

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи

 Наталія УСЕНКО

« 30 » 06 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ДИСИПАТИВНА САМООРГАНІЗАЦІЯ В ХІМІКО-БІОЛОГІЧНИХ СИСТЕМАХ

для здобувачів вищої освіти

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

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	8
Кількість кредитів ECTS	4,0
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладач (лектор): професор Роїк Олександр Сергійович

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

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

Розробник: Роїк Олександр Сергійович, д.х.н., доцент, професор, кафедра фізичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії

 Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № 6 від « 2 » травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від « 29 » червня 2022 р.

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« 29 » червня 2022 року

1. Мета дисципліни – надати студентам знання щодо основних принципів нерівноважної термодинаміки та прикладів їх застосування для опису різноманітних хімічних та біологічних процесів, які проходять поблизу (лінійна область) та далеко (нелінійна область термодинаміки), сформувавши теоретичне підґрунтя для розуміння процесів самоорганізації, які мають місце при отриманні сучасних конструкційних та функціональних матеріалів.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни: Студенти повинні знати вищу математику, неорганічну, органічну та фізичну хімію, вміти застосовувати знання вищої математики, фізичної, органічної та неорганічної хімії для аналізу та опису хімічних систем, володіти елементарними навичками диференціального та інтегрального числення.

3. Анотація навчальної дисципліни. Висвітлюються основні поняття нерівноважної термодинаміки. Розглядаються лінійна та нелінійна область проходження процесів. Наводяться теорема Онзагера, принципи Кюрі та мінімального виробництва ентропії, а також приклади їх застосування у хімічних системах. Даються основи теорії стійкості нерівноважних термодинамічних систем. Функції Ляпунова. На прикладі моделей хімічних коливальних систем розглядаються просторова та часова рівні самоорганізації у різноманітних хімічних та біологічних системах. Розглядається роль процесів самоорганізації у сучасному матеріалознавстві.

4. Завдання (навчальні цілі): розвинути уявлення про основний зміст принципів нерівноважної термодинаміки; надати необхідний теоретичний базис для розуміння процесів самоорганізації у лінійній та нелінійній області термодинаміки; навчити студентів здійснювати аналіз (лінійний аналіз стійкості) та моделювати хімічні коливальні реакції; розвинути уявлення про застосування процесів самоорганізації при розробці та отриманні сучасних конструкційних та функціональних матеріалів.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – вміти; 3 – автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1. Знання основних формул лінійної нерівноважної термодинаміки та їх застосування для опису термодифузійних, термоелектричних та електрокінетичних явищ.	Лекція, самостійна робота	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями та тести); перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	15
1.2. Знання основних принципів нелінійної термодинаміки та їх застосування для опису хімічних та біологічних процесів.	Лекція, самостійна робота	Контрольна робота; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	15
1.3. Знання про теоретичні основи самоорганізації у хімічних процесах, хімії матеріалів та біологічних системах	Лекція, самостійна робота	Контрольна робота; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	15
2.2. Застосовувати лінійний аналіз стійкості для аналізу автоколивальних хімічних процесів	Лекція, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи.	30
4.1. Здатність виконувати передбачені навчальною програмою розрахункове завдання та самостійне опрацювання літератури	самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	25

6. Схема формування оцінки

6.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **100 балів /60 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.3– **20/12 балів**.
2. Контрольна робота №2: РН 1.2, РН 1.3– **20/12 балів**.
3. Реферат №1: РН 1.1-1.2, РН 4.1 – **15/9 балів**.
4. Реферат №2: РН 1.3, РН 4.1 – **15/9 балів**.
5. Завдання самостійної роботи (розрахункова робота): РН 2.2, РН 4.1 - **30/18 балів**.

Підсумкове оцінювання (у формі заліку):

Під час заліку, якщо студент отримав від **60** до **100** балів, він отримує залік автоматично. Якщо студент набрав менше **60** балів, він здає письмовий залік, за який може отримати **20/12** балів.

Студент допускається до письмового заліку за умови, що він отримав не менше, ніж критично-розрахунковий мінімум **48** балів, при цьому виконав самостійне розрахункове завдання, а також написав два реферати.

6.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольні робота №1 та №2: не раніше **5 тижня** та **8 тижня** семестру, відповідно;

Написання рефератів №1-2 протягом семестру (не пізніше, ніж за **2 тижні** перед закінченням);

Персональні завдання для написання рефератів студенти отримують не пізніше, як за **8 тижнів** до закінчення семестру; Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

6.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
Зараховано / Passed	60–100
Не зараховано / Fail	0–59

7. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та самостійної роботи

№ лекції	Назва лекцій	Кількість годин	
		лекції	Самостійна робота
Змістовий модуль 1 "Лінійна нерівноважна термодинаміка"			
1	Перший і другий постулат термодинаміки у випадку відкритих систем. Концепція локальної рівноваги та межі її застосування в описі реальних (нерівноважних) процесів.	2	4
2	Виробництво ентропії у нерівноважних процесах, функція дисипації. Термодинамічні сили та потоки.	2	4
3	Лінійна область нерівноважної термодинаміки. Феноменологічні закони. Спряжені процеси та другий постулат термодинаміки.	2	4
4	Співвідношення взаємності Онзагера для кінетичних коефіцієнтів. Межі застосування теореми Онзагера. Вимоги симетрії при взаємодії потоків та сил (принцип Кюри-Пригожина).	2	4
5	Приклади застосування теорії Онзагера: термодифузія (ефект Соре), термоелектричні (ефекти Зеебека, Пальтьє, Томсона),	2	4

6	Розгляд термомагнітних (ефект Холла) та електрокінетичних (ефект Саксена) з точки зору нерівноважної термодинаміки. Біологічні мембрани.	2	4
7	Критерії еволюції для рівноважних та нерівноважних станів (лінійна область). Теорема про мінімум виробництва ентропії для стаціонарного стану, межі її застосування.	2	4
8	Застосування принципу мінімального виробництва ентропії для опису теплопровідності та кінетики хімічних процесів.	2	4
9	Теорія флуктуацій. Класична теорія стійкості Гіббса для рівноважних систем, приклади її застосування.	2	4
10	Стаціонарний стан термодинамічної системи та його стійкість поблизу рівноваги. Границі дії принципів лінійної нерівноважної термодинаміки.	2	4
	Модульна контрольна робота № 1		
Змістовий модуль 2 "Нелінійна нерівноважна термодинаміка"			
11	Стійкість стаціонарного стану у нелінійній області. Загальний критерій стійкості Ляпунова. Функції Ляпунова.	2	4
12	Лінійний аналіз стійкості хімічних реакцій та приклади його застосування до різноманітних хімічних систем.	2	4
13	Загальний критерій еволюції. Розгляд кінетичних фазових переходів. Впорядкована поведінка термодинамічних систем в лінійній та нелінійній областях нерівноважних процесів.	2	4
14	Загальні положення теорії катастроф. Класифікація особливих точок. Атрактори та їх типи. Основні положення теорії біфуркацій. Якісні властивості дисипативних структур в околі точки біфуркації. Виродження і просторова симетрія.	2	4
15	Дисипативні структури та явища самоорганізації. Приклади просторової, часової та просторово-часової самоорганізації. Обертання навколо стаціонарного стану, циклічні процеси. Стійкість дисипативних структур.	2	4
16	Процеси консервативної та дисипативної самоорганізації при розробці та отриманні сучасних конструкційних та функціональних матеріалів. Застосування нерівноважної термодинаміки в матеріалознавстві.	2	4
17	Прості автокаталітичні моделі хімічних реакцій: випадок двох проміжних продуктів, тримолекулярна модель (брюселятор). Біфуркація Хопфа. Вплив дифузії на стійкість брюселятора. Біфуркація Тюрінга.	2	4
18	Коливальні хімічні реакції типу Білоусова-Жаботинського. Модель Фалда-Креша-Нойеса даних реакцій.	2	4
19	Закон великих чисел та нерівноважна термодинаміка. Застосування ланцюга Маркова для опису нерівноважних процесів.	2	4
20	Самоорганізація і самоузгодженість у біологічних системах. Структурна нестійкість та біохімічна еволюція.	2	4
	Модульна контрольна робота № 2		
	ВСЬОГО	40	80

Загальний обсяг 120 год в тому числі:

Лекції – 40 год.

Самостійна робота – 80 год.

8. Рекомендована література:

Основна:

1. Булавін Л.А., Гаврюшенко Д.А., Сисоєв В.М. Термодинаміка: Навч. посібник – К.: ВПЦ “Київський університет”, 2004. –150 с
2. Л.А. Булавін, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сисоєв. Нерівноважна термодинаміка. Ч. 1. Рівняння дифузії. К.: ВПЦ Київський університет, 2003 -16 с.
3. Роїк О.С., Самсонніков О.В. Введення в нерівноважну термодинаміку: Навч. посібник. К.: ВПЦ “Київський університет”, 2007, - 54 с.

Додаткова:

4. Peter Atkins, Julio de Paula Atkins' Physical Chemistry. 8th Edition. New-York: W. H. Freeman and Company, 2006, 1072 p (ISBN: 0-7167-8759-8)
5. Dilip Kondepudi, Ilya Prigogine Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures, 2nd Edition. New-York: Wiley, 2014, 560 p (ISBN: 978-1-118-37181-7)

Контрольні запитання та завдання до змістового модуля 1.

1. Сформулюйте перший і другий постулат термодинаміки для відкритої системи.
2. Сформулюйте принцип локальної рівноваги та межі його застосування.
3. Що таке локальне виробництво ентропії та функція дисипації?
4. На основі запропонованих даних розрахуйте функції дисипації.
5. Сформулюйте співвідношення взаємностей Онзагера.
6. У чому полягає принцип симетрії Кюри-Пригожина?
7. Наведіть приклади застосування співвідношення взаємностей Онзагера та принципу Кюри-Пригожина?
8. Сформулюйте теорему про мінімум виробництва ентропії.
9. Які критерії еволюції рівноважних та близьких до рівноваги стаціонарних систем?
10. Вкажіть межі застосовності законів лінійної області термодинаміки нерівноважних процесів.

Контрольні запитання та завдання до змістового модуля 2

1. Сформулюйте загальний критерій стійкості Ляпунова.
2. Оцініть стійкість запропонованої хімічної системи (хімічні процеси якої задані у вигляді системи диференціальних рівнянь).
3. У чому полягає відмінність між консервативною та дисипативною самоорганізацією матерії? Наведіть приклади.
4. Що таке атрактор? Його властивості.
5. У чому полягає особливість точок біфуркації?
6. Наведіть приклад автокаталітичної хімічної реакції, яка може переходити в автоколивальний механізм.
7. У чому полягають біфуркації Хопфа та Тюрінга?
8. На прикладі моделі автокаталітичної хімічної реакції (“брюселятор”) покажіть можливість часової самоорганізації.
9. На прикладі моделі автокаталітичної хімічної реакції (“брюселятор”) покажіть можливість просторової самоорганізації.
10. Наведіть приклади самоорганізації при отриманні матеріалів.
11. Наведіть приклади самоорганізації в біологічних системах.