

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Кафедра теоретичної хімії

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Перший проректор

\_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

## **РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

### **Хімічна нерівноважна термодинаміка**

напряму підготовки 0703 хімія  
для спеціальності 8.070301 хімія  
спеціалізації „Комп’ютерна хімія та молекулярний дизайн”  
хімічного факультету

Кредитно-модульна система  
організації навчального процесу

Харків

Робоча програма навчальної дисципліни „Хімічна нерівноважна термодинаміка” для студентів за напрямом підготовки 0703 хімія, спеціальністю 8.070301 хімія.

Розробники: **Черановський Владислав Олегович, д. фіз-мат. н., професор**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної хімії

Протокол № \_ 2010 р.

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ Жолновач А.М.

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № \_\_\_ від “ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Голова \_\_\_\_\_

Юрченко О.І.

## 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів 3	Напрямок підготовки 0703 хімія	денна форма навчання
Модулів – 2	Спеціальність 8.070301 хімія	Рік підготовки: IV -й
Загальна кількість годин 64		Семестр 8 -й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 2		Лекції 16 год.
		Практичні 16 год.
		Самостійна робота 32 год.
	Вид контролю: екзамен	

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: сформувати уявлення про основні положення нерівноважної хімічної термодинаміки та кінетики, познайомити студентів з теоретичними основами сучасних методів нерівноважної термодинаміки та їх застосуванням в хімії.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

**знати:** основні закони нерівноважної термодинаміки і методи їх застосування для вирішення проблем моделювання фізико-хімічних процесів.

**вміти:** проводити розрахунки термодинамічних властивостей речовини у нерівноважному стані та інтерпретувати результати цих розрахунків.

## 3. Програма навчальної дисципліни

### Модуль I. Основи нерівноважної термодинаміки

Тема 1. Динамічні системи та їх еволюція

Відкриті термодинамічні системи. Нерівноважні стаціонарні стани. Рівняння матеріального балансу. Хімічна кінетика та її зв'язок з моделюванням поведінки відкритих систем.

Тема 2. Стаціонарні точки двовимірної динамічної системи.

Класифікація стаціонарних точок. Критерій стійкості Ляпунова.

### Тема 3. Лінійна нерівноважна термодинаміка

Термодинамічні сили та лави. Рівняння одновимірної дифузії та її застосування до опису еволюції відкритих хімічних термодинамічних систем. Закони Онзагера. Теорема про мінімальне виробництво ентропії в нерівноважному стаціонарному стані.

## Модуль 2. Динамічні системи далекі від рівноваги і фізична кінетика

### Тема 4. Вступ до синергетики

Коливання у хімічних реакціях. Автоколивання. Осцилятор Ван-дер-Поля. Граничний цикл та умови його появи. Солітонне рішення рівняння Кортевега де Вриза. Фрактали і хаотизація поведінки динамічної системи. Топологія фазового портрету динамічної системи. Локальні співвідношення еквівалентності Індeksi Пуанкаре. Біфуркації. Теорема Гленсдорфа-Пригожина.

### Тема 5. Елементи фізичної кінетики.

Функція розподілу в  $\mu$ -просторі. Густина вірогідності переходу та її зв'язок із функцією розподілу. Принцип детальної рівноваги. Рівняння Смолуховського. Рівняння Фоккера-Планка та рівняння дифузії. Рівняння кінетичного балансу. Кінетичне рівняння Больцмана.

## 4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
Л		п	лаб	інд	ср	
1	2	3	4	5	6	7
<b>Модуль 1</b>						
Тема 1	16	4	4			8
Тема 2	8	2	2			4
Тема 3	8	2	2			4
Разом за модулем 1	32	8	8			16
<b>Модуль 2</b>						
Тема 4	20	4	4			12
Тема 5	12	4	4			4
Разом за модулем 2	32	8	8			16
<b>Усього годин</b>	64	16	16			32

## 6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	ср	пір
Тема 1. Хімічна кінетика і нерівноважні системи.	8	
Тема 2. Дослідження стаціонарних точок модельних систем	4	
Тема 3. Закони Онзагера і моделювання поведінки	4	

термодинамічних систем поблизу рівноважного стану.		
Тема 4. Теоретичне дослідження коливальних процесів у хімічних реакціях. Граничні цикли та умови їх появи.	12	
Тема 5. Рівняння кінетичного балансу.	4	

### 7. Методи навчання

Лекції, виконання практичних робіт, самостійна робота.

### 8. Методи контролю

Рішення задач на практичних заняттях, екзамен.

### 9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота		Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1	Модуль 2	70	100
Теми 1-3	Теми 4, 5		
Розв'язання задач 15	Розв'язання задач 15		

Для допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен набрати не менше 15 балів за розв'язання тестових задач.

### Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	<b>A</b>	відмінно
80-89	<b>B</b>	добре
70-79	<b>C</b>	
60-69	<b>D</b>	задовільно
50-59	<b>E</b>	
1-49	<b>FX</b>	незадовільно

### 10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Науково-методична література.
3. Мультимедійні презентації лекційного матеріалу.

### 11. Рекомендована література

#### Базова

1. Черановский В.О. *Элементы термодинамики и кинетики неравновесных процессов.* – Харьков, ХНУ, 2003. – 40с.
2. Анищенко В.С. *Динамические системы.* – Соросовский образовательный журнал,

2002. <http://www.issep.rssi.ru/journal/>
3. Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С.Э. Теория колебаний. – М.: Наука, 1981. – 568 с.
  4. Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш. *Термодинамика, статистическая физика и кинетика*. – М.: Наука, 1972. – 399 с.

#### Допоміжна

1. Кудрявцев И.К. *Химические неустойчивости*. – М.: Изд. МГУ, 1987. – 255 с.
2. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф Т.1 – М.: Мир, 1984. – 350 с.
3. Трубецков Д.И. *Введение в синергетику. Хаос и структуры*. – М.: УРСС. 2004. – 235 с.
4. И. Пригожин, Д. Кондепуди *Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур*. – М.: Мир, 2002. – 461 с.