

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

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“ _____ ” _____ 20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Нерівноважна термодинаміка і проблеми екології

напряму підготовки 0703 хімія
для спеціальності 8.070301 хімія
спеціалізації „Хімічний контроль навколишнього середовища”
хімічного факультету

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу

Харків

Робоча програма навчальної дисципліни „Нерівноважна термодинаміка і проблеми екології” для студентів за напрямом підготовки 0703 хімія, спеціальністю 8.070301 хімія.

Розробник: **Єфімов Павло Вікторович, ст. викл. кафедри теоретичної хімії**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної хімії

Протокол № _ р.

Завідувач кафедри _____ Жолновач А.М.

“ _____ ” _____ 20__ 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 2	Напрямок підготовки 0703 хімія	денна форма навчання за вибором
Модулів – 2	Спеціальність 8.070301 хімія	Рік підготовки: IV -й
Загальна кількість годин 98		Семестр 7 -й
		Лекції 28 год.
		Практичні 14 год.
		Самостійна робота 28 год.
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2,5 самостійної роботи студента – 3	Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	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 екології.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: основні закони нерівноважної термодинаміки, як проводити теоретичне моделювання поведінки відкритих систем та, як інтерпретувати результати відповідних розрахунків;

вміти: формулювати науково-пошукові проблеми за програмою курсу, та логічно і чітко формулювати методи їх вирішення, застосовувати методи нерівноважної термодинаміки для опису екологічних систем та оптимізації хімічного моніторингу навколишнього середовища.

3. Програма навчальної дисципліни

Модуль 1. Лекції

Тема 1. Вступ. Нерівноважна термодинаміка і питання оптимізації хімічного моніторингу навколишнього середовища. Відкриті термодинамічні системи.

Тема 2. Поняття про динамічні системи та їх еволюцію. Нерівноважні стаціонарні стани. Рівняння матеріального балансу. Хімічна кінетика та її зв'язок з питаннями екології. Стаціонарні точки двовимірної динамічної системи та їх класифікація. Критерій стійкості Ляпунова.

Тема 3. Лінійна нерівноважна термодинаміка. Рівняння одновимірної дифузії та її застосування до моделювання екологічних систем. Закони Онзагера. Теорема про мінімальне виробництво ентропії в нерівноважному стаціонарному стані.

Тема 4. Вступ до синергетики. Лінійний осцилятор. Екологічний осцилятор. Автоколивання. Граничний цикл та умови його появи. Фрактали і хаотизація поведінки динамічної системи. Топологія фазового портрету динамічної системи. Індекси Пуанкаре. Біфуркації. Теорема Гленсдорфа-Пригожина.

Тема 5. Елементи фізичної кінетики. Функція розподілу в μ -просторі. Густина вірогідності переходу та її зв'язок із функцією розподілу. Принцип детальної рівноваги. Рівняння Смолуховського. Рівняння кінетичного балансу. Кінетичне рівняння Больцмана.

Модуль 2. Практичні заняття

Тема 6. Відкриті термодинамічні системи та процеси їх еволюції. Основні методи нерівноважної термодинаміки та кінетики та питання адекватного моделювання екологічних систем.

Тема 7. Хімічна кінетика та її зв'язок з еволюцією динамічних систем. Прогнозування появи нерівноважних стаціонарних станів та їх класифікація

Тема 8. Лінійна нерівноважна термодинаміка. Постулати Онзагера, рівняння матеріального балансу та теорема Пригожина щодо мінімального виробництва ентропії у стаціонарному стані. Застосування законів лінійної нерівноважної термодинаміки для моделювання поведінки відкритих систем.

Тема 9. Теорема Гленсдорфа – Пригожина та питання синергетики. Опис поведінки коливальної системи – екологічного осцилятора.

Тема 10. Кінетичні рівняння Смолуховського та Больцмана. Питанням сучасної фізичної кінетики та оптимізації екологічного моніторингу..

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
Модуль 1 – лекції						
Тема 1	4	2				2
Тема 2	12	6				6
Тема 3	16	8				8
Тема 4	16	8				8
Тема 5	8	4				4
Разом за модулем 1	56	28				28

Модуль 2 – практичні заняття						
Тема 6	3		1			2
Тема 7	9		3			6
Тема 8	12		4			8
Тема 9	12		4			8
Тема 10	6		2			4
Разом за модулем 2	42		14			28
Усього годин	98	28	14			56

5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
6	Відкриті термодинамічні системи та процеси їх еволюції. Основні методи нерівноважної термодинаміки та кінетики та питання адекватного моделювання екологічних систем.	1
7	Хімічна кінетика та її зв'язок з еволюцією динамічних систем. Прогнозування появи нерівноважних стаціонарних станів та їх класифікація	3
8	Лінійна нерівноважна термодинаміка. Постулати Онзагера, рівняння матеріального балансу та теорема Пригожина щодо мінімального виробництва ентропії у стаціонарному стані. Застосування законів лінійної нерівноважної термодинаміки для моделювання поведінки відкритих систем.	4
9	Теорема Гленсдорфа – Пригожина та питання синергетики. Опис поведінки коливальної системи – екологічного осцилятора.	4
10	Кінетичні рівняння Смолуховського та Больцмана. Питанням сучасної фізичної кінетики та оптимізації екологічного моніторингу.	2

6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	ср	пір
Тема 1. Вступ. Нерівноважна термодинаміка і питання оптимізації хімічного моніторингу навколишнього середовища. Відкриті термодинамічні системи	2	
Тема 2. Поняття про динамічні системи та їх еволюцію. Нерівноважні стаціонарні стани. Рівняння матеріального балансу. Хімічна кінетика та її зв'язок з питаннями екології. Стаціонарні точки двовимірної динамічної системи та їх класифікація. Критерій стійкості Ляпунова.	6	
Тема 3. Лінійна нерівноважна термодинаміка. Рівняння одновимірної дифузії та її застосування до моделювання екологічних систем. Закони Онзагера. Теорема про мінімальне виробництво ентропії в нерівноважному стаціонарному стані.	8	
Тема 4. Вступ до синергетики. Лінійний осцилятор. Екологічний осцилятор. Автоколивання. Граничний цикл та умови його появи.	8	

Фрактали і хаотизація поведінки динамічної системи. Топологія фазового портрету динамічної системи. Індеси Пуанкаре. Біфуркації. Теорема Гленсдорфа-Пригожина.		
Тема 5. Елементи фізичної кінетики. Функція розподілу в μ -просторі. Густина вірогідності переходу та її зв'язок із функцією розподілу. Принцип детальної рівноваги. Рівняння Смолуховського. Рівняння кінетичного балансу. Кінетичне рівняння Больцмана.	4	
Тема 6. Відкриті термодинамічні системи та процеси їх еволюції. Основні методи нерівноважної термодинаміки та кінетики та питання адекватного моделювання екологічних систем.	2	
Тема 7. Хімічна кінетика та її зв'язок з еволюцією динамічних систем. Прогнозування появи нерівноважних стаціонарних станів та їх класифікація	6	
Тема 8. Лінійна нерівноважна термодинаміка. Постулати Онзагера, рівняння матеріального балансу та теорема Пригожина щодо мінімального виробництва ентропії у стаціонарному стані. Застосування законів лінійної нерівноважної термодинаміки для моделювання поведінки відкритих систем.	8	
Тема 9. Теорема Гленсдорфа – Пригожина та питання синергетики. Опис поведінки коливальної системи – екологічного осцилятора.	8	
Тема 10. Кінетичні рівняння Смолуховського та Больцмана. Питанням сучасної фізичної кінетики та оптимізації екологічного моніторингу.	4	

7. Методи навчання

Лекції, виконання практичних робіт, самостійна робота.

8. Методи контролю

Складання контрольних за темами практичних робіт, екзамен.

9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота						Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1	Модуль 2					30	100
Теми 1-5	T6	T7	T8	T9	T10		
	10	10	10+10	10+10	10		

Для зарахування модуля 2 студент має набрати не менше, ніж 50% балів за кожною з тем 6-10. Для одержання допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен не менше 30 балів.

Шкала оцінювання

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

10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Електронний конспект лекцій.

11. Рекомендована література

1. Черановский В.О. *Элементы термодинамики и кинетики неравновесных процессов.* – Харьков, ХНУ, 2003. – 40с.
2. Рубин А.Б. *Биофизические методы в экологическом мониторинге.* – Соросовский образовательный журнал, 2000. <http://www.issep.rssi.ru/journal/>
3. Анищенко В.С. *Динамические системы.* – Соросовский образовательный журнал, 2002. <http://www.issep.rssi.ru/journal/>
4. Г.А. Кузнецов. *Экология и будущее.* (Анализ философских оснований глобальных прогнозов). – М.: Изд. МГУ. 1988. – 160 с.
5. Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш. *Термодинамика, статистическая физика и кинетика.* – М.: Наука, 1972. – 399 с.
6. Кудрявцев И.К. *Химические неустойчивости.* – М.: Изд. МГУ. 1987. – 255 с.
7. Трубецков Д.И. *Введение в синергетику. Хаос и структуры.* – М.: УРСС. 2004. – 235 с.
8. И. Пригожин, Д. Кондепуди *Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур.* – М.: Мир, 2002. – 461 с.