структури систем, де відсутня трансляційна симетрія;
- сформулювати практичні навички, які необхідні для моделювання металічних розплавів та аморфних сплавів, а також аналізу даних диференціальної скануючої калориметрії отриманих при відпалі аморфних плівок

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час лекцій ПтК-1 і лабораторних робіт ПтК-2 та контроль самостійної роботи ПтК-3), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	Знати та розуміти взаємозв'язок між атомною структурою та фізико-хімічними властивостями розплавів, аморфних сплавів та стекол.	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
1.2	Знати та розуміти термодинаміку та кінетику процесів формування аморфних сплавів та стекол.	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
1.3	Розуміти теоретичні основи експериментальних та модельних методів дослідження структури матеріалів.	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
1.4	Знати основні галузі прикладного застосування аморфних сплавів та стекол.	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
2. Вміння				
2.1	Здійснювати експериментальну роботу під керівництвом, з метою перевірки гіпотез та дослідження електрохімічних процесів.	лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3	10
2.2	Використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання електрохімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.	лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
2.3	Вміти працювати самостійно або в групі, отримувати результат у межах обмеженого часу.	лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі електрохімії	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5

4. Автономність та відповідальність				
4.1	Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати експерименту	лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил техніки безпеки та здійснювати професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища	лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Знання												
Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних галузей знань	+	+	+	+	+							
Здатність розуміти та інтерпретувати основи фізики та математики на рівні, достатньому для використання їх у різних сферах хімії	+	+	+	+		+						
Знання хімічної термінології та номенклатури, спроможність описувати хімічні дані у символічному вигляді	+	+	+	+		+	+					
Знання основних типів хімічних реакцій та стереохімічних досліджень		+	+									
Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин	+	+	+									
Знання та розуміння періодичного закону та періодичної системи елементів, здатність описувати, пояснювати та передбачати властивості хімічних елементів та сполук на їх основ	+	+										
Знання основних принципів квантової механіки, здатність застосовувати їх для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку	+	+	+									
Базові знання принципів і процедур фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типового обладнання та приладів					+	+					+	+
Знання основ планування та проведення експериментів, методики та техніки приготування розчинів та реагентів					+	+					+	+
Знання основних принципів термодинаміки та хімічної кінетики, здатність до їх застосування для рішення практичних задач	+	+	+	+		+						

ПРН \ РНД (код)	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
Здатність описувати стереохімічні властивості аліфатичних, ароматичних, гетероциклічних та органометалічних похідних, пояснювати природу та поведінку функціональних груп в органічних молекулах											
Знання основних шляхів синтезу та стереохімії в органічній хімії та хімії природних сполук, включаючи функціональні групові взаємоперетворення		+	+		+	+	+				
Уміння Здійснювати критичний аналіз, оцінювати дані та синтезувати нові ідеї						+		+	+		
Здійснювати експериментальну роботу під керівництвом, з метою перевірки гіпотез та дослідження явищ і хімічних закономірностей					+			+	+	+	+
Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.						+					
Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.					+	+		+	+		
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросесність.							+	+	+	+	+
Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.	+	+	+	+		+					
Використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.					+	+					
Готувати розчини та реагенти, планувати та здійснювати хімічні експерименти.					+					+	+
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.					+	+		+	+		
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.					+			+	+		
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії в прикладному полі, базові інженерно-технологічні навички.					+						

ПРН \ РНД (код)	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
Комунікація Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.					+		+	+	+	+	+
Вміння коректно використовувати мовні засоби в професійній діяльності залежно від мети спілкування.					+			+	+		
Вміння відображати результати своїх наукових досліджень у письмовому вигляді.					+	+		+	+	+	+
Здатність до презентації результатів своїх досліджень.					+	+		+	+		
Здатність працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної взаємодії.							+	+	+	+	+
Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.					+	+		+	+	+	+
Автономія та відповідальність Здатність вести професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища.					+					+	+
Здатність діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.					+		+	+	+	+	+
Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	+	+	+	+	+	+		+	+	+	+
Здатність приймати обґрунтовані рішення та рухатися до спільної мети.					+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

- 1.1. усна доповідь та доповнення під час лекційного заняття;
- 1.2. активність під час лабораторного заняття та оформлення результатів лабораторного експерименту;
- 1.3. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.4. написання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

іспит.

7.2. Організація оцінювання:

8 семестр

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Змістовий модуль 3	
	Min. – 12 балів	Max. – 20 балів	Min. – 12 балів	Max. – 20 балів	Min. – 12 балів	Max. – 20 балів
Усна відповідь	3	5	3	5	3	5
Виконання домашньої самостійної роботи	3	5	3	5	3	5
Модульна контрольна робота 1	6	10				
Модульна контрольна робота 2			6	10		
Модульна контрольна робота 3					6	10

	Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2	Змістовий модуль 3	Іспит	Разом
Max. Балів	20	20	20	40	100
Min. балів*	12	12	12	24	60

* рекомендований критичний мінімум

До іспиту може бути допущений студент, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Електрохімія" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, написання групових тематичних контрольних робіт, виконання експериментальних лабораторних робіт), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістові модуля сумарну оцінку в балах не менше 36 балів (критично розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для заліку або критично-розрахунковий мінімум для допуску до іспиту допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Відмінно/Excellent	90-100
Добре/Good	75-89
Задовільно/Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ лекції	Назва лекцій	Кількість годин		
		лекції	Лабораторн і роботи	Самостійна робота
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ I " Експериментальне дослідження структури неупорядкованих систем "				
1	Поняття про ближній та далекий порядок. Вплив відсутності трансляційної симетрії на фізико-хімічні властивості речовини.	1	2	2
2	Порівняння структури кристалічного, квазікристалічного, аморфного та рідкого станів речовини.	2		2
3	Теорія розсіювання рентгенівських променів речовинами, у яких відсутня трансляційна симетрія	2	2	3
4	Рентгено- та нейтронодифракційний методи дослідження неупорядкованих матеріалів.	2		2
5	Дослідження атомного впорядкування у рідкому та аморфному стані речовини за допомогою методу EXAFS.	2	2	3
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II "Моделювання структури неупорядкованих систем та отримання аморфних сплавів та стекло"				
6	Моделювання аморфного та рідкого станів речовини за допомогою методів прямого та оберненого Монте-Карло.	1	2	2
7	Метод молекулярної динаміки в дослідженні неупорядкованих систем. Періодичні граничні умови	2		3
8	Поліедри Вороного та симплекси Делоне, як інструмент аналізу структури конфігураційних моделей. Уніфіковані міри симплексів в перколяційних дослідженнях.	2		2
9	Розвиток методів моделювання неупорядкованих систем.	1	2	3
10	Основні методи отримання аморфної фази із кристалічного, рідкого та газоподібного станів речовини.	2		3
11	Умови отримання аморфної фази методом загартовування із розплаву. Різниця між аморфізацією та кристалізацією речовин.	2		3
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ III "Зв'язок між атомною структурою та фізико-хімічними властивостями неупорядкованих систем"				
12	Вплив процесів аморфізації та кристалізації на властивості загартованих матеріалів.	1	2	2
13	ТТТ – діаграми. Поняття критичної швидкості охолодження. Фактори, які впливають на величину критичної швидкості охолодження.	2		3
14	Термічна стабільність аморфних речовин. Низькотемпературне відпалювання аморфних сплавів.	2		3
15	Процеси намагнічування в аморфних сплавах. Магнітом'які аморфні сплави.	2	2	3

16	Причини корозійної стійкості аморфних сплавів	2	3
17	Фізико-хімічні властивості квазікристалічних фаз.	2	3

Загальний обсяг - **90 год.**, в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Лабораторні заняття - **14 год**

Консультації – **1 год**

Самостійна робота – **45 год.**

Література

Основна

- 1) Судзуки К., Худзимори Х., Хасимото К. Аморфные металлы / Под ред. Масумото Ц. Пер. с япон. - М.: Металлургия, 1987. - 328 с.
- 2) Казіміров В.П., Сокольський В.Е., Роїк О.С., Самсоніков О.В. Структура неупорядкованих систем. – Київ, ВПЦ “Київський університет”, 2009.
- 3) Белащенко Д.К. Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ. – М.: МИСИС, 2005. – 408 с.
- 4) Гельчинский Б.Р., Анчарова Л.П., Анчаров А.И., Шатманов Т.Ш. Некоторые экспериментальные и численные методы исследования структуры ближнего порядка. – Фрунзе: Илим, 1987. – 222 с.
- 5) Медведев Н.Н. Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем. – Новосибирск, Издательство СО РАН НИЦ ОИГГМ, 2000. – 214 с.

Додаткова

- 6) Полухин В.А., Ватолин Н.А. Моделирование аморфных металлов. – Москва: Наука, 1985. – 288 с.
- 7) Методы Монте-Карло в статистической физике. Под редакцией К. Биндера, пер. с англ. под ред. Г. И. Марчука и Г. А. Михайлова. – М.: Мир, 1982. – 400 с.
- 8) Крокстон К. Физика жидкого состояния. – М.: Мир, 1977. – С. 400.

Інтернет ресурси

<https://www.scopus.com/>

<http://login.webofknowledge.com/>

<http://www.nbuu.gov.ua/>

<http://www.library.univ.kiev.ua>

<https://www.researchgate.net/>