

UČNI NAČRT PREDMETA / COURSE SYLLABUS

Predmet:	STATISTIČNA TERMODINAMIKA TEKOČIN IN RAZTOPIN
Course Title:	STATISTICAL THERMODYNAMICS OF LIQUIDS AND SOLUTIONS

Študijski program in stopnja Study Programme and Level	Študijska smer Study Field	Letnik Academic Year	Semester Semester
UŠP Kemija, 2. stopnja	/	1. ali 2.	1. ali 4.
USP Chemistry, 2 nd Cycle	/	1 st or 2 nd	1 st or 4 th

Vrsta predmeta / Course Type: izbirni strokovni / Elective Professional

Univerzitetna koda predmeta / University Course Code: K2I18

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Vaje Tutorial	Klinične vaje Work	Druge oblike študija	Samost. delo Individual Work	ECTS
45	30	/	/	/	75	5

Nosilec predmeta / Lecturer: prof. dr. Vojeslav Vlachy, prof. dr. Barbara Hribar Lee

Jeziki / Languages: slovenski/ Slovenian
Predavanja / Lectures: /
Vaje / Tutorial: /

Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:

Študent oz. kandidat mora imeti predmet opredeljen kot študijsko obveznost.

Prerequisites:

The course has to be assigned to the student.

Vsebina:

Osnove statistične termodinamike: Opis mikroskopskega stanja, fazni prostor, kanonična porazdelitev, izoliran sistem, odprt sistem, N,P,T sistem, posplošeni (Gibbsov) sistem, fluktuacije.

Klasična statistična termodinamika: Konfiguracijski integral, struktura tekočin in prostorske porazdelitvene funkcije, Računanje termodinamičnih količin (notranja energija, virijalna enačba stanja, stisljivostna enačba), eksperimentalno določanje strukture kapljevin.

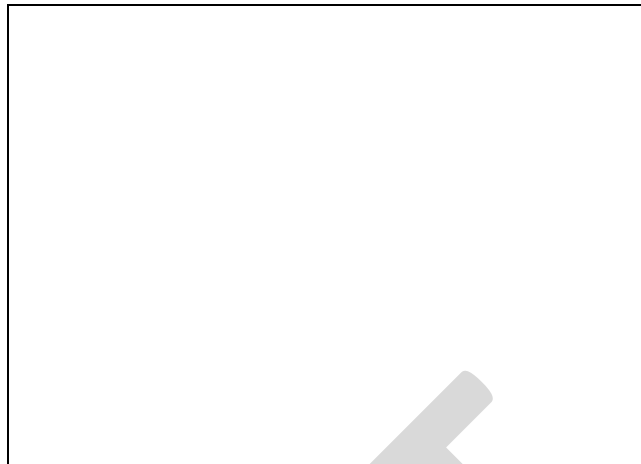
Računalniške simulacije: Metoda Monte Carlo, simulacije v kanoničnem, velekanoničnem in Gibbsovem ansamblu, računanje proste energije. Študij dinamike molekul.

Content (Syllabus outline):

Teorije kapljev in raztopin: Razvoj po gručah, enačba stanja, drugi virijalni koeficient, teorije na osnovi Ornstein–Zernikove enačbe (MSA, PY in HNC približki), numerično reševanje integralnih enačb. Perturbacijske metode, van der Waalsova enačba.

Delci v zunanjem polju: Teorija na osnovi gostotnega funkcionala, Poisson–Boltzmanova enačba in izboljšave.

Časovno odvisne korelacijske funkcije.



Temeljna literatura in viri / Readings:

- Hansen, J. P., McDonald, I. R., *Theory of Simple Liquids*, London: Academic Press, 1990; str. 1–72 in 97–206.
- Friedman, H. L., *A Course in Statistical Mechanics*, New Jersey: Prentice–Hall, 1985, str. 93 – 156.
- V. Vlachy; Zapiski s predavanj (pomožno gradivo dostopno na internetu).

Cilji in kompetence:

Cilj: Naloga statistične termodinamike je, da iz podatkov o lastnostih atomov in molekul ter sil med njimi izpelje makroskopske lastnosti snovi.

Kompetence: Na ta način omogoča molekularno interpretacijo merskih podatkov. Program je sestavljen tako, da omogoča študij tudi tistim študentom, to je, na primer, študentom farmacije in kemijske tehnologije, ki nimajo ustreznega predznanja. V prvem delu zato ponovimo nekatere osnove statistične termodinamike. Glavni del predmeta je namenjen metodam študija kapljev in raztopin, saj so le-te za kemika zelo pomembne. Na koncu obravnavamo sisteme v polju zunanje sile oziroma ob površini.

Objectives and Competences:



Predvideni študijski rezultati:

Znanje in razumevanje

Poznavanje metod statistične termodinamike tekočin in raztopin, ki jih obravnava ta predmet, omogoča razumevanje molekularnih pojavov v kemiji, tehnologiji in biofizikalni kemiji ter interpretacijo merskih podatkov.

Intended Learning Outcomes:

Knowledge and Comprehension



<p><u>Uporaba</u> Predmet omogoča zasnovo in študij modelov tekočin in raztopin kar je prvi korak pri načrtovanju procesov v industriji. Moderne računalniške metode omogočajo izračun merljivih lastnosti plinov, kapljevin in raztopin.</p>	<p><u>Application</u></p>
<p><u>Refleksija</u> Znanja, ki jih študent osvoji pri tem predmetu omogočajo razumevanje lastnosti tekočin in raztopin, kritično vrednotenje merskih podatkov ter načrtovanje poskusov in simulacij modelov snovi.</p>	<p><u>Analysis</u></p>
<p><u>Prenosljive spretnosti</u> Uporaba tuje literature in drugih virov, sposobnosti reševanja zahtevnejših problemov v kemiji in tehnologiji, kritična analiza rezultatov, računalniško programiranje, ustno in pisno sporočanje.</p>	<p><u>Skill-transference Ability</u></p>

Metode poučevanja in učenja:

Predavanja, seminarji.

Learning and Teaching Methods:

Načini ocenjevanja:

Izvedba zahtevnejše računske naloge (projekta) in ustni izpit.

Delež (v %) /

Weight (in %) **Assessment:**

"Type (examination, oral, coursework, project)"

Reference nosilca / Lecturer's references:

- Yu. V. Kalyuzhnyi, M. F. Holovko, and V. Vlachy, *Highly Asymmetric Electrolytes in the Associative Mean-Spherical Approximation*, J. Stat. Phys. **100**, 243– 265 (2000).
- B. Hribar, V. Vlachy, and O. Pizio, *Chemical Potential of Electrolytes Adsorbed in Porous Media with Charged Obstacles. Application of the Continuum Replica Methodology*, Molec. Phys., **100**, 3093 – 3103 (2002).
- T. Urbič and V. Vlachy, Yu.V. Kalyuzhnyi, and K. A. Dill, *Orientation-dependent theory for a two-dimensional model of water*, J. Chem. Phys., **118**, 5516 – 5525 (2003).