



1. PREDMET: STATISTIČNA TERMODINAMIKA TEKOČIN IN RAZTOPIN

Šifra: 30-2022

Število kreditnih točk (ECTS): 12

Obseg ur: 60, predavanja 45, seminar 15

Program: podiplomski študij – smer 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. Program je sestavljen tako, da omogoča študij tudi tistim študentom, ki nimajo ustreznega predznanja, to je, na primer, študentom farmacije, kemijske tehnologije in drugim. V prvem delu ponovimo nekatere osnove statistične termodinamike. Glavni del predmeta je namenjen študiju kapljev in raztopin, saj so le-te za kemijo zelo pomembne. Na koncu obravnavamo sisteme v polju zunanje sile.

3. VSEBINA

Osnove statistične termodinamike. Opis mikroskopskega stanja, fazni prostor, kanonična porazdelitev, izoliran sistem, odprt sistem (mikrokanonična in velekanonična porazdelitev), Fermi-Diracova in Bose-Einsteinova statistika, neodvisni podsistemi: razredčeni plini, adsorbcija, kemično ravnotežje. Klasična statistična termodinamika. Konfiguracijski integral, struktura tekočin in prostorske porazdelitvene funkcije, termodinamične količine (notranja energija, enačba stanja), experimentalno določanje strukture kapljev. Računalniške simulacije. Simulacije v velekanoničnem in Gibbsovem ansamblu, računanje proste energije. 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. Delci v zunanem polju. Teorija na osnovi gostotnega funkcionala, Poisson-Boltzmanova enačba in izboljšave. Časovno odvisne korelacijske funkcije.

4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

Potrebno je znanje fizikalne kemije v obsegu predavanj iz 3. letnika. Zaželen je izpit iz Fizikalne kemije 2. Matematika 2.

5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

- Hansen J. P. in I.R. McDonald, I. R. *Theory of Simple Liquids*. London: Academic Press, 1990.
 - Friedman, H. L. *A Course in Statistical Mechanics*. New Jersey: Prentice-Hall, 1985.
-

6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

Izvedba zahtevnejše računske naloge (seminarja) in ustni izpit.

PRIPRAVIL: Vojko Vlachy

DATUM: 1. 10. 2003