Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра прикладної хімії

“**ЗАТВЕРДЖУЮ**”

Перший проректор

_____

“_____”_____20___ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Статистична термодинаміка складних систем

За напрямом підготовки 040101 "хімія"

для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"

Хімічного факультету

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу

Харків – 2014

Робоча програма навчальної дисципліни „Статистична термодинаміка складних систем” для студентів за напрямом підготовки 040101 "хімія" для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія".

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

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри прикладної хімії

Протокол № _8_ від “_24__”__04_____2014 р.

Завідувач кафедри _____ В.А. Чебанов

“_24_”__04_____2014_ р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № _10_ від “_14__”__05_____2014___ р.

“_14__”_____05_____2014 р.

Голова _____ Юрченко О.І.

1. Опис навчальної дисципліни

<table>
<tr><td>Найменування показників</td><td>Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень</td><td>Характеристика навчальної дисципліни</td></tr>
<tr><td>Кількість кредитів 4</td><td>Галузь знань 0401 «Природничі науки»</td><td>денна форма навчання дисципліна вільного вибору студента</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Модулів – 2</td><td rowspan="2">Напрям підготовки 040101 "хімія" Спеціальність 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"</td><td>Рік підготовки:
V -й</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Загальна кількість годин 158</td><td rowspan="2">Семестр
9 -й</td></tr>
<tr><td rowspan="3">Тижневих годин для денної форми навчання:
аудиторних – 3
самостійної роботи студента – 4.5</td><td rowspan="3">Освітньо-кваліфікаційний рівень: магістр, спеціаліст</td></tr>
<tr><td>Лекції
28 год.</td></tr>
<tr><td>Лабораторні заняття
26 год.</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td>Самостійна робота
104 год.</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td>Вид контролю:
залік</td></tr>
</table>

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: сформувати уявлення про загальний зв’язок між мікроскопічними властивостями ізольованих атомів і молекул та термодинамічними властивостями речовин, побудованих з цих молекул; ознайомити студентів з основними методами розрахунку термодинамічних характеристик багаточастинкових систем з наголосом на урахування взаємодії між частинками.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: основні закони статистичної термодинаміки і приклади їх застосування для вирішення проблем моделювання термодинамічних властивостей реальних хімічних сполук; формули для розрахунку основних термодинамічних характеристик речовини на основі її точного енергетичного спектру; основні положення зонної теорії твердого тіла з наголосом на низько розмірні матеріали; метод молекулярного поля та метод трансфер-матриці для моделювання магнітних властивостей низько розмірних матеріалів

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

Програма навчальної дисципліни

Модуль І. Основи статистичної термодинаміки

Тема 1. Канонічний розподіл, статистична термодинаміка ідеального газу

Термодинамічна імовірність. Канонічний ансамбль. Статистичне обґрунтування розподілу Больцмана. Формула Больцмана для ентропії. Функція розподілу. Зв’язок канонічного розподілу з термодинамічними потенціалами та параметрами. Молекулярна функція розподілу. Теплова, обертальна, 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

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

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

Тема 3. Термодинаміка кристалічного стану.

Теплоємність кристалів. Теорії Ейнштейна і Дебая. Магнітні властивості кристалів. Закон Кюрі для парамагнетиків. Парамагнетизм Паулі. Решіткові моделі. Наближення середнього поля. Формула Кюрі-Вейсса.

Модуль 2. Статистична термодинаміка наноматеріалів.

Тема 4. Низькотемпературна термодинаміка наноструктурованих матеріалів

Розмірні ефекти у наноматеріалах. Нестабільність Пайерлса. Молекулярні магнетики і стабільність магнітного стану при нульовій температурі. Квантові фазові переходи. Температурні та польові залежності характеристик квазіодновимірних магнетиків.

Тема 5. 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. Решіткова модель бінарної суміші рідин та її зведення до моделі Ізінга.

3. 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	14	8		8		17
Тема 2	12	2		2		19
Тема 3	15	4		6		20
Разом за	79	14		16		56

модулем 1						
Модуль 2						
Тема 4	22	6		5		27
Тема 5	17	8		5		21
Разом за модулем 2	80	14		10		48
Усього годин	158	28		26		104

5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Розрахунок термодинамічних характеристик ідеального газу за молекулярними даними. Аномалія Шоттки	8
2	Вплив принципу Паулі на статистику ферміонів. Метод Хюкеля	2
3	Решіткові моделі наноматеріалів.	6
4	Температурні та польові залежності характеристик квазіодновимірних магнетиків	5
5	Метод трансфер матриці.	5

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.	17	
Тема 2. Функції розподілу і хімічні потенціали систем бозонів та ферміонів.	19	
Тема 3. Магнітні властивості кристалів Обчислення магнітної сприятливості лугових металів у газовому стані.	20	
Тема 4. Моделювання термодинаміка одновимірних решіткових моделей у методі трансфер-матриці.	27	
Тема 5. Моделювання магнітних характеристик низько розмірних сполук перехідних металів.	21	

7. Методи навчання

Лекції, виконання лабораторних робіт, самостійна робота.

8. Методи контролю

Рішення задач на практичних заняттях, індивідуальні завдання для самостійної роботи; залік.

9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота		Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1	Модуль 2	40	100
Теми 1-3	Тема 4-5		
Розв’язання задач 30	Розв’язання задач 30		

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. Т.А. Крыловецкая Лекции по термодинамике и статистической физике. Часть 1. Термодинамика. Воронеж, 2007.-37 с.
2. В.Д.Ягодовский Статистическая термодинамика в физической химии. М.: БИНОМ, 2005.- 495 с.
3. П. Эткинс Физическая химия. т.2. –М.: Мир, 1980. – 584 с.
4. А.В. Леванов, Э.Е. Антипенко. Определение термодинамических свойств статистическими методами. Классический идеальный газ. – М.: МГУ, 2006. – 44 с.
5. А.В. Леванов, Э.Е. Антипенко. Определение термодинамических свойств статистическими методами. Реальные газы. Жидкости. Твердые тела. – М.: МГУ, 2006. – 37 с.

Допоміжна

1. И.А. Квасников Термодинамика и статистическая физика. Т4.: Квантовая статистика. М.: Ком Книга, 2005.-352 с.
2. Р. Фейнман Статистическая механика. – М.: Мир, 1978. – 408 с.
3. Н.А. Смирнова Методы статистической термодинамики в физической химии. – М.: “Высшая школа”, 1982. – 456 с.
4. Д. Маттис Теория магнетизма. – М.: Мир, 1965. – 407 с.