



1. PREDMET: FIZIKALNA KEMIJA 2

Šifra: 30-0017

Število kreditnih točk (ECTS): 6

Obseg ur: 90; predavanja 45, seminar 15, laboratorij 30

Program: univerzitetni študijski program Kemija

2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

Naloga statistične termodinamike je, da iz podatkov o lastnostih atomov in molekul ter sil med njimi, izpelje makroskopske lastnosti snovi. Na ta način omogoča molekularno interpretacijo merskih podatkov. V prvem delu obravnavamo osnove statistične termodinamike, le-te omogočajo globlje razumevanje pojmov kot so, toplota, entropija, termodinamično povprečje, kolebanje okoli povprečne vrednosti in drugi. Drugi del predmeta je namenjen prikazu posameznih primerov uporabe statistične termodinamike v kemiji.

3. VSEBINA

Osnove: Opis mikroskopskega stanja, kanonična porazdelitev, povprečja in kolebanja okoli povprečnih vrednosti, povezava s termodinamiko, izoliran sistem (mikrokanonična porazdelitev), odprt sistem, koncentracijska kolebanja, stisljivost in stabilnost sistema. Neodvisni podsistemi: Einsteinov model kristala, paramagnetna snov, Fermi-Diracova in Bose-Einsteinova statistika, razredčeni plini (eno in več atomski), kemično ravnotežje, Adsorpcija: Langmuirjeva, B.E.T. in druge izoterme, vezanje ligandov na makromolekulo. Klasična statistična termodinamika: Struktura tekočin in prostorske porazdelitvene funkcije, termodinamične količine (notranja energija, enačba stanja), povezava z eksperimentom, računalniške simulacije: metoda Monte Carlo, molekulska dinamika. Laboratorijske vaje so nadaljevanje praktikuma iz 3. letnika. Obsegajo štiri vaje: Parcialni molski volumen, Določanje koeficientov aktivnosti z merjenjem napetosti galvanskih členov, Viskoznost plinov, Absorpcijski spekter konjugiranjega barvila.

4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

Potrebno je znanje fizikalne kemije v obsegu predavanj iz 3. letnika.

5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

- Friedman, H. L. *A Course in Statistical Mechanics*. New Jersey: Prentice-Hall, 1985.
 - Hill, T. L. *Introduction to Statistical Thermodynamics*, Reading: Addison-Wesley, 1960.
 - Bratko, D. et. al.: *Laboratorijske vaje iz fizikalne kemije*, Ljubljana: Fakulteta za kemijo, 2002.
-

6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

Pisni in ustni izpit. Kolokvij iz laboratorijskih vaj.

PRIPRAVIL: Vojko Vlachy

DATUM: 1. 10. 2003

