

Программа по статистической термодинамике.

Основные идеи и понятия. Степени свободы, типы пространства и ансамблей.
Статистическая сумма по состояниям. Среднее по времени и по энергии.
Три постулата статистической термодинамики и теорема Лиувилля.
Три статистические функции распределения, вывод и сопоставление.
Вывод уравнения для расчета сумм по состояниям для систем с дискретными уровнями энергии. Факторы Больцмана и Гиббса.
Связь термодинамических величин с суммой по состояниям.
Энтропия в статистической термодинамике, отрицательные температуры.
Сумма по состояниям поступательного движения, классический и квантовый варианты.
Распределения молекул по скоростям одномерного и трехмерного движения. Уравнение состояния идеального газа и число ударов о стенку.
Термодинамические функции поступательного движения частиц. Парадокс Гиббса.
Колебательная сумма по состояниям. Квантовый и классический варианты.
Вклад колебаний в термодинамические функции, замороженные степени свободы.
Вращательная сумма по состояниям. Расчет суммы для разных интервалов температуры.
Вклад вращательной суммы в термодинамические функции.
Теорема о равном распределении энергии.
Внутренние вращения.
Электронная и ядерная суммы по состояниям.
Термодинамика идеального газа, расчет константы химического равновесия.
Проблемы описания свойств реальных систем. Конфигурационный интеграл.
Межмолекулярное взаимодействие. Потенциалы типа Сазерленда и Леннард-Джонса.
Групповые интегралы, функция Майера.
Вывод уравнения Ван-дер-Ваальса. Закон соответственных состояний.
Применение статистической термодинамики для описания свойств кристаллов.
Расчет энергии кристаллической решетки.
Определение теплоемкости кристаллов по Эйнштейну и Дебаю.
Электронный газ.
Дефекты в кристаллах. Модели Шоттки и Френкеля. Конфигурационная энтропия.
Кооперативные явления в кристаллах.
Вывод изотермы адсорбции Лэнгмюра.

Модельные представления о строении жидкостей.

Теория ячеек или свободного объема. Объяснение свойств регулярных и атермальных растворов.

Бинарная функция распределения для жидкостей.

ЛИТЕРАТУРА.

Основная

1. О.М.Полтораки Термодинамика в физической химии, М. Высшая школа, 1991
2. Н.А.Смирнова Методы статистической термодинамики в физической химии, М. Высшая школа, 1982
3. Е.Н.Еремин Основы химической термодинамики, М. Высшая школа, 1978

Дополнительная

4. Физическая химия, под ред.К.С.Краснова, М. Высшая школа, 1995
5. Ч.Киттель Статистическая термодинамика, М. Наука 1977
6. Ю.Б.Румер, М.Ш.Рывкин Термодинамика, статистическая физика и кинетика, М. Наука, 1977
7. Е.М.Кузнецова Методическая разработка семинарских занятий по статистической термодинамике, М. МГУ, Химфак 1980
8. А.А.Лопаткин, Л.Н.Сидоров Статистическая термодинамика в вопросах и ответах, М. МГУ, Химфак 1986
9. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц Статистическая физика, М. Наука, 1964
10. Дж.Гиршфельдер, Ч.Кертис, Р.Берд Молекулярная теория газов и жидкостей, М. Изд-во ИЛ, 1961
11. Задачи по термодинамике и статистической физике, под ред. П.Ландсберга, М. Мир, 1974