**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

(назва факультету, інституту)

Кафедра ФІЗИЧНОЇ ХІМІЇ \_

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник декана/директора

#### з навчальної роботи

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

«\_\_\_\_»\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_20\_\_ року

## **РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

#### \_ **СТАТИСТИЧНА ТЕРМОДИНАМІКА** \_

(повна назва навчальної дисципліни)

**для студентів**

галузі знань **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_0401 – Природничі науки\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

(шифр і назва галузі знань)

напрям підготовки **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_6.040101 – Хімія\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

(шифр і назва напряму підготовки)

спеціальність **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_6.04010101 – Хімія\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

(шифр і назва спеціальності)

спеціалізація **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**кластер **Фізична хімія\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

(назва спеціалізації)

##### КИЇВ – 2017

Робоча програма знавчальної дисципліни “**Статистична термодинаміка**” для студентів **напряму підготовки 6.040101 – Хімія**

« 21 » грудня 2016 року – **14** с.

Розробники: к.х.н., доц. Усенко Н.І.

Робоча програма дисципліни “Статистична термодинаміка” затверджена на засіданні кафедри фізичної хімії

Протокол № 5 від “21” грудня 2016 року

Завідувач кафедри фізичної хімії

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (І.О. Фрицький)

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 20\_\_\_ року

Протокол № від “ ” 20 року

Завідувач кафедри фізичної хімії

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (І.О. Фрицький)

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 20\_\_\_ року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «\_23\_» \_\_лютого\_\_\_ 2017\_ року №\_6\_

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (В.М. Амірханов)

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 20\_\_\_ року

© \_\_Фрицький І.О., 2016\_ рік

© \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_, 20\_\_\_ рік

© \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_, 20\_\_\_ рік

**ВСТУП**

Навчальна дисципліна **”Статистична термодинаміка”** є складовою освітньо-професійної програми підготовки фахівців за освітньо-кваліфікаційним рівнем «**\_бакалавр** » галузі знань **\_\_0401 – Природничі науки** з *напряму підготовки* **\_6.040101 – Хімія\_**, *спеціальності* **- \_6.04010101 – Хімія\_,** *кластеру –* **Фізична хімія.**

Дана дисципліна **з циклу вільного вибору студента** за ***спеціальністю* \_6.04010101 – Хімія\_**.

Викладається у **\_6 \_** семестрі **\_3** курсув **обсязі – \_144\_ год.** ***( 4 кредитів ECTS)*** зокрема: *лекції –* ***34*** *год., практичні –* ***34*** *год., самостійна робота –* ***\_76\_*** *год.* У курсі передбачено  **2**  *змістових модулі* та  **2**  *модульні* *контрольні роботи*. Вивчення дисципліни завершується **іспитом.**

**Мета дисципліни** – засвоєння студентами системи теоретичних уявлень стосовно основних законів статистичної термодинаміки, які визначають термодинамічні властивості хімічних речовин, та отримання практичних умінь в галузі розрахунку термодинамічних властивостей речовин методами статистичної термодинаміки.

**Завдання** – навчити студентів розуміти і вміти розраховувати основні термодинамічні характеристики речовин на основі уявлень про будову молекул відповідних речовин, використовуючи методи статистичної термодинаміки.

**Структура курсу.** Курс складається з лекційних та практичних занять з основних розділів статистичної термодинаміки, а саме: статистичні методи Больцмана, Бозе–Ейнштейна, Фермі–Дірака, Гіббса, методи розрахунку статистичних сум для окремих видів руху молекул ідеальних газів, методи розрахунку термодинамічних властивостей ідеальних та реальних газів, рідин, розчинів та твердих тіл. Матеріал розбитий на 2 модулі, вивчення кожного з яких закінчується написанням модульної контрольної роботи.

В результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен

**знати:** формулювання, фізичний зміст та границі застосування і переваги використання того чи іншого методу статистичного розрахунку термодинамічних властивостей речовин у кожному конкретному випадку;

**вміти:** розраховувати методами статистичної термодинаміки властивості хімічних речовин та константи рівноваги хімічних реакцій.

**Місце дисципліни *(****в структурно-логічній схемі підготовки фахівців відповідного напряму)*. «Статистична термодинаміка» є дисципліною з циклу дисциплін вільного вибору студента.

**Зв’язок з іншими дисциплінами**. “ Статистична термодинаміка ” вивчається після засвоєння основ фізики, математики, а також основ фізичної хімії. Курс є базовим для розуміння багатьох фізико-хімічних аспектів таких нормативних дисциплін, як “Фізична хімія процесів”, “Колоїдна хімія” та “Фізичні методи дослідженння в хімії”, а також спецкурсів, як „Основи хімічної кінетики”, „Фізична хімія міжфазних явищ”, “Теоретична електрохімія”, „Фізична хімія конденсованого стану” „Молекулярно-статистичні теорії рідин” тощо.

**Контроль знань і розподіл балів, які отримують студенти**

**впродовж вивчення дисципліни**

Контроль здійснюється за модульно-рейтинговою системою.

У змістовий модуль 1 (**ЗМ1**) входять теми **1** та **2**, у змістовий модуль 2 (**ЗМ2**) – теми **3** – **4.** Обов’язковим для **іспиту** є **виконання** завдань практичних занять, домашніх розрахункових робіт, а також написання на позитивну (60% від максимуму) оцінку всіх модульних контрольних робіт та перевірочних робіт із розв’язання задач.

**Форми поточного контролю**: оцінювання 1) розв’язання задач практичних занять, 2) поточних контрольних та перевірочних робіт, 3) домашніх розрахункових робіт та самостійних завдань; 4) активності на практичних заняттях.

**Модульний контроль**: написання двох модульних контрольних робіт.

**Підсумковий контроль**: іспит.

**Змістовий модуль 1** включає в себе **7** лекцій (**14** год.), **4** практичних занять (**14** год.)..

Розрахунок максимальної кількості балів за ***змістовий модуль 1*** наведено у наступній таблиці:

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Вид виконаної роботи | Тип діяльності | Кількість виконаних  робіт | Вартість однієї  роботи в балах  (максимально) | Сумарна  кількість балів  макс. мін. | |
| Модульна контрольна робота | Обов’язковий | 1 | 14 | **14** | **8** |
| Розв’язання практичних розрахункових задач | Обов’язковий | 2 | 2 | **4** | **2** |
| Поточна контрольна робота із розв’язання задач | Обов’язковий | 1 | 3 | 3 | 2 |
| Домашня самостійна робота | Бажаний | 4 | 0,5 | 2 | 1 |
| Активність студента: усні відповіді, доповнення | Бажаний | 4 | 0,5 | 2 | 1 |
| **Максимальна сума балів за модуль** | | | | **25** | |

**Змістовий модуль 2** включає в себе **8** лекцій (**20** год.), **7** практичних заняття (**20** год.).

Розрахунок максимальної кількості балів за ***змістовий модуль 2*** наведено у наступній таблиці:

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Вид виконаної роботи | Тип діяльності | Кількість виконаних  робіт | Вартість однієї  роботи в балах  (максимально) | Сумарна  кількість балів  макс. мін. | |
| Модульна контрольна робота | Обов’язковий | 1 | 15 | **15** | **9** |
| Розв’язання практичних розрахункових задач | Обов’язковий | 3 | 5 | **15** | **10** |
| Домашня самостійна робота | Бажаний | 3 | 1 | 3 | 2 |
| Активність студента: усні відповіді, доповнення | Бажаний | 2 | 1 | 2 | 1 |
| **Максимальна сума балів за модуль** | | | | **35** | |

*До іспиту може бути допущений студент,* ***який виконав усі обов’язкові види робіт,*** *які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Статистична термодинаміка”* (*а саме, написання поточних контрольних робіт та модульних контрольних робіт, виконання 5 практичних розрахункових задач)* ***і при цьому*** *за результатами модульно-рейтингового контролю* ***отримав*** *за два змістові модулі сумарну* ***оцінку в балах не менше 36 балів.***

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

***При простому розрахунку отримаємо:***

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Змістовий модуль 1 | Змістовий модуль 2 | Екзамен | Підсумкова оцінка |
| *Мінімум* | *12* | *22* | *24* | *60* |
| **Максимум** | **25** | **35** | **40** | **100** |

**Шкала відповідності** *(для екзамену)*

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| За 100 – бальною шкалою | За національною шкалою | |
| 90 – 100 | 5 | відмінно |
| 85 – 89 | 4 | дуже добре |
| 75 – 84 | добре |
| 65 – 74 | 3 | задовільно |
| 60 – 64 |
| 35 – 59 | 2 | «незадовільно» з можливістю повторного складанняне задовільно |
| 1 – 34 |  | «незадовільно» з обов’язковим повторним вивченням дисципліни |

**ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**СТАТИСТИЧНА ТЕРМОДИНАМІКА**

**Змістовий модуль 1.**

**Тема 1. Основні** **поняття статистичної термодинаміки**

Предмет статистичної термодинаміки. Теорія імовірностей – математичний апарат статистичної термодинаміки.Основні поняття і постулати статистичної термодинаміки. Фазовий простір, ансамблі. Постулат про рівнозначність середніх за часом і середніх за ансамблем. Ергоїдна гіпотеза. Теорема Ліувілля. Постулат рівних апріорних імовірностей. **(*17 год.*)**

**Тема 2. Основні методи** **статистичної термодинаміки**

Методи Больцмана, Максвелла–Больцмана, Бозе–Ейнштейна, Фермі–Дірака, Гіббса. Інтерпретація термодинаміки на основі статистичної фізики **(*46 год.*)**

**Змістовий модуль 2. Статистична термодинаміка хімічних об’єктів різної природи**

**Тема 3. Статистична термодинаміка ідеальних газів**

Термодинамічні функції ідеального газу і їх статистико-термодинамічне визначення. Поступальна, обертальна, коливальна, електронна та ядерна молекулярні статсуми. Обчислення внесків в термодинамічні властивості ідеального газу, обумовлених різними видами руху. **(*27 год.*)**

**Тема 4. Статистична термодинаміка реальних газів**

Рівняння стану та термодинамічні функції реальних газів. Модельні потенціали міжмолекулярної взаємодії в реальних газах. Поняття про конфігураційний інтеграл. Методи розрахунку конфігураційного інтегралу. Зв’язок між рівнянням стану реального газу та конфігураційним інтегралом. Зв’язок між рівнянням стану реального газу та модельними потенціалами міжмолекулярної взаємодії **(*40 год.*)**

**Тема 5. Статистична термодинаміка конденсованого стану**

Статистична термодинаміка кристалів. Коливальний рух та теорії теплоємності кристалів. Кореляційні функції розподілу в рідинах. Особливості обчислення рівнянь стану та термодинамічних функцій рідин **(*14 год.*)**

**СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І СЕМІНАРСЬКИХ ЗАНЯТЬ**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № | Назва теми | Кількість годин | | | |
| Лекції |  | Практ. | Сам. роб. |
| Змістовий модуль 1. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ І МЕТОДИ СТАТИСТИЧНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ | | | | | |
| 1 | Предмет статистичної термодинаміки. Теорія імовірностей – математичний апарат статистичної термодинаміки | 2 |  |  | 5 |
| 2 | Основні поняття і постулати статистичної термодинаміки. | 2 |  | 2 | 5 |
| 3 | Статистичний метод Больцмана | 2 |  | 2 | 5 |
| 4 | Розподіл Максвелла за швидкостями, імпульсами, енергіями для молекул ідеального газу | 2 |  | 4 | 5 |
| 5 | Метод Гіббса | 2 |  |  | 5 |
| 6 | Квантові статистики ідеального газу Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака. Властивості газів Бозе та Фермі. | 2 |  | 4 | 5 |
| 7 | Інтерпретація термодинаміки на основі статистичної фізики | 2 |  |  |  |
| *Модульна контрольна робота* 1 | |  |  | 2 |  |
| *Усього за модулем* | | 14 |  | 14 | 30 |
| Змістовий модуль 2. СТАТИСТИЧНА ТЕРМОДИНАМІКА ГАЗІВ, РІДИН І ТВЕРДИХ ТІЛ | | | | | |
| 8 | Вивід термодинамічних функцій ідеального газу. Молекулярна статистична сума | 2 |  | 2 | 5 |
| 9 | Молекулярні статистичні суми ідеального газу для різних видів руху | 6 |  | 6 | 6 |
| 10 | Реальний газ, модельні потенціали взаємодії | 2 |  |  | 6 |
| 11 | Конфігураційний інтеграл реального газу, метод Майера, групові інтеграли | 2 |  | 2 | 5 |
| 12 | Статистичне обчислення термодинамічних функцій реальних газів з використанням різних модельних потенціалів | 2 |  | 4 | 6 |
| 13 | Суми станів коливального руху і термодинамічні властивості ідеальних кристалічних тіл | 2 |  | 2 | 6 |
| 14 | Статистична термодинаміка рідин. Решіткові моделі. Молекулярні функції розподілу. Статистичні теорії реальних розчинів неелектролітів | 2 |  |  | 6 |
| 15 | Статистичний розрахунок констант рівноваги. Статистико-термодинамічні аспекти теорії активного комплексу. | 2 |  | 2 | 6 |
| Модульна контрольна робота 2 | |  |  | 2 |  |
| Усього за модулем | | 20 |  | 20 | 46 |
| Іспит | |  |  |  |  |
| Усього за дисципліною | | 34 |  | 34 | 76 |

Змістовий модуль 1

Тема 1. Основні поняття статистичної термодинаміки (17 год.)

**Лекція 1.** Предмет статистичної термодинаміки. Теорія імовірностей – математичний апарат статистичної термодинаміки. Теореми про складання та добуток імовірностей. Середні значення, характеристики відхилень від середніх значень. Теорема про відносні флуктуації адитивних величин. (3 год.)

***Завдання для самостійної роботи*** Рівномірні, експоненціальні, гаусові розподіли. Статистичні моделі флуктуацій, модель Еренфеста. [1, 10] (5 год.)

**Лекція 2.** Основні поняття і постулати статистичної термодинаміки. Поняття фазового простору, статистичного ансамблю. Середні за часом і середні за ансамблем. Принцип рівних апріорних імовірностей, ергоїдна гіпотеза, теорема Ліувілля. (2 год.)

***Завдання для самостійної роботи***Фазові простори простих механічних моделей. Доведення теореми Ліувілля. [1,2, 9] (5 год.)

**Практичне заняття 1.** Розв'язання задач на елементи теорії імовірностей і функції розподілу (2 год.)

Тема 2. Основні методи статистичної термодинаміки (46 год.)

**Лекція 3.** Статистичний метод Больцмана, розподіл Больцмана, молекулярна статистична сума. Аналіз розподілу Больцмана при різних температурах. Розподіл Больцмана для вироджених рівнів енергії (2 год.)

***Завдання для самостійної роботи*** Н-теорема Больцмана. Статистичний зміст поняття ентропії [10] (5 год.)

**Практичне заняття 2.** Розв'язання задач на використання розподілу Больцмана: заселеність енергетичних рівнів, середні значення енергій

(2 год.)

**Лекція 4.** Розподіли Максвела за імпульсами, швидкостями, енергіями. Розрахунок середніх значень цих величин. (2 год.)

***Завдання для самостійної роботи*** Перехід від декартових координат до сферичних. Інтеграли Пуассона. Експериментальна перевірка розподілу Максвела. [1, 10] (5 год.)

**Практичне заняття 3.** Розв'язання задач на використання розподілу Максвелла, застосування його до ряду важливих питань хімічної кінетики та молекулярно-кінетичної теорії газів. (4 год.)

**Лекція 5.** Статистичний метод Гіббса. -простір, -простір. Мікроканонічний і канонічний розподіли Гіббса. Квантові уявлення в статистичній термодинаміці. Розподіл Гіббса в квазікласичному наближенні. (2 год.)

***Завдання для самостійної роботи***Великий канонічний ансамбль Гіббса, розподіл Гіббса для відкритих систем. [1, 9, 10] (5 год.)

**Лекція 6.** Квантові статистика Бозе-Ейнштейна та Фермі–Дірака. Властивості газу бозонів. Рідкий гелій, надтекучість. Приклади систем, що підлягають статистиці Фермі. Електрони в металах. (2 год)

***Завдання для самостійної роботи*** Статистика газу вільних електронів в металах. [13] (5 год.)

**Практичне заняття 4.** Розв'язання задач на квантові статистики бозонів та ферміонів (4 год.)

**Лекція 7.** Інтерпретація термодинаміки на основі статистичної фізики, статистичні аналоги термодинамічних функцій. Виведення термодинамічних функцій через суму станів системи. (2 год.)

***Завдання для самостійної роботи***Обґрунтування зв**’**язкуміж модулем канонічного ансамблю і термодинамічною температурою. [10] (5 год.)

**Модульна контрольна робота №1 „Основні поняття та методи статистичної термодинаміки”** (2 год.)

**Контрольні запитання до змістового модуля 1**

1. На яких основних постулатах базується статистична термодинаміка? Поясніть їх зміст.
2. Що таке статистичний ансамбль? Для чого вводиться це поняття в статистичній термодинаміці?
3. Скільки вимірів має фазовий простір системи?
4. Проілюструйте зв'язок між фазовою траєкторією та енергією системи на прикладі моделі лінійного гармонійного осцилятора.
5. Наведіть основні вихідні положення статистичного методу Больцмана.
6. В чому полягає сутність методу невизначених множників Лагранжа?
7. Поясніть фізичний зміст поняття молекулярної статистичної суми та перелічіть її основні властивості.
8. Проаналізуйте заселеність енергетичних рівнів системи, що підлягає розподілу Больцмана, при високих та низьких температурах.
9. Виведіть формули для середньої, середньоквадратичної та найбільш імовірної швидкостей молекул ідеального газу.
10. Проведіть порівняльну характеристику статистичних розподілів Гіббса і Больцмана.
11. Наведіть основні властивості такої характеристики як модуль канонічного ансамблю.
12. Доведіть взаємно однозначний зв'язок між модулем канонічного ансамблю і термодинамічною температурою.
13. Наведіть статистичні аналоги рівнянь, що є відображеннями першого і другого законів термодинаміки.
14. Виразіть термодинамічні функції системи через суму станів системи.

**Контрольні завдання до змістового модуля 1**

1. Знайти імовірність певних значень величин, якщо дані функції розподілу відповідних величин.
2. Знаючи закон, за яким змінюється величина, знайти її функцію розподілу.
3. Оцінити термодинамічну імовірність та статистичну вагу того чи іншого стану модельної системи.
4. Для системи, що підлягає розподілу Больцмана, оцінити імовірність перебування на певному енергетичному рівні.
5. Оцінити різницю в енергіях рівнів, якщо відома різниця заселеностей цих рівнів.
6. Обчислити середню енергію молекулярної системи.
7. Вказати, яким чином змінюється заселеність тих чи інших рівнів з температурою.
8. Обчислити середню чи середньоквадратичну швидкість молекул газу при певній температурі.
9. Розрахувати молекулярну статистичну суму для певної системи і знайти термодинамічні функції цієї системи.

Змістовий модуль 2

Тема 3. Статистична термодинаміка ідеальних газів (27 год.)

**Лекція 8.** Зв'язок між сумою станів системи та молекулярною статистичною сумою для ідеального газу. Вираження термодинамічних функцій ідеального газу через молекулярну статистичну суму. Вигляд формул при виділенні нульової енергії. (2 год.)

***Завдання для самостійної роботи*** Формула Закура-Тетроде; розрахунок констант рівняння Закура-Тетроде з використанням різних одиниць вимірювання.[2,3] (5 год.)

**Практичне заняття 5.** Розв'язання задач на властивості молекулярної статистичної суми ідеального газу та її зв’язок з його термодинамічними функціями. (2 год.)

**Лекція 9.** Молекулярні статистичні суми ідеального газу для різних видів руху. Внесок поступального, обертального, коливального, електронного та ядерного рухів в термодинамічні властивості ідеального газу. (6 год.)

***Завдання для самостійної роботи***Розрахунок коливально-обертальних сум ідеального газу при високих температурах із урахуванням негармонійності коливань та взаємодії між коливальним та обертальним рухами. Наближені методи Гордона-Барнес, Касселя, Майера. [1] (6 год.)

**Практичне заняття 6.** Обчислення внесків в термодинамічні функції ідеального газу, обумовлених різними видами руху. (6 год.)

Тема 4. Статистична термодинаміка реальних газів (40 год.)

**Лекція 10.** Реальний газ, рівняння стану реальних газів, рівняння стану з віріальними коефіцієнтами. Різні вигляди міжчастинкових потенціалів взаємодії: Потенціали Ленард-Джонса, Сазерленда, (*ехр*-6)-потенціал, потенціал Штокмайера. (2 год.)

***Завдання для самостійної роботи*** Вигляд міжчастинкових потенціалів при врахуванні взаємодій більш високих порядків – диполь-квадрупольної, квадруполь-квадрупольної тощо. Наближені методи обчислення термодинамічних функцій реальних газів із використанням різних рівнянь стану [1,2,9]. (6 год.)

**Лекція 11.** Конфігураційний інтеграл реального газу, метод Майера обчислення конфігураційного інтегралу, групові інтеграли. Статистичне обґрунтування рівняння стану з віріальними коефіцієнтами. (2 год.)

***Завдання для самостійної роботи***Елементи теорії графів, побудова діаграм взаємодії в групах високих порядків. [1,9] (5 год.)

**Лекція 12.** Розрахунок групових інтегралів з використанням різних модельних потенціалів. Обчислення другого віріального коефіцієнту. Статистичне обчислення термодинамічних функцій реальних газів. (2 год.)

**Практичне завдання 7.** Розрахунки статистичної суми реальних газів, другого віріального коефіцієнту та термодинамічних функцій реальних газів з використанням різних модельних потенціалів: Сазерленда, Ленард-Джонса, прямокутної ями. (6 год.)

***Завдання для самостійної роботи***Потенціальна енергія взаємодії елементів кристалічної ґратки, константа Маделунга [1]. (6 год.)

**Лекція 13.** Коливальна складова енергії кристалів, сума станів коливального руху ідеальних кристалічних тіл і термодинамічні властивості, обумовлені коливальним рухом. Теорії теплоємності Ейнштейна та Дебая. (4 год.)

***Завдання для самостійної роботи*** Виведення функції розподілу за частотами в теорії Дебая [2,3,9]. (6 год.)

**Практичне заняття 8.** Термодинамічні властивості ідеальних кристалів. (2 год.)

Тема 5. Статистична термодинаміка конденсованого стану (14 год.)

**Лекція 14.** Статистична термодинаміка рідин. Решіткові моделі. Конфігураційний інтеграл, молекулярні функції розподілу, зв'язок між бінарною корелятивною функцією та функцією радіального розподілу. Вирази для термодинамічних параметрів рідини через функції розподілу. (2 год.)

***Завдання для самостійної роботи*** Поняття про метод Монте-Карло. Застосування методу Монте-Карло для розрахунку термодинамічних параметрів рідин [1,9] (6 год.)

Лекція 15. Статистичний розрахунок констант рівноваги. Статистико-термодинамічні аспекти теорії активного комплексу. (2 год.)

*Завдання для самостійної роботи* Статистична теорії розчинів. (5 год.)

Практичне заняття 9. Статистичний розрахунок констант рівноваги. (2 год.)

**Модульна контрольна робота №2 „Статистична термодинаміка газів, рідин і твердих тіл”** (2 год.)

Контрольні запитання до змістового модуля 2

1. Поясніть, яким чином пов'язані між собою сума станів системи та молекулярна статистична сума для ідеального газу. Чи може використовуватись формула, про яку йдеться, без N! у знаменнику?
2. Значення яких термодинамічних величин не залежить від вибору нульового рівня енергії і чому?
3. Чому значення молекулярних статистичних сум для поступального, обертального і коливального руху молекул ідеального газу відрізняються на багато порядків?
4. Наведіть умови, при яких не можна користуватися формулою для високотемпературного наближення при обчисленні статистичної суми обертального руху. Як проводяться розрахунки в цьому випадку?
5. Для чого в формулі високотемпературного наближення при обчисленні статистичної суми обертального руху вводиться ділення на ?
6. Що таке конфігураційний інтеграл?
7. В чому полягає метод Майера визначення конфігураційного інтеграла?
8. Який вигляд мають групові інтеграли?
9. Який вигляд має другий віріальний коефіцієнт, якщо враховувати міжчастинкову взаємодію у вигляді потенціалу Ленард-Джонса?
10. Проведіть порівняльну характеристику теорій теплоємності Ейнштейна та Дебая.

Контрольні завдання до змістового модуля 2

1. Розрахувати поступальну суму станів та поступальний внесок в ентропію різних ідеальних газів.
2. Розрахувати обертальну статистичну суму безпосереднім сумуванням та з використанням наближених формул.
3. Розрахувати коливальну статистичну суму та її зміну з температурою.
4. Розрахувати обертальний, коливальний та електронний внески в ентропію і теплоємність різних ідеальних газів.
5. Отримати рівняння стану реального газу користуючись виглядом міжчастинкового потенціалу взаємодії.
6. Розрахувати константу рівноваги певної запропонованої реакції статистичним методом, використовуючи дані про молекулярну будову речовин, що беруть участь у певній хімічній реакції.

Перелік запитань на іспит

1. Основні поняття і постулати статистичної термодинаміки (фазовий простір, різні типи ансамблів, функції розподілу; постулат рівних апріорних ймовірностей, ергодична гіпотеза, теорема Ліувілля)
2. Метод Больцмана. Математичні вирази розподілу Больцмана. Значення для хімії.
3. Розподіл Максвела за імпульсами та швидкостями. Розрахунок середніх значень.
4. Канонічний розподіл Гіббса. Розподіл Гіббса у квазікласичному наближенні.
5. Квантова статистика Бозе – Ейнштейна.
6. Квантова статистика Фермі – Дірака.
7. Статистичні аналоги термодинамічних функцій. Зв’язок термодинамічних функцій системи із сумою станів системи Z.
8. Молекулярні статистичні суми ідеального газу для поступального, обертального і коливального рухів.
9. Зв’язок термодинамічних функцій ідеального газу із молекулярними сумами по станах. Вирази для термодинамічних функцій при виділенні нульової енергії. Термодинамічні функції ідеального газу обумовлені різними видами руху.
10. Статистична термодинаміка реальних газів. Зв’язок між рівняннями стану реальних газів і параметрами міжчастинкового потенціалу взаємодії. Деякі модельні вирази для міжчастинкових потенціалів взаємодії.
11. Статистична термодинаміка реальних газів. Зв’язок між груповими інтегралами і рівнянням стану з віріальними коефіцієнтами.
12. Статистична термодинаміка реальних газів. Розрахунок другого віріального коефіцієнту. Зв’язок параметрів рівняння Ван-дер-Ваальса з параметрами парного потенціалу взаємодії.
13. Статистична термодинаміка рідин. Метод корелятивних функцій розподілу.
14. Статистична термодинаміка кристалів. Теорія теплоємності Ейнштейна.
15. Статистична термодинаміка кристалів. Теорія теплоємності Дебая.
16. Статистичний розрахунок констант рівноваги.

А також розв’язання задач тих типів, що перелічені для модулів 1 та 2.

Література

### Основна

1. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. – М., Высшая школа, 1998.
2. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. – М., Высшая школа, 1991.
3. Еремин В.Н. Основы химической термодинамики. – М., Высшая школа, 1978.
4. Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А. и др. Задачи по физической химии. – М.: Экзамен, 2003. –318 с.
5. Усенко Н.І., Роїк О.С. Статистична термодинаміка ідеального газу. Теорія і задачі. – К.:Логос, 2007. – 52 с.
6. Усенко Н.І. Основні поняття і методи статистичної термодинаміки. – К.: ВПЦ „Київський університет”, 2005. – 55 с.
7. Усенко Н.І. Статистичний розрахунок властивостей реальних газів. – К.:Логос, 2007. – 24 с.

### Додаткова

1. Ягодовский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2005. – 495 с.
2. Никольский Б.П. Физическая химия. – Л.: Химия, 1987. – 880 с.
3. Радушкевич Л.В. Курс статистической физики. – М.: Просвещение, 1966. – 420 с.
4. Кубо Р. Статистическая механика. – М.: Мир, 1967. – 452 с.
5. Шиллинг Г. Статистическая физика в примерах. – М.: Мир, 1976. – 432 с.
6. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1977. – 337 с.