

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Механико-математический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан

Л. В. Гензе

Рабочая программа дисциплины

Молекулярная физика и математические модели наномеханики

по направлению подготовки

01.04.03 Механика и математическое моделирование

Направленность (профиль) подготовки :

Механика жидкости, газа и нефтегазотранспортных систем

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2024, 2025

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

А.М.Бубенчиков

Председатель УМК

Е.А.Тарасов

Томск – 2024

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ПК-1 Способен самостоятельно решать исследовательские задачи в рамках реализации научного (научно-технического, инновационного) проекта.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК 1.1 Проводит исследования, направленные на решение отдельных исследовательских задач

ИПК 1.2 Определяет способы практического использования научных (научно-технических) результатов

ИПК 1.3 Осуществляет наставничество в процессе проведения исследований

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить аппарат молекулярной физики и математического и численного моделирования в молекулярной физике и наномеханике.

– Научиться применять понятийный аппарат молекулярной физики для решения практических задач профессиональной деятельности.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Первый семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 з.е., 216 часов, из которых:

-лекции: 32 ч.

-практические занятия: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Методы рассмотрения систем многих частиц

Границы применимости модели материальной точки и абсолютно твердого тела. Модель материального тела. Массы атомов и молекул. Количество вещества. Агрегатные состояния вещества. Основные признаки агрегатных состояний. Модель идеального газа. Динамический метод. Статистический метод. Термодинамический метод.

Тема 2. Состояния системы, постулат равновероятности и эргодическая гипотеза

Определение системы. Макроскопическое состояние. Равновесное состояние. Микроскопическое состояние. Статистический ансамбль систем. Микроканонический ансамбль. Различие микросостояний. Постулат равновероятности. Вычисление средних по

ансамблю. Вычисление средних по времени. Эргодическая гипотеза. Связь постулата равновероятности и эргодической гипотезы.

Тема 3. Вероятность макросостояния. Флуктуации

Вероятность макросостояния. Формулы элементарной комбинаторики. Расчет вероятности макросостояния. Формула Стирлинга, формула для вероятности макросостояния. Наиболее вероятное число частиц. Биномиальное распределение. Предельные формы биномиального распределения. Распределение Пуассона. Среднее число частиц в объеме. Флуктуации. Относительная величина флуктуаций.

Тема 4. Канонический ансамбль Распределение Гиббса, распределение Максвелла

Скоростные и энергетические микросостояния. Определение канонического ансамбля. Распределение Гиббса, или каноническое распределение. Нормировка распределения. Вычисление средних. Два подхода к изучению распределения. Плотность состояний. Распределение Максвелла. Характерные скорости распределения Максвелла. Частота ударов молекул о стенку. Число молекул в различных участках распределения Максвелла. Экспериментальная проверка распределения Максвелла. Принцип детального равновесия.

Тема 5. Распределение Больцмана. Давление

Независимость плотностей вероятности координат и скоростей частицы. Распределение Больцмана. Смесь газов в сосуде. Связь распределений Максвелла и Больцмана. Атмосфера планет. Основное уравнение кинетической теории газов. Уравнение Клапейрона–Менделеева. Закон Дальтона. Закон Авогадро. Подъемная сила. Измерение давления.

Тема 6. Температура. Начало термодинамики

Термометрическое тело и термометрическая величина. Шкала температур. Зависимость температуры от термометрического тела и термометрической величины. Термодинамическая шкала температур. Термометры. Нуль кельвин. Число степеней свободы. Сложные частицы со многими степенями свободы. Теорема о равнораспределении энергии. Расчет движения броуновской частицы. Задачи термодинамики. Работа. Теплота. Внутренняя энергия. Первое начало термодинамики.

Тема 7. Процессы в идеальных газах. Теплоемкость

Процессы. Неравновесные процессы. Равновесные процессы. Обратимые и необратимые процессы. Внутренняя энергия как функция состояния. Теплоемкость при постоянном объеме. Теплоемкость при постоянном давлении. Соотношение между теплоемкостями. Соотношение между теплоемкостями идеального газа. Теплоемкость идеального газа. Расхождение теории теплоемкостей идеального газа с экспериментом.

Тема 8. Энтропия. Цикл Карно

Физический смысл энтропии. Расчет изменения энтропии в процессах идеального газа. Специфичность теплоты как формы энергии. Работа цикла. Коэффициент полезного действия. Цикл Карно. Коэффициент полезного действия цикла Карно. Вычисление к. п. д. с помощью энтропии. Формулировка Кельвина второго начала термодинамики. Формулировка Клаузиуса. Эквивалентность формулировки Кельвина и Клаузиуса. Холодильная машина и нагреватель.

Тема 9. Второе начало термодинамики. Термодинамические функции

Вторая теорема Карно. Неравенство Клаузиуса. Энтропия. Второе начало термодинамики. Статистический характер второго начала термодинамики. Изменение

энтропии в необратимых процессах. Определение термодинамической функции. Термодинамическое тождество. Свободная энергия, или функция Гельмгольца. Термодинамическая функция Гиббса. Соотношения Максвелла.

Тема 10. Силы взаимодействия. Уравнение Ван-дер-Ваальса

Силы связи в молекулах. Ионная связь. Ковалентная связь. Межмолекулярные силы в твердых телах. Структура жидкостей. Силы Ван-дер-Ваальса. Потенциал межмолекулярного взаимодействия. Системы молекул. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Вириальная форма. Свойства многочленов третьей степени. Изотермы уравнения. Метастабильные состояния. Критические параметры. Закон соответственных состояний.

Тема 11. Эффект Джоуля-Томсона

Физическая сущность эффекта. Расчет дифференциального эффекта Джоуля-Томсона. Интегральный эффект. Эффект Джоуля-Томсона в газе Ван-дер-Ваальса. Сжижение газов. Свойства вещества вблизи 0 К.

Тема 12. Фазовые переходы

Свободная поверхностная энергия. Поверхностное натяжение. Механизм его возникновения. Условия равновесия на границе двух жидкостей. Условия равновесия на границе жидкость - твердое тело. Давление под искривленной поверхностью. Капиллярные явления. Испарение. Динамическое равновесие. Система пар – жидкость. Давление насыщенных паров вблизи искривленной поверхности жидкости. Кипение.

Тема 13. Процессы переноса в газах

Общее уравнение переноса. Теплопроводность. Вязкость. Самодиффузия. Связь между коэффициентами, характеризующими уравнение переноса. Взаимодиффузия в газе из различных молекул. Уравнение диффузии, зависящее от времени. Уравнение теплопроводности, зависящее от времени. Время релаксации. Время релаксации для концентрации. Время релаксации для температуры. Стационарные и нестационарные задачи теплопроводности и диффузии

Тема 14. Процессы переноса в твердых телах и жидкостях

Диффузия. Теплопроводность. Внешняя теплопроводность.

Тема 15. Потенциалы взаимодействий. Континуальная модель проницаемости наносетчатой структуры

Полуэмпирические потенциалы межмолекулярных взаимодействий. Спектральные потенциалы. Потенциал воздействия от бесконечной моноатомной нити. Математическая модель взаимодействия молекулы с наносетчатым материалом.

Тема 16. Модели проницаемости систем из нанопластин

Графеновая пластина. Дискретная модель. Количество молекул, падающих на единичную площадку. Модель эквивалентного однородного слоя.

Тема 17. Модели взаимодействия нанотрубок, фуллеренов со свободными молекулами/атомами

Нанотрубки, фуллерены. Хиральность нанотрубок. Потенциал воздействия от бесконечной нанотрубки. Проницаемость мембраны, составленной слоем параллельно уложенных нанотрубок. Метод окон проницаемости. Потенциал воздействия от сферы. Кристаллические решетки.

Тема 18. Модель динамики фуллеренов
Фуллерены. Подход Эйлера. Матрица поворота. Кинематические и динамические соотношения Эйлера.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, выполнения домашних заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в первом семестре проводится в устной форме по билетам. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Билеты содержат по два вопроса, проверяющих ИПК-1.1, ИПК-1.2, ИПК-1.3. Ответы на вопросы даются в развернутой форме.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Модель материального тела. Агрегатные состояния вещества. Основные признаки агрегатных состояний.
2. Модель идеального газа. Методы описания поведения систем частиц.
3. Элементарная теория вероятностей. Классическое и геометрическое определение вероятности.
4. Макроскопическое и микроскопическое состояния. Различие микросостояний по положениям и скоростям.
5. Статистический ансамбль систем. Постулат равновероятности.
6. Вычисление средних по ансамблю и по времени. Эргодическая гипотеза.
7. Расчет вероятности макросостояния.
8. Наиболее вероятное число частиц.
9. Среднее число частиц в объеме. Флуктуации. Относительная величина флуктуаций.
10. Канонический ансамбль. Распределение Гиббса.
11. Плотность состояний.
12. Распределение Максвелла. Плотность распределения. Характерные скорости.
13. Частота ударов молекулы о стенку. Число молекул в различных участках распределения Максвелла. Принцип детального равновесия.
14. Независимость плотностей вероятности координат и скоростей частицы. Распределение Больцмана.
15. Смесь газов в сосуде. Атмосфера планет.
16. Основное уравнение кинетической теории газов. Уравнение Клапейрона–Менделеева.
17. Закон Дальтона. Подъемная сила.
18. Термометрическое тело и термометрическая величина. Термометрическая шкала температур. Термометры.
19. Третье начало термодинамики. Распределение энергии по степеням свободы.
20. Броуновское движение. Задачи термодинамики. Работа.
21. Теплоемкость. Теплоемкость при постоянном объеме и при постоянном давлении. Соотношения между теплоемкостями.
22. Виды политропных процессов. Уравнения процессов.
23. Энтропия идеального газа. Физический смысл энтропии. Изменение энтропии в идеальном газе.
24. Работа цикла. Коэффициент полезного действия.
25. Цикл Карно. Второе начало термодинамики. Холодильная машина и нагреватель.

26. Силы связи в молекулах. Межмолекулярные силы в твердых телах. Силы Ван-дер-Ваальса. Потенциал межмолекулярного взаимодействия.
27. Отклонение свойств газов от идеальных. Вириальное уравнение состояния. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Вириальная форма уравнения Ван-дер-Ваальса.
28. Изотермы уравнения Ван-дер-Ваальса. Метастабильные состояния.
29. Критические параметры. Закон соответственных состояний газа Ван-дер-Ваальса.
30. Схема опыта Джоуля-Томсона. Эффект Джоуля-Томсона.
31. Дифференциальный эффект Джоуля – Томсона в реальном газе. Разность температур в процессе для газа Ван-дер-Ваальса
32. Температура инверсии. Отклонение газа от идеальности. Схема метода Линде.
33. Фазовые превращения. Двухфазная система "жидкость-пар". Уравнение Клапейрона-Клаузиуса.
34. Свободная энергия поверхности. Термодинамика поверхностного натяжения.
35. Кинематические характеристики молекулярного движения: поперечное сечение, средняя длина свободного пробега. Экспериментальное определение поперечного сечения столкновений.
36. Поперечное сечение столкновений в модели твердых сфер.
37. Общее уравнение переноса. Уравнения переноса для стационарного случая: теплопроводность, вязкость, диффузия.
38. Уравнения переноса, зависящие от времени.
39. Время релаксации для концентрации частиц. Явления переноса в разреженных газах.
40. Явления переноса в твердых телах.
41. Явления переноса в жидкостях.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка результатов контроля	Критерии соответствия
(отлично)	Дан правильный и развернутый ответ на вопрос. Студент четко и логично изложил свой ответ на поставленный в тесте вопрос.
(хорошо)	Дан правильный ответ на вопрос, но не все изложено развернуто и логически структурировано.
	В целом дан правильный ответ на вопрос, но он изложен поверхностно и с нарушением логики изложения.
(удовлетворительно)	Ответ представлен очень поверхностно и с нарушением логики изложения. Студент очень плохо владеет основными моделями и концепциями. Допущены существенные терминологические и фактические ошибки.
(неудовлетворительно)	Дан неправильный ответ, однозначно неправильное понимание вопроса.

Устная часть экзамена максимально может быть оценена 5 баллами за каждый вопрос. Итоговая оценка суммируется из оценок за каждый вопрос и оценки за дополнительные вопросы по желанию преподавателя. Ниже приведена формула расчета итоговой оценки:

$$S = \frac{S_1 + S_2}{2} + 0.2 * \sum_{i=1}^n d_i / n,$$

где S – итоговая оценка за зачет, S_1 и S_2 баллы за ответы на первый и второй вопросы, n – число дополнительных вопросов, d_i – баллы за i -ый дополнительный вопрос. Итоговая оценка округляется в пользу студента при значении дроби превышающем 0,5.

При ответе на вопрос оценивается полнота и точность ответа, логичность и аргументированность изложения материала, умения использовать в ответе фактический материал.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «IDo» - <https://lms.tsu.ru/course/view.php?id=25421>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Типовые задания для проведения текущего контроля успеваемости по дисциплине (примеры тестовых вопросов для текущего контроля СРС):

1. Что такое флуктуации физических величин
2. Что такое энтропия
3. Сформулируйте смысл распределения Максвелла по скоростям молекул
4. Сформулируйте первое начало термодинамики
5. Сформулируйте второе начало термодинамики
6. Сформулируйте третье начало термодинамики
7. Силы Ван-дер-Ваальса
8. Что такое жидкий раствор
9. Что такое поверхностное натяжение
10. Что такое изобара
11. Что такое изотерма
12. Потенциал Кихары
13. Потенциал Букиннгема
14. Потенциал Морзе
15. Потенциал Пешля-Теллера
16. Континуальная модель представления наноструктуры
17. Дискретная модель представления наноструктуры
18. Объемные и поверхностные кристаллы
19. Гибридизация электронных оболочек
20. Что такое жидкие мембраны

в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.

Практические занятия проводятся в соответствии с темами, представленными в п. 8.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Для успешного освоения материала студентам необходимо пользоваться источниками, информационными системами и базами данных, которые представлены в п. 12. Самостоятельная работа студентов состоит в проработке лекционного материала, материала с практических занятий и самостоятельного изучения дополнительных вопросов, более глубокого анализа лекций с помощью дополнительной литературы. Студенты должны внимательно относиться к подготовке к экзамену, ответственно подходить к самостоятельной работе и уверенно отвечать на вопросы тестов текущего контроля.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Матвеев А.Н. Молекулярная физика / А.Н. Матвеев – Лань, 2010. – 368 с.

- Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий / И.Г. Каплан – М.: Наука, 1982. – 312 с.
- Мембраны и мембранные технологии / коллектив авторов. Ответственный редактор А.Б Ярославцев – М.: Научный мир, 2013. – 612 с.
- Демидович Б.П. Математические основы квантовой механики – Лань, 200 с.

б) дополнительная литература:

- Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века / П. Харрис – М.: Техносфера, 2003 – 336 с.
- Федоров А.В. Физика наноструктур. Учебное пособие / А.В. Федоров [и др.] – СПб: Университет ИТМО, 2014. – 130 с.

в) ресурсы сети Интернет:

- журнал «Вестник Томского государственного университета. Математика и механика» <http://journals.tsu.ru/mathematics/>
- Официальный сайт обучающихся курсов ведущих вузов мира – <http://www.coursera.org/>
- Официальный сайт обучающихся курсов ведущих вузов России – <http://www.openedu.ru/>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint;
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.);
- средства разработки приложений и СУБД: Microsoft Visual Studio 2015;
- математический пакет: PTC Mathcad 15, MatLab.

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Бубенчиков Алексей Михайлович, д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры теоретической механики механико-математического факультета ТГУ.

Челнокова Анна Сергеевна, старший преподаватель кафедры теоретической механики механико-математического факультета ТГУ.