

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут фізики НАН України



ЗАТВЕРДЖУЮ

Директором Інституту фізики НАН
України, член-кор. НАНУ, д.ф.-м.н.

М.В. Бондар

(підпис)

« 27 » жовтня 2023 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ВК.05

**Статистична термодинаміка і фазові переходи
для аспірантів**

спеціальності: 104 Фізика і астрономія

третього (освітньо-наукового) рівня
вищої освіти – доктор філософії

Київ - 2023

Розробник:

С.н.с., провідний наук. спів. відділу теоретичної фізики Інституту фізики НАНУ,
доктор фіз.-мат. наук. ВМ /В.М. Пергаменщик/

Робочу програму узгоджено науково-методичною радою

Протокол № 10-1 від 24 жовтня 2023 р.

Головою науково-методичної ради МВБ /М.В. Бондар/

Робочу програму затверджено Вченою радою Інституту фізики НАНУ

Протокол № 10 від 26 жовтня 2023 р.

Голова Вченої ради МВБ /М.В. Бондар/

Робочу програму погоджено з гарантом освітньо-наукової програми зі
спеціальності 104 «Фізика та астрономія» 27 жовтня 2023р.

Гарант освітньої програми МВБ /М.В. Бондар/

**Пролонговано Вченою радою Інституту фізики НАН України:**

навчальні роки продовження	Голова Вченої ради ІФ НАН України	підпис	№ протоколу	дата протоколу
20 <u>24</u> /20 <u>25</u>	<u>М.В. Бондар</u>	<u>МВБ</u>	<u>5</u>	<u>27.06.2024</u>
20 ____ /20 ____				
20 ____ /20 ____				
20 ____ /20 ____				



1. Загальні відомості

Найменування показників	Характеристика дисципліни за денною формою навчання
Вид дисципліни	вибіркова
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Загальний обсяг кредитів / годин	4/120
Курс	2
Семестр	2
Кількість змістових модулів з розподілом	1
Обсяг кредитів	4
Обсяг годин, В тому числі:	120
Лекції	30
Індивідуальні заняття	15
Самостійна робота	75
Форма підсумкового контролю	екзамен

2. Мета, завдання та очікувані результати навчальної дисципліни

Робоча програма навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи» є нормативним документом, який розроблений на основі освітньо-наукової програми, далі ОП, (затверджена Вченою радою Інституту фізики НАН України, протоколом № 10 від 26 жовтня 2023 року) підготовки здобувача третього рівня відповідно до навчального плану спеціальності 104 «Фізика та астрономія»

Передумова вивчення. Навчальний курс ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи» є складовою циклу професійної підготовки фахівців третього освітньо-кваліфікаційного рівня “доктор філософії”. Програма курсу орієнтована на аспірантів, які вже знайомі з загальним курсом статистичної фізики та термодинаміки.

Мета навчальної дисципліни. ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи»: формування систематичних знань та поглибленого розуміння фундаментальних основ статистичної фізики. Нагадати, упорядкувати, поглибити і привести в робочий стан основні ідеї і формули рівноважної статистичної фізики і термодинаміки; познайомити з основними поняттями теорії симетрії і фазових переходів, зокрема, ознайомити з макроскопічним аспектом фізики рідинних кристалів та їхніх фазових перетворень.

Зміст навчальної дисципліни. Теоретичні та практичні знання, набуті при вивченні дисципліни ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи», є основою для багатьох фізичних досліджень. Результат вивчення дисципліни полягає в знанні фізичних основ сучасних методів отримання і дослідження надтонких органічних плівок та органометалічних інтерфейсів, знанні структурної будови плівок та області практичних застосувань.

Предметом навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи» є викладання базових знань з статистичної фізики і термодинаміки, теорії фазових переходів, і, зокрема, макроскопічної фізики рідинних кристалів.

Основними завданнями навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи» є формування базису знань в межах матеріалу, що вивчається. Дисципліна готує аспірантів до сприймання матеріалу інших спецкурсів, передбачених програмою спеціалізації.

Фахові програмні результати навчання (вимоги до знань та вмінь)

В результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен

Знати: зв'язок мікро- та макроскопічного підходів, основні постулати і закони термодинаміки; роль ентропії, інших термодинамічних потенціалів (енергії, ентальпії, вільних енергій Гібса та Гельмгольца) і їхній зв'язок із статистичною сумою; ідею та застосування параметру порядку, його зв'язок з симетрією макроскопічної фази; теорію фазових переходів другого роду в наближенні середнього поля (теорію Ландау), термодинаміку переходу першого

роду на прикладі переходу нематик – ізотропна рідина; основні положення теорії пружності нематичного рідинного кристалу.

Вміти: вирізняти термодинамічні ефекти серед інших в процесі своєї роботи; робити оцінки імовірностей різних ефектів, станів, рівнів енергії тощо; знаходити адекватні параметри порядку в реальних задачах і застосовувати теорію Ландау до опису простих фазових переходів; застосовувати метод статистичної суми для простих задач; ідентифікувати нематичну фазу і „читати“ деформації директора за допомогою мікроскопа

Завданням навчальної дисципліни (відповідно до переліку ОП) ДВА.05 «Актуальні проблеми фізичної та молекулярної електроніки» набути компетентності:

Загальні: ЗК1,ЗК2, ЗК3.

Спеціальні: СК1, СК2, СК5, СК6

Програмні результати навчання: РН1, РН4, РН5, РН6, РН7, РН8, РН9.

3. Тематичний план

(структура залікового кредиту)

з навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи»

(2 курс – 1 семестр)

№	Зміст	Лекції, год.	Семінарські, год.	Самостійна робота, год.	Разом, год.
1.	Лекція 1. Вступ. Мікроскопічний (механічний) і макроскопічний опис багаточастинкової системи.	3	0	7	10
2.	Лекція 2 Ентропія. Закон зростання ентропії (другий закон термодинаміки). Закон великих чисел. Самостійна робота: [1] #1-5,7,8.	3	3	7	13
3.	Лекція 3. Ентропія підсистеми є функцією її середньої енергії. Температура. Перший закон термодинаміки. Хемічний потенціал. Самостійна робота: [1] #9,11,12,13.	3	0	8	11
4.	Лекція 4. Термодинамічні потенціали і перетворення Лежандра. Умови термодинамічної рівноваги за постійної енергії, об'єму, тиску. Самостійна робота: [1] #12,13,14,15,24,25;	3	0	7	10
5.	Лекція 5. Розподіл Гіббса. Статистична сума. Середні і спостережувані. Вираз для ентропії. Самостійна робота: [1] #28,31,36,37,38; [2]#6.5,6.6,7.1.	3	3	7	13
6.	Лекція 6. Статистична механіка ідеального газу. Розподіл Максвелла. Самостійна робота: [1] #29 і задачі 2,3,4;#41,42. Вивести термодинаміку ідеального газу.	3	3	8	14
7.	Лекція 7. Порядок і симетрія. Фаза = макроскопічна симетрія тіла. Параметр порядку. Полярна та неполярна симетрія (феромагнітний та нематичний порядок).	3	3	8	14

	Самостійна робота: [1] #141,142; [3]#3.5,3.6.				
8.	Лекція 8. Фазовий перехід другого роду. Теорія Ландау. Самостійна робота: [1] #141,142; [3]#4.2,4.3,4.6.	3	0	8	11
9.	Лекція 9. Фазовий перехід першого роду (нематик – ізотропна рідина). Гістерезис. Переохолоджена ізотропна фаза і перегріта нематична фаза. Самостійна робота: [1] #141,142; [3]#4.4,4.5.4.6 ; [4]; перехід рідина- пар;	3	3	8	14
10.	Лекція 10. Фази рідинних кристалів. Пружність нематика. Самостійна робота: [4] глава 1,#3.1; [5]#3.1,3.2,5.1,.	3	0	7	10
Всього		30	15	75	120

Методичне забезпечення навчальної дисципліни:

опорні конспекти лекцій, бібліотечні посібники зі списку рекомендованої літератури, електронні посібники, мультимедійні презентації, довідково-інформаційні інтернет-джерела тощо.

4. Зміст навчальної дисципліни

БК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи»

Тема 1. Вступ. Мікроскопічний механічний підхід і необхідність спеціального макроскопічного підходу до опису макроскопічних тіл. Мікроскопічний (механічний) опис багаточастинкової системи: квантові числа, класичний опис стану, фазовий простір. Логіка введення поняття макроскопічних станів. Імовірність мікро та макростанів замкненої системи. Ентропія. Закон зростання ентропії (другий закон термодинаміки). Закон великих чисел: середнє і найімовірніше значення спостережуваної.

Література: 1,2.

Тема 2. Термодинамічні потенціали і основи термодинаміки. Ентропія підсистеми є функцією її середньої енергії. Температура. Перший закон термодинаміки для системи із фіксованим та нефіксованим числом частинок. Адіабатичний процес. Хемічний потенціал. Чому тепло і робота не є потенціалами, а їхні зміни не є диференціалами. Термодинамічні потенціали: вільна енергія Гельмгольца, Гіббса, ентальпія. Як отримати потенціали з першого закону за допомогою перетворення Лежандра. Як з них отримати енергію, ентропію, тиск, об'єм, хемічний потенціал, питому теплоємність. Умови термодинамічної рівноваги за постійної енергії, об'єму, тиску.

Література: 1,2.

Тема 3. Розподіл Гіббса і основи статистичної механіки. Розподіл Гіббса для підсистеми великої системи. Статистична сума. Вираз для ентропії. Розподіл Гіббса в системі з енергією, що є адитивною за частинками і різними ступенями вільності. Розподіл Больцмана.

Література: 1,2.

Тема 4. Статистична механіка ідеального газу. Простіший приклад застосування методів статистичної суми – термодинаміка ідеального газу. Розподіл Максвелла. Розподіли за абсолютними значеннями швидкості та кінетичної енергії. Термодинаміка ідеального газу: статсума, вільна енергія, енергія, тиск, теплоємності за постійного об'єму та тиску.

Література: 1,2.

Тема 5. Параметр порядку і симетрія. Теорія Ландау фазових переходів другого роду.

Порядок і симетрія. Фаза = макроскопічна симетрія тіла. Параметр порядку. Полярна та неполярна симетрія (ферромагнітний та нематичний порядок). Параметри порядку полярної (ферромагнет) і неполярної (нематик) фаз. Фазовий перехід другого роду. Теорія Ландау. Розклад вільної енергії за параметром порядку і її вигляд до і після переходу. Спонтанне порушення симетрії. Неперервні і розривні термодинамічні величини. Фазовий перехід ізотропне тіло (парамагнетик)– ферромагнетик.

Література: 1,3.

Тема 6. Фазовий перехід першого роду. Фазовий перехід першого роду нематик – ізотропна рідина. Директор і параметр порядку неполярної (нематичної) фази. Розклад вільної енергії за скалярним параметром порядку S і її вигляд до і після переходу. Гістерезис. Переохолоджена ізотропна фаза і перегріта нематична фаза. Співіснування фаз.

Література: 3,4,5.

Тема 7. Рідинно-кристалічні фази. Пружна енергія нематичного рідинного кристалу.

Ідея рідинно-кристалічного порядку. Різні фази: нематик, смектик А і С, холестерік. Пружна енергія і похідні директора за просторовими координатами. Інваріантні диференціальні оператори і нематична симетрія. Три основні моди пружних деформацій нематичного директора: скіс, закрут, згін (splay, twist, bend). Пружна вільна енергія.

Література: 3,4,5.

5. Практичні заняття

з навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи»

Практичне закріплення лекційного матеріалу та наукові доповіді аспіранта пов'язані з темами лекцій і є частиною змісту дисципліни.

6. Самостійна робота

з навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи»

№	Зміст самостійної роботи аспірантів	Обсяг, годин
1.	Вивчення матеріалу лекції	30
2.	Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення	45
Усього за навчальну дисципліну		75

7. Методи викладання

з навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи»

У процесі викладання дисципліни використовуються такі методи:

- 1) методи організації та здійснення навчально-пізнавальної діяльності (бесіда, лекція; ілюстрація; лабораторні роботи, реферати; самостійна робота студентів);
- 2) методи стимулювання й мотивації навчально-пізнавальної діяльності (навчальні дискусії, модульно-рейтингова система знань);
- 3) методи контролю (самоконтролю, взаємоконтролю), корекції (самокорекції, взаємокорекції) за ефективністю навчально-пізнавальної діяльності.

8. Рейтингова система оцінювання

з навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинаміка і фазові переходи»

Основними формами організації контролю у процесі вивчення студентами даної дисципліни є індивідуальна, групова та фронтальна перевірка знань, вмінь та навичок студентів (усна та письмова). Рейтинг аспіранта складається з наступних отриманих балів:

1. Експрес-контроль – 20 балів. (усне опитування чи самостійні роботи під час навчального процесу)
2. Практичні заняття та самостійна робота – 40 балів.
3. Екзамен – 40 балів.

Заохочувальні та штрафні бали

1. При відсутності на лекції/практичному занятті без поважних причин -2 бали
2. Подана в журнал стаття чи виступ на конференції за темою курсу +10 балів.

Сума як штрафних так і заохочуваних балів розраховується за формулою $0,1R$, де R – загальна кількість балів, і не має перевищувати в цілому 10 балів.

Шкала рейтингів.

Загальна кількість балів, яку аспіранта може отримати під час вивчення курсу складається із суми вагових балів отриманих протягом вивчення дисципліни

$$R=20+40+40=100 \text{ (балів)}$$

Шкала відповідності оцінок

Рейтингова оцінка	Значення оцінки	Рейтинг у відсотках, %
A	Відмінно – відмінний рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з, можливими незначними недоліками.	90-100
B	Дуже добре – достатньо високий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу без суттєвих (грубих) помилок.	82-89
C	Добре – добрий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з незначною кількістю помилок.	75-81
D	Задовільно – посередній рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу із значною кількістю недоліків, достатній для подальшого навчання або ж професійної діяльності.	69-74
E	Достатньо - мінімально можливий допустимий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу.	60-68
FX	Незадовільно з можливістю повторного складання – незадовільний рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з можливістю повторного перескладання після самостійного доопрацювання.	35-59
F	Незадовільно з з обов'язковим повторним вивченням курсу – низький рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу, що вимагає повторного вивчення матеріалів курсу.	1-34

9. Орієнтовний перелік екзаменаційних питань

«з навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинамика і фазові переходи»

1. Мікроскопічний (механічний) опис багаточастинкової системи: квантові числа, класичний опис стану, фазовий простір. Логіка введення поняття макроскопічних станів.
2. Імовірність мікро та макростанів замкненої системи. Основний постулат рівноважної статистичної механіки. Ентропія.
3. Закон зростання ентропії (другий закон термодинаміки).
4. Закон великих чисел: середнє і найімовірніше значення спостережуваної.
5. Ентропія підсистеми є функцією її середньої енергії. Температура.
6. Перший закон термодинаміки для системи із фіксованим та нефіксованим числом частинок. Адіабатичний процес.
7. Хемічний потенціал.
8. Чому тепло і робота не є потенціалами, а їхні зміни не є диференціалами.
9. Термодинамічні потенціали: вільна енергія Гельмгольца, Гіббса, ентальпія. Як їх отримати з першого закону за допомогою перетворення Лежандра.
10. Як з термодинамічних потенціалів отримати енергію, ентропію, тиск, об'єм, хем. потенціал, питому теплоємність.
11. Умови термодинамічної рівноваги за постійної енергії, об'єму, тиску.
12. Розподіл Гібса для підсистеми великої системи. Статистична сума. Вираз для ентропії.
13. Розподіл Гібса в системі з енергією, що є адитивною за частинками і різними ступенями вільності.
14. Розподіл Максвелла. Розподіли за абсолютними значеннями швидкості та кінетичної енергії.
15. Термодинамика ідеального газу: статсума, вільна енергія, енергія, тиск, теплоємності за постійного V та P .
16. Порядок і симетрія. Фаза = макроскопічна симетрія тіла. Параметр порядку. Полярна та неполярна симетрія (феромагнітний та нематичний порядок).
17. Фазовий перехід другого роду. Розклад вільної енергії за параметром порядку і її вигляд до і після переходу. Спонтанне порушення симетрії.
18. Неперервні величини і стрибок теплоємності в точці переходу.
19. Критичні індекси теорії Ландау: параметр порядку, сприйнятливість, параметр порядку, індукований полем.
20. Фазовий перехід першого роду (нематик – ізотропна рідина). Директор і параметр порядку неполярної (нематичної) фази. Розклад вільної енергії за скалярним параметром порядку S і її вигляд до і після переходу.
21. Гістерезис. Переохолоджена ізотропна фаза і перегріта нематична фаза.
22. Нематична, смектична, і холестерична фази рідинного кристалу.
23. Пружна вільна енергія нематика і основні типи деформацій директора.

10. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

з навчальної дисципліни ВК.05 «Статистична термодинамика і фазові переходи»

Основна:

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретична фізика. Том V. Статистическая физика. Часть 1. Наука, 1976.
2. К. Хуанг, Статистическая механика, Мир, 1996.
3. P.M. Chaikin, T.C. Lubensky, Principles of condensed matter physics, Cambridge University Press, 1995.
4. П. Де Жен, Физика жидких кристаллов, Мир, 1977.
5. M. Kleman, O.D. Lavrentovich, Soft matter physics. An introduction, Springer, NY, 2003.