

Київський національний університет
імені Тараса Шевченка

Затверджено
Вченою радою фізичного факультету
«__»_____200__р.

Протокол №____
Голова вченої ради, декан

Проф. Макарець М.В.

Фізичний факультет
Кафедра молекулярної фізики

Доктор фізико-математичних наук,
Професор Сисоєв Володимир Михайлович

Викладачі, що ведуть лабораторні заняття:

ФІЗИКА РІДИН

РОБОЧА НАВЧАЛЬНА ПРОГРАМА ДИСЦИПЛІНИ

для студентів 4-го курсу фізичного факультету
групи спеціалізації „Медична фізика” та „Молекулярна фізика”
спеціальності 6.070100

Затверджено
кафедрою молекулярної фізики
«__»_____200__р.

Протокол №____
Завідувач кафедри

Проф. Булавін Л.А.

Вступ

Дисципліна «Фізика рідин» для студентів фізичного факультету є вибірковою дисципліною за вибором вищого навчального закладу для спеціалізацій «молекулярна фізика» та «медична фізика», що читається у восьмому семестрі в обсязі 2 кредитів (64 годин), в тому числі лекцій 32 години і 32 годин самостійної роботи. Закінчується іспитом у восьмому семестрі.

Метою і завданням навчальної дисципліни «Фізика рідин» є оволодіння сучасними експериментальними методами дослідження молекулярної структури та фізичних властивостей рідин; математичними методами термодинаміки, гідродинаміки, статистичної фізики, комп'ютерного моделювання, теоретичними положеннями та основними застосуваннями цих методів при постановці та інтерпретуванні результатів експериментів.

Предмет навчальної дисципліни «Фізика рідин» включає основні методи рівноважної та нерівноважної статистичної механіки та термодинаміки, лінійної та нелінійної механіки суцільних середовищ.

Вимоги до знань та вмінь.

Студент повинен знати:

1. Методи і точність експериментального вивчення молекулярної структури, рівноважних і нерівноважних властивостей рідин у випадках, коли деформуюча сила є сталою, миттєво діючою або змінною за періодичним законом.
2. Основи фізичної кінетики.
3. Типи міжмолекулярного зв'язку, теоретичні та експериментальні методи їх дослідження.
4. Квантовомеханічні основи будови молекул.

Студент повинен вміти:

1. Логічно та послідовно формулювати основні принципи і закони статистичної фізики, термодинаміки, фізичної кінетики та квантової механіки.
2. Користуватися комп'ютерними програмами розрахунку структурних та енергетичних характеристик рідин на основі даних експерименту.
3. Моделювати за допомогою числових методів молекулярної динаміки та Монте-Карло структуру, кінетичні, пружні та теплові властивості рідин.
4. Аналітично описувати та аналізувати експериментальні залежності.
5. Самостійно працювати з літературою по молекулярній фізиці та фізиці рідин, аналізувати комп'ютерні програми, знаходити необхідні дані у довідниках, робити оцінюючі передбачення.

Місце в структурно-логічній схемі спеціальності.

Нормативно-навчальна дисципліна «Фізика рідин» є складовою циклу професійної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня бакалавр та магістр за спеціалізаціями молекулярна фізика та медична фізика. Вона спирається на знання, отримані студентом, в рамках базових курсів з класичної механіки, молекулярної фізики, статистичної фізики та термодинаміки. У свою чергу, цей предмет є підґрунтям для вивчення таких дисциплін як „Сучасні проблеми фізики”, „Міжмолекулярна взаємодія” та „Фізична кінетика”, а також є основою для виконання магістерських та бакалаврських робіт за тематикою кафедри молекулярної фізики.

Система контролю знань та умови складання іспиту.

Навчальна дисципліна «Фізика рідин» оцінюється за модульно-рейтинговою системою. Вона складається з 2 модулів. Результати навчальної діяльності студентів оцінюється за 100-бальною шкалою.

Форми поточного контролю: оцінювання результатів виконання домашніх самостійних завдань. Максимальна кількість балів, яку студент може отримати за виконання домашніх завдань в одному модулі дорівнює **5 балам**. Наприкінці кожного змістовного модулю проводиться контроль знань у вигляді **модульної письмової контрольної роботи**. Максимальна кількість балів, яку студент може отримати за модульну контрольну роботу, дорівнює **15 балам**.

Підсумковий модульний контроль знань студента проводиться у формі іспиту, під час якого може бути отримана максимальна кількість балів – **60 балів**.

Підсумкова семестрова рейтингова оцінка складається з семестрової модульної та екзаменаційної оцінок і дорівнює **100 балам**.

Підсумкова оцінка з дисципліни у балах 100-бальної шкали переводиться у **п'ятибальну** (національну шкалу):

За 100-бальною шкалою	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	Відмінно
75 – 89	Добре
60 – 74	Задовільно
35 – 59	Незадовільно
1 – 34	

При цьому, кількість балів відповідає оцінці:

1 – 34 – „незадовільно” з обов’язковим повторним вивченням дисципліни;

35 – 59 – „незадовільно” з можливістю повторного складання;

60 – 74 – „задовільно”;

75 – 89 – „добре”;

90 – 100 – „відмінно”.

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І СЕМІНАРСЬКИХ ЗАНЯТЬ

№ лекції	Назва лекції	Кількість годин			
		лекції	семінари/ лаборант., практичні	самост. робота	інші форми контр.
Змістовий модуль 1					
1	Молекулярна структура рідин. Методи та результати експериментального дослідження.	2		2	
2	Корелятивні функції як метод теоретичного дослідження молекулярної структури рідин.	2		2	
3	Корелятивні функції у суперпозиційному наближенні.	2		2	
4	Рівняння Орнштейна-Церніке. Теорія Перкуса-Йєвіка.	2		2	
5	Метод зв’язаних діаграм. Рівняння де Бура і Ван Леевена.	2		2	
6	Статистичні та модельні теорії рівняння стану рідин. Статистична теорія рівняння стану Боголюбова М.М.	2		2	
7	Модельні теорії рівняння стану рідин. Коміркова теорія Леонарда-Джонса і Девоншайра.	2		2	

8	Моделльні теорії рівняння стану рідин Леонарда-Джонса і Девоншайра.	2		2	
9	Рівняння стану Ейрінга.				
10	Діркові теорії рівняння стану рідин.	2		2	
МОДУЛЬНА КОНТРОЛЬНА РОБОТА					
Оцінка за модульну контрольну роботу					
Оцінка за виконання домашніх завдань					
Змістовий модуль 2					
11	Експериментальні методи та результати дослідження рівняння стану рідин.	2		2	
12	Напівемпіричні рівняння стану рідин.	2		2	
13	Методи молекулярної динаміки та Монте-Карло як основні методи комп'ютерного моделювання у фізиці рідин. Фізичні основи методу Монте-Карло.	2		2	
14	Фізичні основи методу молекулярної динаміки.	2		2	
15	Стисливість та теплове розширення рідин та рідинних систем.	2		2	
16	Калоричне рівняння стану рідин. Теплоємність C_p і C_v рідин.	2		2	
МОДУЛЬНА КОНТРОЛЬНА РОБОТА					
Оцінка за модульну контрольну роботу					
Оцінка за виконання домашніх завдань					
ІСПИТ					
Оцінка за іспит					
ВСЬОГО		32		32	

Загальний обсяг 64 год., в тому числі:
лекції – 32 год.
самостійна робота – 32 год.

Тематично-змістовна частина курсу.

Змістовний модуль I.

Лекція 1 Молекулярна структура рідин. Методи та результати експериментального дослідження.

М-, К- та D-структури рідин. Методи експериментального дослідження структури. Функція радіального розподілу атомної густини $\rho(r)$. Ближнє впорядкування. Структурні характеристики Z та R . Зміна структури при плавленні речовини. Вплив термодинамічних параметрів T і p на структуру. Зв'язок $\rho(r)$ з бінарною функцією розподілу густини ймовірності певного положення 2-х частинок $g_2(r)$.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
- Література* [1, 7].

Лекція 2 Корелятивні функції як метод теоретичного дослідження молекулярної структури рідин.

Теоретичні методи дослідження молекулярної структури. Корелятивні функції різного порядку $g_s(q_1, q_2, \dots, q_s)$. Зв'язок $g_s(q_1, q_2, \dots, q_s)$ з функцією густини ймовірностей різних статистичних станів Гіббса $\rho_N(q_1, q_2, \dots, q_N)$. Теорія ББГКІ. Система інтегро-диференціальних рівнянь для $g_s(q_1, q_2, \dots, q_s)$. Умова ослаблення кореляцій. Розв'язок системи інтегро-диференціальних рівнянь для $g_s(q_1, q_2, \dots, q_s)$ у випадку малої густини системи. Фізичний зміст розв'язку.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
- Література* [3, 7].

Лекція 3 Корелятивні функції у суперпозиційному наближенні.

Суперпозиційне наближення Кірквуда. Аналіз похибки визначення $g_2(r)$ в цьому наближенні для потенціальних моделей жорстких сфер та Леонарда-Джонса. Розв'язок інтегро-диференціального рівняння для $g_2(r)$ в суперпозиційному наближенні. Фізичний зміст цього розв'язку. Порівняння результатів розрахунку з експериментом.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
- Література* [3,7].

Лекція 4 Рівняння Орнштейна-Церніке. Теорія Перкуса-Йєвіка

Повна $h(r)$ та пряма $c(r)$ корелятивні функції. Їх залежність від r . Зв'язок між $h(r)$ та $c(r)$. Метод функціонального розкладу. Рівняння для $g_2(r)$ в теорії Перкуса-Йєвіка. Фізичний зміст розв'язків.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
- Література [5,7].*

Лекція 5 Метод зв'язаних діаграм. Рівняння де Бура і Ван Леевена

Зв'язані діаграми. Особливості діаграм. Діаграмний розклад корелятивних функцій $h(r)$, $c(r)$ та $\omega(r)$. Рівняння де Бура і Ван Леевана. Рівняння для $g_2(r)$ наближення Перкуса-Йєвіка та надзаплутаних ланцюгів. Фізичний зміст розв'язків.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
- Література [5,7,8].*

Лекція 6 Статистичні та модельні теорії рівняння стану рідин. Статистична теорія рівняння стану Боголюбова М.М.

Теоретичні методи розрахунку рівняння стану. Рівняння стану Боголюбова М.М., Перкуса-Йєвіка, надзаплутаних ланцюгів та їх аналіз.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
- Література [3,7].*

Лекція 7 Модельні теорії рівняння стану рідин. Коміркова теорія Леннарда-Джонса і Девоншайра.

Конфігураційний інтеграл системи. Вільний об'єм. Енергія середнього поля. Рівняння стану Леннарда-Джонса і Девоншайра, область його застосування.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
- Література [4,7].*

Лекція 8 Модельні теорії рівняння стану рідин Леонарда-Джонса і Девоншайра

Конфігураційний інтеграл системи. Вільний об'єм. Енергія середнього поля. Рівняння стану Леннарда-Джонса і Девоншайра, область його застосування.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [4,7].

Лекція 9 Рівняння стану Ейрінга

Рівняння стану Ейрінга та область його застосування. Порівняння результатів теорії та експерименту.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [4,7].

Лекція 10 Діркові теорії рівняння стану рідин

Дірка в теорії Френкеля Я.І. Рівняння стану Френкеля Я.І. Діркові варіанти коміркових теорій Оно, Чернуші, Пікка, Хілла.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

3. Вивчення матеріалу лекцій.
4. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [4,7].

Контрольні запитання до змістовного модуля І:

- 1) Визначити особливості молекулярної структури рідин. Характеристики ближньої впорядкованості та їх залежність від температури.
- 2) Фізичний зміст корелятивних функцій. Порівняння розмірностей корелятивних функцій n-го порядку та функції розподілу густини ймовірностей Гіббса. Умови нормування.
- 3) Визначити відмінності повної, прямої та бінарної корелятивних функцій.

- 4) Розклад в ряд Тейлора за густиною повної та прямої корелятивної функцій та корелятивного потенціалу методом зв'язаних діаграм.
- 5) Порівняння методів отримання рівняння стану в статистичних та модельних теоріях. Обґрунтувати область їх застосування.
- 6) Проаналізувати відмінності в коміркових та діркових модельних теоріях та визначити в яких термодинамічних умовах мають проявитися переваги кожної з них.

Завдання для самостійної роботи до змістовного модуля I:

- 1) Молекулярна будова рідин. Її характеристики. Залежність від температури.
- 2) Зміна ближнього впорядкування при плавленні.
- 3) Молекулярна структура нормальних та циклопарафінів.
- 4) Молекулярна структура води.
- 5) Молекулярна структура нормальних алкілбензолів.
- 6) Молекулярна структура нормальних спиртів.
- 7) Розрахунок бінарної корелятивної функції для модельних потенціалів жорстких сфер та Сюзерленда.
- 8) Залежність $g_2(r)$ від n в інтегральних теоріях.

Змістовний модуль II:

Лекція 11 Експериментальні методи та результати дослідження рівняння стану рідин.

Методи експериментальної термодинаміки. Методи p - V - T дослідження рідин. Фактор стиснення рідин та його залежність від p і T .

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [4, 7].

Лекція 12 Напівемпіричні рівняння стану рідин.

Ізотермічні малопараметричні рівняння стану. Рівняння стану Тейта. Фізичний зміст його констант. Їх залежність від молекулярної структури.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [7].

Лекція 13 Методи молекулярної динаміки та Монте-Карло як основні методи комп'ютерного моделювання у фізиці рідин. Фізичні основи методу Монте-Карло.

Фізичні основи методу Монте-Карло. Гіпотеза ергодичності. Періодичні граничні умови. Визначення положення частинок основної комірки.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [5,7,8].

Лекція 14 Фізичні основи методу молекулярної динаміки

Методи наближеного інтегрування рівняння руху частинок основної комірки. Розрахунок внутрішньої енергії, рівняння стану та бінарної функції розподілу методами Монте-Карло та молекулярної динаміки.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [5,7,8].

Лекція 15 Стисливість та теплове розширення рідин та рідинних систем

Коефіцієнти ізотермічної та адіабатичної стисливості та теплового розширення та їх залежність від тиску і температури та молекулярної будови. Результати експериментального дослідження та їх порівняння зі статистичними та модельними теоріями.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.

2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [2,3,7].

Лекція 16 Калоричне рівняння стану рідин. Теплоємність C_p і C_v рідин

Отримання калоричного рівняння стану та виразу для C_v рідин з цього рівняння. Аналіз кінетичного та структурного внесків в теплоємність C_v . Кількісні розрахунки цих внесків для молекулярних рідин. Їх залежність від тиску і температури

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекцій.
2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [4,7].

Контрольні запитання до змістовного модуля II:

- 1) Зображуюча точка ланцюга випадкових переміщень.
- 2) Періодичні граничні умови.
- 3) Статистичні усереднення в методі Монте-Карло.
- 4) Методи наближеного інтегрування рівняння руху частинок в методі молекулярної динаміки.
- 5) Стійкість алгоритмів розв'язку системи рівнянь молекулярної динаміки. Її умови.
- 6) Часова еволюція системи в методі молекулярної динаміки.
- 7) Залежність коефіцієнта стисливості, теплового розширення від макрота мікропараметрів.
- 8) Теплоємність рідин та калоричне рівняння стану.
- 9) Експериментальні методи отримання рівняння стану рідин.
- 10) Методи аналізу напівемпіричних рівнянь стану. Два підходи до отримання емпіричних рівнянь стану.
- 11) Діаграми стану атомарних і молекулярних рідин.

Завдання для самостійної роботи до змістовного модуля II:

- 1) Порівняння можливості опису молекулярної структури рідин інтегральними та числовими методами. Розрахувати структурні характеристики атомарних рідин.
- 2) Ізоструктурні рідини.
- 3) Побудувати алгоритм розрахунку бінарної функції розподілу в методі Монте-Карло.
- 4) Побудувати алгоритм розрахунку бінарної функції розподілу в методі молекулярної динаміки.
- 5) Побудувати алгоритм розрахунку внутрішньої енергії в методі Монте-Карло.
- 6) Побудувати алгоритм розрахунку внутрішньої енергії в методі молекулярної динаміки.
- 7) Побудувати алгоритм розрахунку рівняння стану в методі Монте-Карло.
- 8) Побудувати алгоритм розрахунку рівняння стану в методі молекулярної динаміки.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Адаменко І.І., Булавін Л.А. Експериментальні та теоретичні методи визначення молекулярної структури рідин. – К.: РВЦ КУ, 1998.
2. Адаменко І.І., Гаврюшенко Д.А., Сисоєв В.М. Статистична термодинаміка рідин. –К.: РВЦ КУ, 1998.
3. Фішер Й.З. Статистична теорія рідин. – К.: Вид-во фіз.-мат літ., 1969.
4. Гиршфельдер, Кертис, Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: Наука, 1961.
5. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. – М.: Мир, 1978.
6. Физическая акустика. Свойства газов и жидкостей. /Под ред. У. Мэзона. – М.: Мир, 1968.
7. Адаменко І.І., Булавін Л.А. Фізика рідин та рідинних систем. – К.: АКМА, 2006.
8. Физика простых жидкостей. Т.1,2. /Под ред. Темперли. – М.: Мир, 1974.