

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
МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧНІ ТЕОРІЇ РІДИН

галузі знань
спеціальність
освітній рівень
освітня програма
вид дисципліни

для студентів
10 Природничі науки
102 Хімія
“магістр”
Хімія
вибіркова

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2019/2020**
Семестр **II**
(II семестр програми підготовки за ОР «магістр»)
Кількість кредитів ECTS **3 кредити**
Мова викладання, навчання та оцінювання
українська
Форма заключного контролю **залік**

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 – опанування студентами знань про структуру та властивості рідини (розплавів), метод корелятивних функцій, характер теплового руху частинок, основні моделі та методи дослідження самодифузії частинок у рідкому стані. Формування теоретичного підґрунтя для розуміння сучасних методів експериментального та модельного дослідження локальної атомної структури рідин,

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни

Даний курс базується на знаннях курсу вищої математики, фізики та фізичної хімії.

3. Анотація навчальної дисципліни

Представлена навчальна дисципліна “Молекулярно-статистичні теорії рідин” дає студентам уявлення про структуру та динамічні властивості рідини (розплавів). Детально розглядаються різноманітні експериментальні та модельні методи їх дослідження. Обговорюються процеси гідратації у водних розчинах електролітів та особливості структури та властивостей води.

4. Завдання (навчальні цілі):

- сформулювати уявлення про ближній порядок у рідині (розчині) та його вплив на її динамічні властивості;
- ознайомити студентів із природою теплового руху та самодифузії частинок у рідкому стані;
- ознайомити студентів із експериментальними та модельними методами дослідження структури та властивостей рідини.
- надати необхідний теоретичний базис для розуміння процесів гідратації у іонів у водних розчинах та їх впливу на структуру води

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль самостійної роботи ПтК, підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	Знання основних характеристик локальної атомної структури рідини (розплаву).	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	15
1.2	Знання про природу теплового руху та самодифузії частинок у рідині, зв'язок між термодинамічними функціями та статистичним і конфігураційними інтегралами	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	15
1.3	Знання про теоретичні основи різноманітних експериментальних та модельних методів дослідження структури та властивостей рідин (розплавів).	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	15

2. Вміння				
2.1	Знаходити у першоджерелах інформацію про властивості та структуру рідин	Самостійні	ПтК	5
2.2	Використовувати набуті знання та вміння для розрахунків та моделювання структури та властивостей рідкого стану.	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	15
2.3	Вміти інтерпретувати та відтворювати результати експериментальних досліджень структури та властивостей розчинів та розплавів	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	15
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації, що стосується властивості та структури рідин	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання у співпраці з іншими виконавцями	Самостійні	ПтК, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Вміти самостійно зафіксувати, проаналізувати та інтерпретувати дані, що стосуються структури та властивостей рідин	Самостійні	ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та академічної доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі теорії рідин	Самостійні	ПсК	5

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

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Знання та вміння Знати сталі наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+		+						
Знати та розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми.	+	+	+		+	+					

ПРН \ РНД (код)	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу, складати звіт.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.	+	+	+	+	+	+	+	+		
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії для вирішення прикладних задач.					+	+	+	+		
Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Комунікація Володіти навичками публічної мови та ведення дискусії з колегами та цільовою аудиторією.					+	+	+	+	+	+
Працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної взаємодії з урахуванням етичних норм.					+	+	+	+	+	+
Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для спілкування, обміну та інтерпретації даних.				+	+	+	+	+	+	+
Автономія та відповідальність Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.									+	+
Брати на себе відповідальність за виконання експериментів.					+				+	+
Діяти соціально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Уміти вчитись самостійно для безперервного професійного розвитку.				+	+	+	+	+	+	+
Приймати обґрунтовані рішення, нести відповідальність за власні судження та результати.				+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

- 1.1. активність під час лекції;
- 1.2. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.3. написання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

- підсумкова контрольна робота
залік за результатами роботи в семестрі

7.2. Організація оцінювання:

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Змістовий модуль 3		Підсумкова контрольна робота	
	Min. – 17 балів	Max. – 28 балів	Min. – 17 балів	Max. – 28 балів	Min. – 14 балів	Max. – 24 балів	Min. – 12 балів	Max. – 20 балів
Доповнення	2	4	2	4	1	3		
Виконання домашньої самостійної роботи	9	14	9	14	7	11		
Модульна контрольна робота 1	6	10						
Модульна контрольна робота 2			6	10				
Модульна контрольна робота 3					6	10		
Підсумкова контрольна робота							12	20

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для заліку **60 балів** 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

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою
60 – 100	зараховано / passed
1 – 59	не зараховано / fail

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ лекції	Назва лекцій	Кількість годин	
		лекції	Самостійна робота
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ I " Структура та властивості рідини "			
1	Опис структури рідини, поняття про ближній порядок та його кількісний опис.	2	4
2	Основи дифракційного методу дослідження структури рідини. Структурний фактор та його зв'язок з парною функцією розподілу атомів	2	4

3	Моделі самодифузії та їх використання при дослідженні водних розчинів електролітів. Вплив природи іону на процес гідратації в водних розчинах.	3	5
4	Структура та особливості властивостей води.	2	5
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II "Термодинаміка рідкого стану "			
5	Наближення адитивності парних взаємодій. Типи модельних потенціалів парної взаємодії	2	4
6	Розрахунок конфігураційного інтегралу та рівняння стану рідини в рамках моделі вільного об'єму.	2	4
7	Метод групового розкладу, рівняння стану в віріальних коефіцієнтах.	2	4
8	Фізичний зміст другого віріального коефіцієнта та його розрахунок з використанням потенціалу Сьюзерленда.	2	4
9	Метод корелятивних функцій в теорії рідини. Зв'язок бінарної корелятивної функції з парною функцією розподілу атомів	3	5
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ III " Експериментальні та модельні методи дослідження структури та властивостей рідини "			
10	Огляд експериментальних дифракційних методів дослідження рідин.	2	4
11	Моделювання структури розплавів та розчинів методом Оберненого Монте-Карло.	2	4
12	Методи класичної, <i>ab initio</i> МД та квантової МД. в моделюванні структури і властивостей рідин	2	5
13	Аналіз структурних моделей. Статистично-геометричний метод Вороного-Делоне	2	4
14	Взаємозв'язок між структурою рідкого та аморфного станів.	2	4

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

Лекцій – **30 год.**

Самостійна робота - **60 год.**

Консультації – за вимогою студентів, але не менше ніж 1 раз на 2 тижні

Література

Основна

1. **Фишер И.З.** Статистическая теория жидкостей. – М.: Наука, 1961.
2. **Антонченко В.И., Давыдов А.С., Ильин В.В.** Основы физики воды. – Киев, Наукова думка, 1991.
3. **Смирнова Н.А.** Методы статистической термодинамики в физической химии. – М.: 1973.
4. **Белащенко Д.К.** Структура жидких и аморфных металлов. – М.: Metallurgia, 1985.
5. **Казіміров В.П., Сокольський В.Е., Роїк О.С., Самсоніков О.В.** Структура неупорядкованих систем. – Київ, ВПЦ “Київський університет”, 2009.
6. **Харьков Е.И., Лысов В.И., Федоров В.Е.** Физика жидких металлов. – Киев, Выща школа, 1979.

Додаткова

7. **Судзуки К., Фудзимори Х., Хасимото К.** Аморфные металлы. – М.: Metallurgia, 1987.
8. **Самойлов О.Я.** Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов. – М.: Изд-во АН СССР, 1957.
9. **Синюков В.В.** Структура одноатомных жидкостей, воды и водных растворов. – М.: Наука, 1976.
10. **Медведев Н.Н.** Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем – Новосибирск.: Издательство СО РАН, 2000.
11. **Гуревич Ю.Я.** Твердые электролиты. М.: Наука, 1986. 176 с.

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/>

Перелік питань, що виносяться на підсумкову контрольну роботу

1. Модель Лагранжа для самодифузії частинок рідини та її експериментальне підтвердження.
2. Рівняння стану Ейрінга для рідини в моделі вільного об'єму.
3. Зв'язок повної енергії рідини з парною функцією розподілу атомів в рамках методу корелятивних функцій.
4. Модель Френкеля самодифузії частинок рідини та її експериментальне підтвердження.
5. Характер теплового руху частинок рідини. Ієрархія структур.
6. Статистичний та конфігураційний інтеграли.
7. Взаємозв'язок між конфігураційним інтегралом та термодинамічними функціями системи.
8. Нейтроннографічне дослідження самодифузії молекул води та іонів в водних розчинах електролітів.
9. Залежність механізму самодифузії в водних розчинах електролітів від природи іону.
10. Рівняння стану в віріальних коефіцієнтах.
11. Обчислення конфігураційного інтегралу з використанням функції Майєра.
12. Зв'язок між бінарною корелятивною функцією та функцією парного розподілу атомів.
13. Опис структури рідини. Ближній порядок та функція парного розподілу атомів рідини.
14. Розрахунок другого віріального коефіцієнта. Температура Бойля.
15. Модель вільного об'єму для простих одноатомних рідин та її використання для розрахунку конфігураційного інтеграла.
16. Наближення адитивності парних взаємодій. Типи модельних парних потенціалів міжчастинкової взаємодії.
17. Метод корелятивних функцій в теорії рідини. Основні положення..
18. Структура та особливості властивостей води.
19. Процеси гідратації іонів в водних розчинах електролітів. Загальні положення.
20. Розрахунок другого віріального коефіцієнту з використанням потенціалу Сьюзерленда.