

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет

Кафедра хімії високомолекулярних сполук

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи

Павленко В.О.



« 30 » грудня 2018 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
Фізика полімерів

для студентів

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

Форма навчання **денна**

Навчальний рік **2018/2019**

Семестр **III**

Кількість кредитів ECTS **3,0 кредити (III семестр
програми підготовки за ОР «магістр»)**

Мова викладання, навчання та оцінювання
українська

Форма заключного контролю **іспит**

Викладач (лектор): **Студзинський Сергій Леонідович**

Пролонговано: на **2019/2020** н.р. С. Студзинський) « 3 » 04 2019 р.
на **2020/2021** н.р. _____ (_____) « _____ » _____ 20__ р.

КИЇВ – 2018

затверджена на засіданні кафедри хімії високомолекулярних сполук
Протокол № 12 від "11" травня 2018 року

Завідувач кафедри Савченко І.О. (Савченко І.О.)

Схвалено науково - методичною комісією факультету за напрямом підготовки
0401 Природничі науки, спеціальністю 04010101 Хімія

Голова науково-методичної комісії Амірханов В.М. (Амірханов В.М)

Протокол № ..6...від "30." 05 2018 року

Голова науково-методичної комісії Ройк О.С. (Ройк О.С.)

« 3 » 04 2019 року

Протокол №від "....." 20__ року

Голова науково-методичної комісії _____ (_____)

« ____ » _____ 20__ року

1. Мета дисципліни – вивчення теоретичних основ фізики полімерів – особливостей фізики процесів утворення полімерної форми речовини та фізичних процесів, зокрема кристалізації в полімерних системах, а також особливостей фізики полімерних фаз речовини різного типу та стабільності, умов їх існування та взаємного перетворення, процесів утворення та практичного застосування деяких з них.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

1. Знати основні поняття загальної, фізичної та органічної хімії, хімії полімерів та фізичної хімії високомолекулярних сполук.
2. Володіти базовими знаннями хімії високомолекулярних сполук та фізичної і органічної хімії.
3. Знати основні поняття фізико-хімічної кінетики та теорії фазових рівноваг.

3. Анотація навчальної дисципліни.

4. Завдання: розвиток теоретичних знань з фізики полімерного стану речовини, уявлень про особливості утворення та границі термодинамічної і кінетичної стабільності полімерних форм сполук легких елементів; набуття студентами практичних навичок у визначенні можливості одержання конкретного типу полімерних фаз та їх стабільності в певних умовах та можливих областей їх використання.

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час практичних робіт ПтК-1 та контроль самостійної роботи ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	1.1. Знати місце фізики полімерів в системі фізичних та хімічних наук	лекції, самостійні	ПтК-2, ПсК	5
1.2	1.2. Знати основні класи полімерів	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.3	1.3. Знати області застосування полімерів різного типу	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	15
2. Вміння				
2.1	2.1. Знайти у першоджерелах інформацію про енергетичні характеристики утворення певних полімерних фаз, і їх фізичні та хімічні властивості;	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
2.2	2.2. Визначати можливість утворення конкретного типу полімерної фази певного елементного складу в заданих Р,Т-умовах та області її термодинамічної і кінетичної стабільності.	лекції, самостійні	ПтК-1	20

3. Комунікація				
3.1	3.1. Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі фізики полімерів	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
3.2	3.2. Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	4.1. Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати пошуку	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10

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												
Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних галузей знань		+			+							
Здатність розуміти фізику полімерів та інтерпретувати результати фізичних та фізико-хімічних досліджень полімерних систем на рівні, достатньому для застосування у різних сферах хімії		+			+							
Знання хімічної термінології та номенклатури, спроможність описувати хімічні дані у символічному вигляді		+	+	+	+							
Знання основних типів хімічних реакцій та їх характеристики			+	+								
Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин		+	+	+	+							
Здатність описувати, пояснювати та передбачати властивості полімерних сполук		+	+	+	+							
Мати глибокі знання в галузі інформаційних і комунікаційних технологій, що застосовуються у професійній діяльності		+			+							
Базові знання принципів і процедур фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типового обладнання та приладів					+	+	+				+	+
Знати основ планування та проведення експериментів, методики та техніки приготування розчинів та реагентів					+	+	+				+	+

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Знання основних принципів термодинаміки та хімічної кінетики, здатність до їх застосування для рішення практичних задач	+			+							
Здатність описувати властивості аліфатичних, ароматичних, гетероциклічних та органометалічних сполук, пояснювати природу та поведінку функціональних груп в органічних молекулах		+	+	+	+	+					
Знання основних шляхів синтезу в органічній хімії, включаючи функціональні групові взаємоперетворення та формування зв'язку карбон-карбон, карбон-гетероатом		+	+	+	+	+					
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 добросовісність.								+	+	+	+
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.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.				+				+	+		
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії в прикладному полі, базові інженерно-технологічні навички.				+				+	+		
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.				+				+	+		

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
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. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.2. активність під час практичного заняття та оформлення результатів літературного пошуку;
- 1.3. написання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

іспит.

7.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Змістовий модуль 3		Іспит
	Min. – 12 балів	Max. – 20 балів	Min. – 12 балів	Max. – 20 балів	Min. – 12 балів	Max. – 20 балів	Min/Max. – 100 балів
Практична робота	1	2	1	2	1	2	
Виконання домашньої самостійної роботи	1	3	1	3	1	3	
Модульна контрольна робота 1	10	15					
Модульна контрольна робота 2			10	15			
Модульна контрольна робота 3					10	15	
Іспит							24/60
							100

До іспиту може бути допущений студент, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Фізика полімерів" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, написання модульних контрольних робіт), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістові модулі 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 іспита або критично-розрахунковий мінімум для допуску до іспита 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	
90 – 100	5	відмінно / excellent
85 – 89	4	добре / good
75 – 84		
65 – 74	3	задовільно / satisfactory
60 – 64		
0 – 59	2	не задовільно / fail

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

8.1 ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ

№	Теми лекції	лекції	С.Р.
Змістовий модуль 1 Флуктуаційна кінетика фізичних та хімічних процесів в полімерних системах.			
1	Лекція 1 Елементи флуктуаційної кінетики фізико-хімічних процесів.	2	10
2	Лекція 2 Критичні явища і необхідність врахування ролі флуктуацій в автокаталітичних процесах утворення та деструкції полімерів.	2	4
3	Лекція 3 Критичні явища при окисненні полімерів та вплив флуктуаційного фактору на кінетичний характер їх протікання.	2	6
4	Лекція 4 Застосування флуктуаційного підходу при описанні процесів кристалізації та споріднених процесів в макромолекулярних системах.	2	6
Змістовий модуль 2 Полімерна форма існування речовини – стабільні та метастабільні полімерні фази сполук легких елементів.			
5	Лекція 5 Стабільні та метастабільні фази в хімії та фізиці. Органічні речовини та молекулярні сполуки легких елементів – царина метастабільних фаз.	2	4
6	Лекція 6 Фазові та незворотні кінетичні перетворення в системах на основі сполук легких елементів. Рівноважна P,T-діаграма для фаз різного елементного складу елементів перших двох періодів таблиці Менделєєва.	2	6
7	Лекція 7 P,T-Область переважного існування полімерної форми речовини. Область метастабільних молекулярних форм та область існування щільних «атомарних» фаз сполук легких елементів.	2	4
8	Лекція 8 Схильність до переходу в полімерну форму більшості низькомолекулярних сполук легких елементів при високих тисках. Процеси бароіндукованої полімеризації молекулярних сполук легких елементів.	2	6
9	Лекція 9 Причини поширеності метастабільних низькомолекулярних форм серед сполук легких елементів.	2	4
Змістовий модуль 3 Полімерні фази високого тиску сполук «легких» елементів.			
10	Лекція 10 Спроможність утворення різних полімерних форм сполуками елементів 2-го періоду періодичної таблиці та аналіз умов їх існування.	2	6
11	Лекція 11 Полімерні фази високого тиску CO ₂ . Їх утворення, особливості структури та фізичних і фізико-хімічних властивостей.	2	4

12	Лекція 12 Полімерні фази високого тиску CO	2	6
13	Лекція 13 Кополімерні фази CO-N ₂	2	4
14	Лекція 14 Полімерні форми азоту.	2	4
15	Лекція 15 Порівняльний аналіз перспектив отримання та термодинамічної і кінетичної стабільності полімерних фаз різного елементного складу. Можливі їх застосування.	2	6
	Всього	30	80

8.2 ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ з/п	Теми практичних занять	Кількість годин
1	Вплив «атомарності» (дискретності) речовини на протікання макроскопічних фізико-хімічних процесів. Основи флуктуаційного підходу в кінетиці.	2
2	Врахування внеску флуктуаційного фактору при оцінюванні періоду індукції розгалуженого ланцюгового процесу. Інгібоване окиснення полімерів та пов'язані з ним критичні явища в макромолекулярних системах. Можливості керування стабілізацією полімерних систем.	2
3	Флуктуаційний характер кристалізації та коагуляції в полімерних системах. Задача про спонтанну кристалізацію переохолодженої рідини. Рівняння Колмогорова-Аврамі.	2
4	Бароіндукована полімеризація в системах різного елементного складу низькомолекулярних сполук легких елементів. Індуковані високим тиском фазові та нерівноважні кінетичні переходи в відповідних полімерних системах різного елементного складу.	2
5	Стабільні та метастабільні полімерні фази сполук легких елементів. Зв'язок між температурною областю існування стабільної фази та відповідних метастабільних фаз того ж елементного складу. Межа термодинамічної та кінетичної стабільності відповідних метастабільних фаз, та питання принципової можливості отримання метастабільної фази того чи іншого типу в заданих P,T-умовах. Речовина в екстремальних умовах – класифікація станів.	2

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Практичні роботи – **10 год.**

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

Основна: (Базова)

1. Katja Lindenberg, Gleb Oshanin and Masanori Tachiya - Chemical kinetics beyond the textbook: fluctuations, many-particle effects and anomalous dynamics // *Journal of Physics: Condensed Matter*.-2007.-19.-N6.-060301(Preface).
2. Зельдович Я.Б., Михайлов А.С. Флуктуационная кинетика реакций // *Успехи физических наук*.-1987.- 153.- №3.-С.-469-496.
3. Овчинников А.А., Тимашев С.Ф., Белый А.А. Кинетика диффузионно-контролируемых химических процес сов. М., Химия, 1986, 288с.
4. Mandelkern L. Crystallization of Polymers. Volume 1. Equilibrium. Second edition. Cambridge, Cambridge University Press, 2002, 448p.
5. Mandelkern L. Crystallization of Polymers. Volume 2. Kinetics and mechanisms, Second edition. Cambridge, Cambridge University Press, 2004, 478p.
6. Колмогоров А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов // *Изв. АН СССР. Сер. матем.*-1937.-1.-Вып.3.-С.355–359.
7. Hongge Tan, Bing Miao, and Dadong Yan - Conformation-assisted fluctuation of density and kinetics of nucleation in polymer melts // *The Journal of Chemical Physics*.-2003.-119.- N5.-PP. 2886-2891; doi: 10.1063/1.1590309.
8. Smith P.E., Matteoli E., O'Connell J.P. Fluctuation Theory of Solutions: Applications in Chemistry, Chemical Engineering, and Biophysics. Boca Raton, CRC Press, 2013, 400p.
9. Oshanin G.S. and Burlatsky S.F. Fluctuation-induced kinetics of reversible coagulation // *J. Phys. A: Math. Gen.*-1989.-22.-L973-L976.-Letter to the editor.
10. Денисов Е.Т. Окисление и деструкция карбоцепных полимеров. Л., Химия, 1990, 288с.
11. Бражкин В.В. Метастабильные фазы, фазовые превращения и фазовые диаграммы в физике и химии // *Успехи физических наук*.-2006.- 176.- №7.-С.-745-750.
12. Бражкин В.В. Межчастичное взаимодействие в конденсированных средах: элементы «более равные, чем другие» // *Успехи физических наук*.-2009.- 179.- №4.-С.-393-401.
13. Brazhkin V.V., Lyapin A.G. Metastable high-pressure phases of low-Z compounds: creation of a new chemistry or a prompt for old principles? // *Nature Mater.*- 2004.- 3(issue 8).-PP.497-500.
14. Бражкин В.В., Волошин Р.Н., Ляпин А.Г., Попова С.В. Фазовые равновесия в частично открытых системах под давлением: разложение стехиометрического оксида GeO₂ // *Успехи физических наук*.-2003.- 173.- №12.-С.-1359-1366.

Додаткова:

1. Быков В.И. Моделирование критических явлений в химической кинетике. М., КомКнига, 2006, 328с.
2. Эмануэль Н.М., Бучаченко А.Л. Химическая физика молекулярного разрушения и стабилизации полимеров. М., Наука, 1988, 368с.
3. Туницкий Н.Н., Каминский В.А., Тимашев С.Ф. Методы физико-химической кинетики. М., Химия, 1972, 198с.
4. Шляпников Ю.А. Антиокислительная стабилизация полимеров // *Успехи химии*.- 1981.-50.-№6.-С.-1105–1140.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 томах. Том 10. Физическая кинетика. М., ФИЗМАТЛИТ, 2002, 536 с.

6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 томах. Том 5. Статистическая физика. Часть 1. М., ФИЗМАТЛИТ, 2002, 616 с.
7. Леонтович М.А. Введение в термодинамику. Статистическая физика. М., Наука, 1983, 416с.
8. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И. Химическая кинетика. М., Химия, 2000, 568с.
9. Journal of Physics: Condensed Matter.-2007.-19.-N6.- 060301(Preface)+Papers 065101-065150.
10. Yuichi Togashi and Kunihiko Kaneko - Switching dynamics in reaction networks induced by molecular discreteness // Journal of Physics: Condensed Matter.-2007.-19.-N6.-065150.
11. Ji-Hyun Kim, Dann Huh, Jinuk Lee, Sangyoub Lee, Jaeyoung Sung, Kazuhiko Seki and M. Tachiya - Subdiffusion-assisted reaction kinetics in disordered media // Journal of Physics: Condensed Matter.-2007.-19.-N6.-065116.
12. Tiwari Bhupendra, Kishore S., Marina Ninoslav, Bellucci Stefano - Fluctuation Theory in Chemical Kinetics // *Condens. Matter.*-2018.-3(issue 4).-49 (doi:10.3390/condmat3040049).
13. Фортов В.Е. Лекции по физике экстремальных состояний. М., Издательский дом МЭИ, 2016, 234с.
14. Киржниц Д.А. Экстремальные состояния вещества (сверхвысокие давления и температуры) // Успехи физических наук.-1971.- 104.- №3.-С.-489-508.
15. Фортов В.Е. и др. (ред.) - Физика экстремальных состояний вещества – 2002. Сборник. Черноголовка, 2002, 191с.
16. Фортов В.Е. Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе (сверхвысокие давления и температуры) // Успехи физических наук.-2009.- 179.- №6.-С.-653-687.
17. Lucia Ciabini, Mario Santoro, Roberto Bini, and Vincenzo Schettino - High pressure reactivity of solid benzene probed by infrared spectroscopy // Journal of Chemical Physics.-2002.-116.-N7.-PP.2928-2935.
18. Lucia Ciabini, Mario Santoro, Roberto Bini and Vincenzo Schettino - High Pressure Photoinduced Ring Opening of Benzene // Physical Review Letters.-2002.-88.-issue 8.-PP.085505-1 - 085505-4.
19. Evans W.J., Lipp M.J., Yoo C.-S., Cynn H., Herberg J.L., and Maxwell R.S. Pressure-Induced Polymerization of Carbon Monoxide: Disproportionation and Synthesis of an Energetic Lactonic Polymer // Chem. Mater.-2006.-18.-PP.2520–2531.
20. Young-Jay Ryu, Minseob Kim, Jinhyuk Lim, Ranga Dias, Dennis Klug, and Choong-Shik Yoo - Dense Carbon Monoxide to 160 GPa: Stepwise Polymerization to Two-Dimensional Layered Solid // The Journal of Physical Chemistry C.-2016.-120.-48.-PP.27548-27554.
21. Lipp M.J., Evans W.J., Baer B.J., Yoo Choong-Shik - High-energy-density extended CO solid // Nature Materials.-2005.-4.-issue 3.-PP.211-215.
22. Bernard S., Chiarotti G., Scandolo S., Tosatti E. Decomposition and Polymerization of Solid Carbon Monoxide under Pressure // Physical Review Letters.-1998.-81.-issue 10.-PP.2092-2095.
23. Choong-Shik Yoo - Barochemistry to Multifunctional High Energy Density Solid: Extended Phases of N₂, CO, and N₂ + CO at High Pressures // MRS Advances.-2017.-2.-issue 48.-PP.2581-2586.
24. Choong-Shik Yoo, Minseob Kim, Jinhyuk Lim, Young-Jay Ryu, and Batyrev I.G. Copolymerization of CO and N₂ to Extended CON₂ Framework Solid at High Pressures // The Journal of Physical Chemistry C.-2018.-122.-24.-PP.13054-13060.

25. Yoo C.S., Cynn H., Gygi F., Galli G., Iota V., Nicol M., Carlson S., Hausermann D., and Mailhiot C. Crystal Structure of Carbon Dioxide at High Pressure: “Superhard” Polymeric Carbon Dioxide // *Phys. Rev. Lett.*-1999.-83.-PP.5527–5530.
26. Valentin Iota, Choong-Shik Yoo, Jae-Hyun Klepeis, Zsolt Jenei, William Evans and Hyunhae Cynn - Six-fold coordinated carbon dioxide VI // *Nature Materials*.- 2007.- 6.-PP.34–38.
27. Park J.-H., Yoo C.S., Iota V., Cynn H., Nicol M.F., and Le Bihan T. Crystal structure of bent carbon dioxide phase IV // *Physical Review B*.-2003.-68.-issue 1.-PP. 014107-1 - 014107-9.
28. Oliver Tschauner, Ho-kwang Mao, and Russell J. Hemley - New Transformations of CO₂ at High Pressures and Temperatures // *Physical Review Letters*.-2001.-87(N7).- PP.075701-1 - 075701-4.
29. Choong-Shik Yoo - Physical and chemical transformations of highly compressed carbon dioxide at bond energies // *Phys. Chem. Chem. Phys.*-2013.-15.-issue 21.-PP. 7949-7966.
30. Minseob Kim, Young-Jay Ryu, Jinhyuk Lim and Choong-Shik Yoo - Transformation of Molecular CO₂-III in Low-Density Carbon to Extended CO₂-V in Porous Diamond at High Pressures and Temperatures // *J. Phys.: Cond. Matt.*-2018.-30.-314002.
31. Lipp M.J., Park Klepeis J., Baer B.J., Cynn H., Evans W.J., Iota V., and Yoo C.-S. Transformation of molecular nitrogen to nonmolecular phases at megabar pressures by direct laser heating // *Physical Review B*.-2007.- 76.-014113.-PP.014113-1 - 014113-5.
32. Choong-Shik Yoo, Dane Tomasino, Jesse Smith, and Minseob Kim - High energy density nitrogen-rich extended solids / *AIP Conference Proceedings*.- 2017.-1793.- 130007.-PP.130007-1 - 130007-4;
33. Eremets M.I., Gavriluk A.G., Serebryanaya N.R., Trojan I.A., Dzivenko D.A., Boehler R., Mao H.K., and Hemley R.J. Structural transformation of molecular nitrogen to a single-bonded atomic state at high pressures // *The Journal of Chemical Physics*.-2004.-121.-No.22.-PP.11296-11300; doi: 10.1063/1.1814074.
34. Dane Tomasino, Minseob Kim, Jesse Smith, and Choong-Shik Yoo - Pressure-Induced Symmetry-Lowering Transition in Dense Nitrogen to Layered Polymeric Nitrogen (LP-N) with Colossal Raman Intensity // *Physical Review Letters*.-2014.- 113.-Issue 20.-PP.205502-1 - 205502-5.
35. Eremets M.I., Gavriluk A.G., Trojan I.A., Dzivenko D.A., Boehler R. Single-bonded cubic form of nitrogen // *Nature Materials*.-2004,-3.-issue 8.-PP.558-563.
36. Bondarchuk S.V., Minaev B.F. Super high-energy density single-bonded trigonal nitrogen allotrope - a chemical twin of the cubic gauche form of nitrogen // *Physical Chemistry Chemical Physics*.-2017.-19.-issue 9.-PP.6698–6706.

ПЕРЕЛІК ЗАПИТАНЬ НА ІСПИТ

1. Що таке флуктуаційна кінетика? В чому полягає основна відмінність флуктуаційного підходу від «класичного» підходу до описання кінетики фізико-хімічних процесів?
2. В яких випадках виникає необхідність застосування флуктуаційного підходу до описання кінетики фізико-хімічних процесів? Наведіть характерний приклад.
3. Макроскопічний прояв впливу фактору «молекулярної дискретності» («атомістичності») на характер протікання фізико-хімічних процесів (зокрема в макромолекулярних системах).
4. В яких випадках флуктуаційний та «класичний» підходи до описання кінетики фізико-хімічних процесів повинні призводити до тих самих результатів? Відповідь обґрунтуйте.
5. Асимптотичні кінетичні закономірності, до яких може призводити наявність флуктуацій (зокрема термодинамічних) в системі хімічно взаємодіючих частинок або фізичних активних центрів (наприклад у випадку фотофізичних або радіаційно-стимульованих процесів в макромолекулярній системі).
6. На прикладі розгалуженого ланцюгового процесу продемонструйте можливі відмінності результатів оцінки очікуваної величини періоду індукції (вибуху) відповідного процесу в рамках «класичного» кінетичного (використовуючи кінетичну схему за Семеновим) та флуктуаційного підходів. В яких випадках ця різниця буде максимальною? Чому в даному випадку «класичний» підхід дає невірний результат (тобто що він не враховує) і необхідно застосовувати саме флуктуаційний підхід?
7. Флуктуаційний характер кінетики швидких фізико-хімічних процесів в макромолекулярних системах в склоподібному стані.
8. Асимптотика наближення до рівноваги та флуктуації концентрації в оборотних фізико-хімічних процесах в макромолекулярних системах.
9. Роль вихідних нерівноважних флуктуацій просторового розподілу активних центрів процесу в кінетиці «дифузійного розтікання» частинок в полімерній системі.
10. Просторові структури, що можуть утворюватися за рахунок зміни просторового розподілу концентрацій реакційних центрів в флуктуаційно-контрольованих фізико-хімічних процесах в макромолекулярній системі. Їх фрактальний характер.
11. Флуктуаційний фактор в автокаталітичних процесах деструкції полімерів. Наведіть характерний приклад.
12. Критичні явища при окисненні полімерів та прояви флуктуаційного характеру їх протікання.
13. Інгібоване окиснення полімерів та пов'язані з ним критичні явища в макромолекулярних системах.
14. Флуктуаційний підхід до опису кінетики інгібованого окиснення полімерів, як ланцюгового процесу з виродженим розгалуженням.
15. Флуктуаційний характер кристалізації та коагуляції в полімерних системах.
16. Задача про спонтанну кристалізацію переохолодженої рідини – флуктуаційний підхід. Рівняння Колмогорова-Аврамі.
17. Стабільні і метастабільні фази в хімії та фізиці.
18. Що таке метастабільні фази? Які фактори забезпечують можливість відносно довгого їх існування? (Інакше кажучи, що заважає їх швидкому перетворенню у відповідні стабільні стани?).
19. Термодинамічна та кінетична стабільність фаз речовини.
20. Поясніть можливість реалізації в багатьох випадках зворотніх за своїм характером фазових перетворень з виконанням (в масштабі часу, що може значно перевищувати масштаб часу експерименту) всіх законів рівноважної термодинаміки (перетворення відповідають рівності вільної енергії Гіббса для відповідних фаз) в метастабільних за своєю природою фазах, перехід яких до стану, що відповідає абсолютному мінімуму вільної енергії Гіббса для системи даного елементного складу є незворотним.

21. Відомо, що ряд метастабільних модифікацій сполук легких елементів, наприклад фулерит, взагалі не мають області стабільності при будь-яких тисках і температурах. У певному інтервалі P, T -параметрів тверді метастабільні фази можуть існувати необмежено довго в порівнянні з будь-якими розумними експериментальними часами. Більш того, такі метастабільні фази при зміні тиску і температури можуть зазнавати оборотних фазових перетворень з виконанням законів рівноважної термодинаміки. При таких фазових переходах може зворотньо змінюватися, зокрема, структура речовини (наприклад, одно- і двовимірна полімеризація фулериту C_{60} при нагріванні під тиском). Поясніть, чим обумовлена кінетична стабільність (можливість необмежено довгого існування в порівнянні з масштабом часу експерименту) фулериту в досить широкій області значень P, T -параметрів, тобто що саме заважає переходу «вкрай метастабільної» фази фулериту до відповідних стабільних станів того ж елементного складу, що відповідають абсолютному мінімуму енергії Гіббса системи? Поясніть зворотній характер ряду фазових перетворень в цій, принципово метастабільній за своєю природою системі.
22. Причини поширеності метастабільних низькомолекулярних форм (фаз) серед сполук легких елементів.
23. Яка система відповідає за звичайних умов рівноважному стабільному стану елементного складу CH_2 (на рівноважній P, T -діаграмі)?
24. Зобразіть схематично та прокоментуйте енергетичну діаграму температурної залежності вільної енергії Гіббса для системи елементного складу $C - H$: а) для випадку низьких T ; б) для випадку високих T .
25. Які сполуки присутні на рівноважній концентраційній діаграмі в системі $C - O$ при нормальному тиску?
26. Для багатьох низькомолекулярних сполук легких елементів, зокрема для більшості органічних сполук вуглецю, за звичайних умов відповідні полімерні форми є більш низьколежачими за енергією модифікаціями. Поясніть чому в умовах помірних тисків і температур ($T < 500 \text{ K}$, $P < 1 \text{ ГПа}$) без застосування спеціальних технік, як правило, не відбувається перетворення вищезазначених низькомолекулярних або низькокоординуваних сполук легких елементів у відповідні полімеризовані форми?
27. Стабільні та метастабільні молекулярні фази сполук легких елементів в умовах сильного стиснення. Поведінка, загальна характеристика, кінетична стабільність.
28. Рівноважні фазові та незворотні кінетичні перетворення молекулярних фаз «легких» елементів.
29. Речовина в екстремальних умовах (надвисокі тиски) - класифікація станів та місце полімерної форми речовини серед них.
30. Наведіть схематичне зображення узагальненої P, T -діаграми перетворень молекулярних фаз характерної для сполук «легких» елементів (елементів перших двох періодів таблиці Менделєєва). На які три зони можна умовно її розділити? Охарактеризуйте кожен з цих областей з точки зору форм існування в них сполук відповідного елементного складу, зокрема, з точки зору термодинамічної та кінетичної стабільності станів речовини, що відповідають зазначеним зонам на P, T -діаграмі, а також характеру можливих переходів між цими станами.
31. На узагальненій P, T -діаграмі перетворень молекулярних фаз сполук «легких» елементів в області помірних температур та тисків ($T \sim 10-1000 \text{ K}$, $P < 1-10 \text{ ГПа}$) більшість молекулярних сполук легких елементів знаходяться в метастабільному стані. Вкажіть, які фактори в даному випадку обумовлюють існування відповідних сполук саме в таких формах. Енергетичним внеском якої складової майже повністю визначається величина вільної енергії Гіббса відповідних фаз в цій області?
32. В умовах підвищених тисків $P > 1 - 10 \text{ ГПа}$ (і помірних температур $T < 500 \text{ K}$), починають відбуватися перетворення багатьох низькомолекулярних або низькокоординуваних сполук легких елементів, зокрема більшості органічних сполук вуглецю, у відповідні більш низьколежачі за енергією полімерні форми. Які фактори обумовлюють можливість реалізації відповідних переходів? Яка природа цих переходів?

33. Охарактеризуйте область P,T-діаграми, яка відповідає існуванню сполук більшості легких елементів переважно у полімерній формі (формах).
34. Чим нерівноважні кінетичні перетворення відрізняються від звичайних «класичних» фазових переходів? Наведіть характерний приклад такого кінетичного перетворення відомої Вам молекулярної фази у відповідну полімерну модифікацію.
35. В умовах надвисоких тисків $P > 20 - 50$ ГПа (і помірних температур $T \sim 10 - 1000$ К) більшість відповідних полімерних модифікацій (фаз) вже не будуть відповідати термодинамічно стабільним станам і зазнають перетворення у більш щільні фази відповідного складу - так звані «щільні атомарні фази». Які фактори спричиняють відповідних переходів? Зміною внеску якої складової вільної енергії Гіббса і чому саме здебільшого обумовлені такі переходи? Охарактеризуйте природу відповідних щільних атомарних фаз (що вони являють собою?). Якщо можете наведіть конкретний приклад такої фази. Чому такі фази іноді називають металічними?
36. В умовах помірних температур ($T \sim 10-1000$ К) узагальнену P,T-діаграму перетворень молекулярних фаз сполук «легких» елементів умовно можна розділити на три зони: I – зону помірних тисків ($P < 1-10$ ГПа), зону II проміжних тисків ($P \sim 1-20$ ГПа) та зону III - надвисоких тисків ($P > 20-50$ ГПа). Вкажіть, які фактори обумовлюють існування відповідних сполук саме в тих чи інших формах в кожній з зон I-III. Який характер мають переходи із зони I в зону II (I→II) та з зони II в зону III (II→III) відповідної діаграми для більшості молекулярних сполук легких елементів?
37. Щільні атомарні та «металічні» фази речовини (на прикладі сполук елементів перших двох періодів періодичної системи Д.І. Менделєєва). Визначення, приклади, загальні властивості, границі області існування та характеристики фазових рівноваг.
38. Вплив часткової «відкритості» системи для легких компонентів в умовах високих тисків на фазові рівноваги за участю відповідних молекулярних фаз сполук легких елементів в ній.
39. Індукована високим тиском (бароіндукована) «полімеризація» простих молекулярних сполук легких елементів (елементів перших двох періодів таблиці Менделєєва) – причини, особливості та її значення для науки і технології.
40. Індуковані високим тиском перетворення вуглеводнів - рушійна сила, природа процесу, кінцевий результат та проміжні полімерні форми.
41. Процеси високобаричних перетворень ненасичених вуглеводнів на прикладі високобаричних перетворень бензену. Особливості механізму процесу, кінцевий результат та проміжні полімерні форми. Що є рушійною силою відповідних перетворень? Чи є всі такі перетворення рівноважними фазовими перетвореннями в класичному розумінні? Відповідь обґрунтуйте.
42. Фотоіндуковані високобаричні перетворення бензену. Причини, кінцевий результат, проміжні полімерні форми та особливості механізму процесу.
43. Бароіндукована полімеризація в системах різного елементного складу низькомолекулярних сполук легких елементів.
44. Індуковані високим тиском фазові та нерівноважні кінетичні переходи в полімерних системах різного елементного складу.
45. Полімерні фази високого тиску CO. Особливості їх утворення, структура та фізико-хімічні властивості.
46. Чи є перехід молекулярної фази CO у відповідні полімерні фази високого тиску рівноважним фазовим перетворенням в класичному розумінні? Відповідь обґрунтуйте.
47. Високоенергетичні матеріали на основі полімерних фаз високого тиску CO. Характеристики та можливості застосування.
48. Полімерні фази високого тиску CO₂ - структура, особливості утворення та умови існування; фізико-хімічні властивості.
49. Високоенергетичні матеріали на основі полімерних фаз високого тиску CO₂. Загальні характеристики та можливості застосування.

50. Кополімерні фази високого тиску азоту, легованого СО - структура, умови існування, особливості утворення та фізико-хімічні властивості.
51. Електронні та оптичні властивості полімерних модифікацій високого тиску СО, а також високобаричних кополімерних фаз СО – азот.
52. Переходи метал-діелектрик в полімерних фазах високого тиску СО, а також високобаричних кополімерних фазах СО – азот.
53. Поясніть забарвленість деяких полімерних модифікацій високого тиску СО, а також високобаричних кополімерних фаз СО – азот.
54. Високоенергетичні матеріали на основі кополімерних фаз високого тиску СО-азот. Характеристики та можливі застосування.
55. Полімерні фази високого тиску азоту - структура, особливості утворення та фізико-хімічні властивості.
56. Полімерний азот - синтез, будова, властивості та перспективи практичного застосування.
57. Полімерний азот як високоенергетичний екологічно безпечний матеріал.
58. Вважається, що метастабільні фази високого тиску (зокрема полімерні) не можуть існувати значний час при температурах вище $T_{\text{топлення}}$ відповідної стабільної фази того ж елементного складу. Чи можливе існування відповідних метастабільних фаз при $T > T_{\text{топлення}}$ зазначеної стабільної фази протягом коротких, але все ж помітних часів? Якщо так, то за рахунок яких факторів? Відповідь обґрунтуйте.
59. Використовуючи відповідну схематичну діаграму температурної залежності вільної енергії Гіббса для стабільної кристалічної фази певного елементного складу та її розтопу покажіть (та поясніть чому), що якщо існують додаткові метастабільні кристалічні фази того ж елементного складу, то температура топлення $T_{\text{топл}}^*$, що відповідає рівновазі між метастабільною твердою фазою і стабільної рідиною буде завжди нижче ніж рівноважна температура топлення $T_{\text{топл}}$ відповідної стабільної кристалічної фази.
60. Вважається, що метастабільна фаза не може існувати протягом достатньо довгого часу при температурах вищих T топлення відповідної стабільної фази того ж елементного складу. Як узгоджується з цим твердженням той факт, що температурна область термічної стабільності звичайного поліетилену значно перевищує таку для конденсованих фаз молекулярного етилену? Відповідь обґрунтуйте. Чим принципово обмежена зверху температурна область (термічної) стабільності поліетилену? Відповідь обґрунтуйте.
61. Чому лінія (крива) ліквідусу системи метан-графіт принципово обмежує зверху температурну область (термічної) стабільності поліетилену? Відповідь обґрунтуйте.
62. Що є з принципової точки зору верхньою межею температурної області (термічної) стабільності поліпропілену? Відповідь обґрунтуйте.
63. Що є з принципової точки зору верхньою межею температурної області кінетичної стабільності фази певного елементного складу? Відповідь обґрунтуйте.
64. Вважається, що метастабільні речовини, зокрема метастабільні полімерні фази високого тиску, не можуть існувати значний час при температурах вище температури топлення відповідної стабільної фази того ж елементного складу. У той же час, якщо вихідна молекулярна фаза сама є метастабільною, то більш низьколежачі за енергією модифікації, зокрема відповідні полімерні фази високого тиску, отримані з молекулярної фази – часто можуть існувати в метастабільному стані при температурах вище температури топлення вищезазначеної молекулярної фази. Обґрунтуйте останнє твердження. Наведіть характерний приклад такої метастабільної фази полімерної природи.
65. Якщо вихідна молекулярна фаза певного елементного складу сама є метастабільною, то чи можуть існувати при $T > T_{\text{топлення}}$ вихідної молекулярної фази інші більш низьколежачі за енергією метастабільні модифікації (фази) того ж елементного складу, що утворюються з даної молекулярної фази? Відповідь обґрунтуйте.
66. Легкі елементи перших двох періодів періодичної таблиці утворюють ряд «простих» низькомолекулярних сполук (H_2 , CO , CO_2 , N_2 , C_2N_2 , NO_2 , N_2O , CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_6H_6 ,

гліцерин та ін.), значна кількість яких при високих тисках зазнають перетворення у полімерні тверді фази з ковалентними або іонними зв'язками, у той час як при подальшому підвищенні тиску вони перетворюються на відповідні металічні фази. Якщо порівняти енергії молекулярних і полімерних форм для ряду сполук легких елементів (наприклад, С, N, В, О) в умовах низьких та високих тисків, то до яких висновків можна прийти і на які дві групи в цьому сенсі можна поділити ці елементи?

67. Охарактеризуйте (порівняйте) схильність до утворення відповідних полімерних форм низькомолекулярними або низькокоординованими сполуками різних елементів 2-го періоду періодичної таблиці в умовах високих та надвисоких тисків.
68. Явище інверсії енергетичних рівнів (на діаграмі вільної енергії Гіббса) молекулярного та полімеризованого станів для азоту і кисню при підвищенні тиску.
69. Вкажіть температурні умови, за яких, на Вашу думку, потенційно можуть існувати в метастабільному стані при нормальному тиску відповідні «металічні» фази високого тиску водню і полімерна модифікація азоту? Відповідь обґрунтуйте.
70. Дайте обґрунтовану відповідь на питання - чи можливе збереження полімерних модифікацій (фаз) високого тиску на основі легких елементів при температурах, що помітно перевищують температури топлення або кипіння вихідних молекулярних фаз? Якщо не можете дати однозначної відповіді, наведіть відповідні аргументи за і проти такої можливості.
71. Наведіть підстави вважати ряд полімерних модифікацій (фаз) високого тиску, що утворюються з простих молекулярних сполук легких елементів потенційно перспективними для використання в якості високоенергетичних матеріалів. Відповідь обґрунтуйте. Якщо можете, наведіть конкретний приклад відповідної полімерної фази.
72. Чи можливо хоча б для деяких молекулярних фаз «простих» сполук легких елементів за звичайних умов низьких тисків та температур отримати відповідні полімеризовані форми, які зазвичай відповідають високим тискам, тобто є фазами високого тиску того ж елементного складу? Якщо так, то яким чином (із застосуванням яких саме прийомів)? Наведіть конкретний приклад.