

Аннотация

рабочей программы учебной дисциплины «Статистическая термодинамика конденсированных систем»

Направление подготовки: 04.04.01. «Химия» (уровень магистратуры)
профиль «Физическая химия»

Составитель аннотации к.т.н., профессор Арчакова Р.Д.

Кафедра химии

Цель изучения дисциплины	Целями изучения дисциплины «Статистическая термодинамика конденсированных систем» являются: <ul style="list-style-type: none">- описание систем строения молекул и механизмы их взаимодействия с другими молекулами с микроскопической точки зрения, представляемой квантовой механикой и приложениями классической механики к кинетической теории;- научить студентов глубже понять законы термодинамики и основные представления.
Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры	<p>Дисциплина «Статистическая термодинамика конденсированных систем» относится к Блоку 1, к части, формируемой участниками образовательных отношений; изучается в 1-ом семестре.</p> <p>Дисциплина «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля – физической химии, коллоидной химии, химической технологии, физико-химических методов исследования.</p> <p>Перечень дисциплин, необходимых для изучения дисциплины: неорганическая химия, квантовая химия, физика, математика.</p>
Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины	<p>В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:</p> <ul style="list-style-type: none">- способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий (УК-1);- способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов (ОПК-4);- способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работы выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук (ПК-3).
Содержание дисциплины	<p>Раздел 1. Основные положения статистической термодинамики.</p> <p>Тема 1. Предмет и задачи статистической</p>

термодинамики.

Основные понятия и определения. Микро- и макросостояния. Канонические переменные и фазовое пространство классической механической системы, фазовая точка, фазовая траектория. Функция плотности распределения вероятностей, ее свойства. Статистический ансамбль. Постулаты статистической термодинамики.

Методы описания систем микрочастиц. Классическое квантовомеханическое описание системы микрочастиц. Теорема Луивилля, ее обобщение для квантовых систем. Проблема обоснования постулатов статистической термодинамики. Эргодичность, квазиэргодичность, «размешиваемость» (по Н.С.Крылову). Н-теорема Больцмана, ее современная трактовка, связь со вторым началом термодинамики. Распределения Гиббса. Общая схема вывода для квантовомеханических систем. Микроканоническое, каноническое и большое каноническое распределения. Переход к классической статистике.

Тема 2. Статистическая физика открытых систем.

Большое каноническое распределение и большая статистическая сумма. Применение большого канонического распределения для определения среднего числа частиц в открытой системе. Выражение давления в открытой системе через большую статистическую сумму. Квантовый идеальный газ. Распределение Больцмана для больших числа частиц в данном квантовом состоянии. Распределение Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна. Понятие о вырожденном и невырожденном газе.

Флуктуации. Общая формула для вероятности флуктуации в изолированной системе. Понятие о мере (средней величине) флуктуации и относительной флуктуации. Теорема о зависимости относительной флуктуации от числа независимых частей системы. Распределение Гаусса для одного или нескольких величин. Флуктуации в системе, находящейся в термостате. Флуктуации основных физических величин. Связь флуктуации энергии и теплоемкости. Особенности флуктуации энергии при фазовых переходах и при низких температурах. Флуктуация плотности. Флуктуации в открытой системе. Формула для величины флуктуации числа частиц. Формула Пуассона.

Тема 3. Применение методов статистической термодинамики к задаче расчета термодинамических функций идеального газа.

Связь термодинамических функций с молекулярными параметрами. Выражение статистической суммы идеального газа через статистическую сумму молекул. Возможность приближенного разделения уровней энергии молекул на составляющие. Колебательные, вращательные и электронные уровни энергии молекул. Представление статистической суммы молекул в виде произведения поступательной,

вращательной, колебательной и электронной статистических сумм. Возможность классического расчета поступательной статистической суммы, формулы для поступательной статистической суммы.

Расчеты статистических сумм разных форм молекулярного движения. Расчет колебательной статистической суммы молекул в гармоническом приближении. Задача расчета вращательной статистической суммы и выражения для вращательной статистической суммы двухатомных молекул. Задача расчета электронной статистической суммы и возможность выражения при не очень высоких температурах электронной статистической суммы основного состояния. Формула для энтропии одноатомного идеального газа (формула Сакура-Тетроде) и сравнение расчета энтропии по этой формуле с опытом для некоторых газов. Выражения для констант равновесия химических газовых реакций через молекулярные статистические суммы. Применение этих формул для расчетов степени ионизации газов. Формула Саха.

Раздел 2. Основные положения статистической термодинамики неравновесных систем

Тема 4. Проблема учета

межмолекулярных взаимодействий в статистической термодинамике.

Общий характер зависимости потенциальной энергии молекул от расстояния между центрами молекул. Формула Леннарда - Джонса. Случаи парных и непарных (специфических) взаимодействий молекул. Конфигурационный интеграл как сомножитель в выражении статистической суммы, отражающий взаимодействие молекул.

Метод Майера разложения конфигурационного интеграла в ряд. Расчет конфигурационного интеграла в первом приближении метода Майера, групповые интегралы. Представление о диаграммной технике вычисления групповых интегралов. Термодинамические величины классической плазмы. Уравнения самосогласованного электрического поля электронов и ионов. Метод Дебая-Хюккеля. Дебаевский радиус. Метод корреляционных функций.

Раздел 3. Молекулярно-статистическая теория адсорбции

Тема 5. Молекулярно-статистическое описание процесса адсорбции.

Статистическое - термодинамическое описание адсорбции. Анализ адсорбционного равновесия с использованием большого канонического ансамбля. Виральное выражение для Гиббсовской адсорбции. Связь константы Генри с потенциальной энергией молекулы адсорбата в силовом поле адсорбента. Система атом-атомных потенциалов.

Молекулярно-статистическая теория адсорбции на

	<p>адсорбентах с однородной плоской поверхностью. ГТС как модельный адсорбент для молекулярно-статистических расчетов. Общие принципы построения потенциальной функции межмолекулярного взаимодействия «адсорбат-адсорбент». Модель двумерного идеального газа Уравнение Лопаткина.</p>		
<p>Знания, умения и навыки, получаемые в процессе изучения дисциплины</p>	<p>В результате изучения дисциплины магистрант должен</p> <p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - роль статистической термодинамики конденсированных систем как теоретического фундамента современной физической химии. - статистическую термодинамику конденсированных систем как раздел физической химии и ее роли в современной химии; - возможности применения основ квантовой механики к решению химических задач; - об установлении связи между макроскопическим и микроскопическим подходами к изучению свойств веществ в равновесном состоянии. <p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - демонстрировать связь фундаментальных экспериментов с теорией с помощью известных математических методов; решать задачи по данной дисциплине. - самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах; - пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач; - проводить физико-химические исследования систем и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА; - проводить физико-химические расчеты; - пользоваться справочной литературой; - графически отображать полученные зависимости; - анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований; - вести научную дискуссию. <p>владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основами дисциплины для решения практических задач; - методикой проведения физико-химических исследований; - современными приборами для физико-химических исследований. 		
<p>Объем дисциплины и виды учебной работы</p>	Вид учебной работы	Всего часов	1 семестр
	Общая трудоемкость дисциплины	108	108
	Аудиторные занятия	32	32
	Лекции	16	16
	Лабораторные занятия	16	16

	Самостоятельная работа	76	76
Используемые ресурсы информационно- телекоммуникационной сети «Internet», информа- ционные технологии, программные средства и информационно- справочные системы	<p>Интернет-ресурсы</p> <p>http://fizrast.ru/sitemap.html http://www.don-agro.ru http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/ http://www.agroxxi.ru/ (РГБ) http://elibrary.rsl.ru Научная электронная библиотека http://elibrary.ru/default.asp Российская национальная библиотека http://primo.nl.ru http://nbmgu.ru Электронная библиотека Российской государственной библиотеки</p> <p>Материально-техническое обеспечение дисциплины</p> <ul style="list-style-type: none"> - лекционные аудитории; - аудитории для семинарских занятий; - проекционное оборудование и компьютер; - интерактивная доска. 		
Формы текущего и рубежного контроля	Тестовые задания, контрольные работы.		
Формы промежуточного контроля	зачет		