

## 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

<b>Цель изучения дисциплины</b>	<b>Целями изучения дисциплины «Статистическая термодинамика конденсированных систем» являются:</b> <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>
<b>Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры</b>	Дисциплина «Статистическая термодинамика конденсированных систем» относится к Блоку 1, к части, формируемой участниками образовательных отношений; изучается в 1-ом семестре. 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. Перечень дисциплин, необходимых для изучения дисциплины: неорганическая химия, квантовая химия, физика, математика.
<b>Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины</b>	<b>В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:</b> <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>

<p><b>Содержание дисциплины</b></p>	<p align="center"><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 статистической термодинамики.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>Тема 3. Применение методов статистической термодинамики к задаче расчета термодинамических функций идеального газа.</p> <p>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</p>
-------------------------------------	--

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 Леннард - 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.*

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.

Молекулярно-статистическая теория адсорбции на адсорбентах с однородной плоской поверхностью. ГТС как модельный адсорбент для молекулярно-статистических

	<p>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 дисциплины</b></p>	<p><b>В результате изучения дисциплины магистрант должен знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- роль статистической термодинамики конденсированных систем как теоретического фундамента современной физической химии.</li> <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>		
<p><b>Объем дисциплины и виды учебной работы</b></p>	<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
<b>Используемые ресурсы информационно- теле- коммуникационной сети «Internet», информационные технологии, программные средства и информационно- справочные системы</b>	<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  <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>		
<b>Формы текущего и рубежного контроля</b>	Тестовые задания, контрольные работы.		
<b>Формы промежуточного контроля</b>	зачет		