

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

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“ _____ ” _____ 20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Статистична термодинаміка складних систем

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 „Статистична термодинаміка складних систем” для студентів за напрямом підготовки 0703 хімія, спеціальністю 8.070301 хімія.

Розробники: **Черановський Владислав Олегович, д. фіз-мат. н., професор**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної хімії

Протокол № _р.

Завідувач кафедри _____ Жолновач А.М.

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 3	Напрямок підготовки 0703 хімія	денна форма навчання
Модулів – 2	Спеціальність 8.070301 хімія	Рік підготовки: V -й
Загальна кількість годин 142		Семестр 9 -й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 3 самостійної роботи студента – 4.5		Лекції 28 год.
		Практичні 27 год.
		Самостійна робота 87 год.
	Вид контролю: екзамен	

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: сформулювати уявлення про загальний зв'язок між мікроскопічними властивостями ізольованих атомів і молекул та термодинамічними властивостями речовин, побудованих з цих молекул; познайомити студентів з теоретичними основами сучасних методів статистичної термодинаміки.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: основні закони нерівноважної термодинаміки і методи їх застосування для вирішення проблем моделювання фізико-хімічних процесів.

вміти: проводити прості розрахунки термодинамічних властивостей речовини у рівноважному стані та інтерпретувати результати цих розрахунків.

3. Програма навчальної дисципліни

Модуль I. Основи статистичної термодинаміки

Тема 1. Канонічний розподіл.

Термодинамічна імовірність. Канонічний ансамбль. Статистичне обґрунтування розподілу Больцмана. Формула Больцмана для ентропії. Функція розподілу. Зв'язок канонічного розподілу з термодинамічними потенціалами та параметрами.

Тема 2. Статистики Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна.

Функції розподілу систем тотожних частинок. Вплив принципу Паулі на статистику ферміонів. Хімічний потенціал.

Тема 3 Статистична термодинаміка ідеального газу..

Молекулярна функція розподілу. Теплова, оберտальна, коливальна та електронна статистичні суми ідеального газу. Розподіл Максвелла-Больцмана. Середня енергія теплового руху. Внутрішня енергія та ентропія гармонічного осцилятора. Розрахунок термодинамічних характеристик ідеального газу за молекулярними даними. Аномалія Шоттки для питомої теплоємності ідеального газу

Модуль 2. Статистична термодинаміка взаємодіючих багаточасткових систем

Тема 4. Термодинаміка кристалічного стану.

Теплоємність кристалів. Теорії Ейнштейна і Дебая. Магнітні властивості кристалів. Закон Кюрі для парамагнетиків. Парамагнетизм Паулі. Феромагнетики та сегнетоелектрики.

Тема 5. Термодинаміка системи взаємодіючих частинок.

Решіткові моделі. Рівняння стану двовимірного ідеального газу. Решіткова модель бінарної суміші рідин та її зведення до моделі Ізінга. Наближення середнього поля. Формула Кюрі-Вейсса

Тема 6. Фазові переходи у моделі Ізінга.

Статистична термодинаміка одновимірної моделі Ізінга. Метод трансфер матриці. Фазовий перехід по полю у випадку антиферомагнітної взаємодії сусідніх спінів. Двовимірна модель Ізінга. Рішення Онзагера. Параметр порядку. Фазовий перехід порядок-безпорядок.

Тема 7. Низькотемпературна термодинаміка наноструктурованих матеріалів

Молекулярні магнетики і стабільність магнітного стану при нульовій температурі. Квантові фазові переходи. Температурні та польові залежності характеристик квазіодновимірних магнетиків.

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						
Тема 1	24	4	5			15
Тема 2	20	4	2			14
Тема 3	27	7	5			15
Разом за модулем 1	71	15	12			44

Модуль 2						
Тема 4	19	3	5			11
Тема 5	11	2	1			8
Тема 6	21	4	5			12
Тема 7	20	4	4			12
Разом за модулем 2	71	13	15			43
Усього годин	142	28	27			87

6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	ср	пір
Тема 1. Зв'язок канонічного розподілу з термодинамічними потенціалами та параметрами. Квантові статистичні моделі термодинамічних систем.	15	
Тема 2. Функції розподілу і хімічні потенціали систем бозонів та ферміонів.	14	
Тема 3. Обчислення молекулярної функції розподілу для ідеальних газів.	15	
Тема 4. Магнітні властивості кристалів Обчислення магнітної сприйнятливості лугових металів у газовому стані.	11	
Тема 5. Обчислення низькотемпературних термодинамічних характеристик твердих тіл у наближенні середнього поля.	8	
Тема 6. Моделювання термодинаміка одновимірних решіткових моделей у методі трансфер-матриці.	12	
Тема 7. Моделювання магнітних характеристик низько розмірних сполук перехідних металів.	12	

7. Методи навчання

Лекції, виконання практичних робіт, самостійна робота.

8. Методи контролю

Рішення задач на практичних заняттях, екзамен.

9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота		Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1	Модуль 2	70	100
Теми 1-3	Теми 4-13		
Розв'язання задач 15	Розв'язання задач 15		

Для допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен набрати не менше 15 балів за розв'язання тестових задач.

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. Науково-методична література.
3. Мультимедійні презентації лекційного матеріалу.

11. Рекомендована література

Базова

1. П. Эткинс Физическая химия. т.2. –М.: Мир, 1980. – 584 с.
2. Н.А. Смирнова Методы статистической термодинамики в физической химии. – М.: “Высшая школа”, 1982. – 456 с.
3. Д. Маттис Теория магнетизма. – М.: Мир, 1965. – 407 с.

Допоміжна

1. А.В. Леванов, Э.Е. Антипенко. Определение термодинамических свойств статистическими методами. Классический идеальный газ. – М.: МГУ, 2006. – 44 с.
2. А.В. Леванов, Э.Е. Антипенко. Определение термодинамических свойств статистическими методами. Реальные газы. Жидкости. Твердые тела. – М.: МГУ, 2006. – 44 с.
3. Р. Фейнман Статистическая механика. – М.: Мир, 1978. – 408 с.
4. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц Статистическая физика. Часть 1. – М.: Наука, 1976. – 584 с.
5. G. Gallavotti Statistical mechanics. Short Treatise. – Roma, 1999. – 349 p.