

## 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	<p><b>Целями изучения дисциплины «Статистическая термодинамика конденсированных систем» являются:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- изучение теоретических основ классической и статистической термодинамики, фазовых равновесий применения термодинамических методов для решения химических проблем;</li><li>- формирование у магистрантов знаний и умений, позволяющих моделировать и проводить численные расчеты при описании различных видов химических и фазовых равновесий и свойств веществ в растворах.</li></ul>
Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры	<p>Дисциплина «Статистическая термодинамика конденсированных систем» относится к части, формируемая участниками образовательных отношений; изучается в 1 семестре.</p> <p>Дисциплина представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля физической химии, коллоидной химии, химической технологии физико-химических методов исследования.</p>
Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины	<p><b>В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий (УК-1);</li><li>- 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).</li></ul>
Содержание дисциплины	<p><b>Раздел 1. Основные положения статистической термодинамики.</b></p> <p>Тема 1. Предмет и задачи статистической 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</p>

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, «размещиваемость» (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.

	<p>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.</p> <p style="text-align: center;"><b>Раздел 2. Основные положения статистической термодинамики неравновесных систем</b></p> <p>Тема 4. Проблема учета межмолекулярных взаимодействий в статистической термодинамике.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p style="text-align: center;"><b>Раздел 3. Молекулярно-статистическая теория адсорбции</b></p> <p><i>Тема 5. Молекулярно-статистическое описание процесса адсорбции.</i></p> <p>Статистическо - термодинамическое описание адсорбции. Анализ адсорбционного равновесия с использованием большого канонического ансамбля. Вириальное выражение для Гиббсовской адсорбции. Связь константы Генри с потенциальной энергией молекулы адсорбата в силовом поле адсорбента. Система атом-атомных потенциалов.</p> <p>Молекулярно-статистическая теория адсорбции на 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><b>Знания, умения и навыки, получаемые в процессе изучения</b></p>	<p><b>В результате изучения дисциплины магистрант должен знать:</b></p> <p>- роль статистической термодинамики конденсированных систем как теоретического фундамента современной физической</p>

дисциплины	<p>химии.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- статистическую термодинамику конденсированных систем как раздел физической химии и ее роли в современной химии;</li><li>- возможности применения основ квантовой механики к решению химических задач;</li><li>- об установлении связи между макроскопическим и микроскопическим подходами к изучению свойств веществ в равновесном состоянии.</li></ul> <p><b>уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- демонстрировать связь фундаментальных экспериментов с теорией с помощью известных математических методов; решать задачи по данной дисциплине.</li><li>- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;</li><li>- пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач;</li><li>- проводить физико-химические исследования систем и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;</li><li>- проводить физико-химические расчеты;</li><li>- пользоваться справочной литературой;</li><li>- графически отображать полученные зависимости;</li><li>- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;</li><li>- вести научную дискуссию.</li></ul> <p><b>владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- основами дисциплины для решения практических задач;</li><li>- методикой проведения физико-химических исследований;</li><li>- современными приборами для физико-химических исследований.</li></ul>		
Объем дисциплины и виды учебной работы	<b>Вид учебной работы</b>	<b>Всего часов</b>	<b>1 семестр</b>
	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», информационные технологии,	<p><b>Интернет-ресурсы</b></p> <p><a href="http://fizrast.ru/sitemap.html">http://fizrast.ru/sitemap.html</a> <a href="http://www.don-agro.ru">http://www.don-agro.ru</a> <a href="http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/">http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/</a> <a href="http://www.agroxxi.ru/">http://www.agroxxi.ru/</a> (РГБ) <a href="http://elibrary.rsl.ru">http://elibrary.rsl.ru</a> Научная электронная библиотека</p>		

<p><b>программные средства и информационно- справочные системы</b></p>	<p><a href="http://elibrary.ru/default.asp">http://elibrary.ru/default.asp</a> Российская национальная библиотека  <a href="http://primo.nlr.ru">http://primo.nlr.ru</a> <a href="http://nbmgu.ru">http://nbmgu.ru</a> Электронная библиотека Российской государственной библиотеки</p> <p><b>Материально-техническое обеспечение дисциплины</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- лекционные аудитории;</li> <li>- аудитории для семинарских занятий;</li> <li>- проекционное оборудование и компьютер;</li> <li>- интерактивная доска.</li> </ul>
<p><b>Формы текущего и рубежного контроля</b></p>	<p>Тестовые задания, контрольные работы.</p>
<p><b>Формы промежуточ- ного контроля</b></p>	<p>зачет</p>