



STUDIJŲ DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
Cheminė fizika	

Dėstytojas / a (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis (-i): prof. Kęstutis Aidas	Fizikos fakultetas
Kitas / a (-i):	

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Antroji	Privalomasis

Igyvendinimo forma	Vykdyimo laikotarpis	Vykdyimo kalba (-os)
Auditorinė	Rudens semestras	Lietuvių arba anglų

Reikalavimai studijuojančiajam	
Išankstiniai reikalavimai: termodinamika, statistinė fizika, kvantinė mechanika	Gretutiniai reikalavimai (jei yra):

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
10	180	80	100

Dalyko (modulio) tikslas		
Supažindinti su pagrindinėmis molekulinės termodinamikos koncepcijomis ir dėsniais, aprašantiems bendrąsias molekulių medžiagų fiziko-chemines savybes ir elgseną. Atskleisti ryšį tarp molekulių mikroskopinių savybių ir iš šių molekulių sudarytų medžiagų makroskopinių savybių. Teorinės žinios bus įtvirtinamos sprendžiant praktinius uždavinius.		
Dalyko (modulio) studijų rezultatai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
Studentams suteikti supratimą apie bendruosius molekulinės termodinamikos dėsnius ir koncepcijas	Paskaitos, vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas seminaruose	Vertinami savarankiškai išspręstų uždavinių sprendimai ir atsakymai į teorijos klausimus egzamino metu

Temos	Kontaktinio darbo valandos							Savarankiškų studijų laikas ir užduotys	
	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Laboratoriniai darbai	Praktika	Visas kontaktinis darbas	Savarankiškas darbas	Savarankiškai atliekamos užduotys
1. Molekulių elektroninių, virpesinių ir rotacinių laisvės laipsnių kvantmechaninis aprašymas, harmoninis osciliatorius, kietasis sukutukas, virpesinės ir rotacinės spektroskopijos teoriniai pagrindai	3		3				6	6	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas

2. Algebrinių lygčių skaitmeninis sprendimas Newton-Raphson metodu	1		2			3	4	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
3. Dujinis medžiagos būvis, idealiosios dujos ir jų būsenos lygtis, van der Waals, Redlich-Kwong ir Peng-Robinson dujų būsenos lygtys, virialinė dujų būsenos lygtis, atitinkamųjų būsenų dėsnis, fazinės diagramos, tarp molekulinės sąveikos	5		3			8	10	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
4. Boltzmann'o daugiklis, statistinė suma, makroskopines sistemas apibūdinančių fizikinių dydžių ir statistinės sumos ryšys, molekulinė statistinė suma, Boltzmann'o statistika, idealiųjų dujų statistinės sumos	6		3			9	10	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
5. Pirmasis termodinamikos dėsnis, mechaninis darbas, šiluma, būsenos funkcijos, grįžtamieji ir negrįžtamieji procesai, izoterminis, izobarinis, izochorinis, adiabatinis procesai, entalpija, cheminių reakcijų entalpijos, Hess'o dėsnis, standartinių procesų entalpijos	6		3			9	10	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
6. Entropija, antrasis termodinamikos dėsnis, makroskopinės sistemos būsenos pakitimo indukuoto entropijos pokyčio skaičiavimas, entropijos ir statistinės sumos sąryšis	6		3			9	10	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
7. Trečiasis termodinamikos dėsnis, standartinė molinė entropija, cheminių reakcijų entropijos pokyčiai	3		3			6	10	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
8. Helmholtz'o energija, Gibbs'o energija, savaiminių procesų kryptis, Maxwell'o sąryšiai	6		3			9	10	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
9. Fazijų pusiausvyra, cheminis potencialas, ir jo sąryšis su statistine suma, Clausius-Clapeyron lygtis	3		3			6	10	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
10. Idealieji ir neidealieji skysčių mišiniai, Gibbs-Dunhem lygtis, Raoult dėsnis, Henry dėsnis, aktyvumas	6		3			9	10	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
11. Elektrolitų ir neelektrolitų tirpalai	3		3			6	10	Vadovėlio skaitymas, uždavinių sprendimas
Iš viso	48		32			80	100	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Trys uždavinių rinkiniai, kurie sprendžiami savarankiškai namuose; sprendimai raštu turi būti įteikti dėstytojui iki sutarto termino; uždaviniams išspręsti skiriama mažiausiai dvi savaitės laiko	60	Semestro metu	Vertinama uždavinių sprendimo kokybė ir teisingumas; nepristačius bent vieno uždavinių rinkinio sprendimų studentui(-ei) neleidžiama laikyti egzamino
Teorijos klausimai atsakyti raštu	40	Sesijos metu	Vertinama atsakymų į teorijos klausimus išsamumas, teisingumas ir kokybė

Autorius (-iai)	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidykla ar internetinė nuoroda
Privaloma literatūra				
D. A. McQuarrie, J. D. Simon	1999	Molecular thermodynamics		University Science Books
Papildoma literatūra				
Atkins P., de Paula J.	2010	Physical Chemistry,		Oxford University Press

		9th ed.		
Levine I. N.	1998	Physical Chemistry, 6th ed.		McGraw-Hill



COURSE UNIT (MODULE) DESCRIPTION

Course unit (module) title	Code
Chemical physics	

Academic staff	Core academic unit(s)
Coordinating: Prof. Kęstutis Aidas	Faculty of Physics
Other:	

Study cycle	Type of the course unit
Master's	Mandatory

Mode of delivery	Semester or period when it is delivered	Language of instruction
Face-to-face	Autumn	Lithuanian or English

Requisites	
Prerequisites: thermodynamics, statistical mechanics, quantum mechanics	Co-requisites (if relevant):

Number of ECTS credits allocated	Student's workload (total)	Contact hours	Individual work
10	180	80	100

Purpose of the course unit		
The purpose of the course is to introduce the fundamental concepts and laws of molecular thermodynamics that describe the general physicochemical properties and behaviour of molecular substances. To reveal the relationship between the microscopic properties of molecules and the macroscopic properties of materials composed of these molecules. Theoretical knowledge will be reinforced through the solution of practical problems.		
Learning outcomes of the course unit	Teaching and learning methods	Assessment methods
Providing an understanding of the general laws and concepts of molecular thermodynamics	Lectures, textbook studying, problem solving	Assessment is based on independently solved problems and answers to theoretical questions

Content	Contact hours							Individual work: time and assignments	
	Lectures	Tutorials	Seminars	Workshops	Laboratory work	Internship	Contact hours, total	Individual work	Tasks for individual work
1. Quantum mechanical description of the electronic, vibrational, and rotational degrees of freedom of molecules; the harmonic oscillator; the rigid rotor; theoretical foundations of vibrational and rotational spectroscopy	3		3				6	6	Textbook reading, problem solving
2. Numerical solution of algebraic	1		2				3	4	Textbook reading,

equations using the Newton-Raphson method									problem solving	
3. Gaseous state of matter; ideal gases and their equation of state; van der Waals, Redlich-Kwong, and Peng-Robinson equations of state; the virial equation of state; the law of corresponding states; phase diagrams; intermolecular interactions	5		3					8	10	Textbook reading, problem solving
4. Boltzmann factor, partition function, the relationship between the partition function and physical quantities characterizing macroscopic systems, molecular partition function, Boltzmann statistics, partition functions of ideal gases	6		3					9	10	Textbook reading, problem solving
5. The first law of thermodynamics; mechanical work; heat; state functions; reversible and irreversible processes; isothermal, isobaric, isochoric, and adiabatic processes; enthalpy; enthalpy of chemical reactions; Hess's law; enthalpies of standard processes	6		3					9	10	Textbook reading, problem solving
6. Entropy; the second law of thermodynamics; calculation of entropy change induced by the change of the state of a macroscopic system; the relationship between entropy and the partition function	6		3					9	10	Textbook reading, problem solving
7. The third law of thermodynamics; standard molar entropy; entropy changes of chemical reactions	3		3					6	10	Textbook reading, problem solving
8. Helmholtz energy; Gibbs energy; the direction of spontaneous processes; Maxwell relations	6		3					9	10	Textbook reading, problem solving
9. Phase equilibrium; chemical potential and its relationship with the partition function; Clausius-Clapeyron equation	3		3					6	10	Textbook reading, problem solving
10. Ideal and non-ideal liquid mixtures; Gibbs-Duhem equation; Raoult's law; Henry's law; activity	6		3					9	10	Textbook reading, problem solving
11. Electrolyte and nonelectrolyte solutions	3		3					6	10	Textbook reading, problem solving
Total	48		32					80	100	

Assessment strategy	Weight %	Deadline	Assessment criteria
Three sets of problems to be solved independently at home; written solutions must be submitted to the instructor by the agreed deadline; a minimum of two weeks is allocated for solving the problems	60	During the semester	The quality and correctness of problem solutions are assessed; students who fail to submit at least one set of problem solutions are not permitted to take the examination
Theoretical questions to be answered (written examination)	40	During the exam period	The thoroughness, correctness, and quality of answers to theoretical questions are assessed

Author (-s)	Publishing year	Title	Issue of a periodical or volume of a publication	Publishing house or web link
Required reading				
D. A. McQuarrie, J. D.	1999	Molecular		University Science

Simon		thermodynamics		Books
Recommended reading				
Atkins P., de Paula J.	2010	Physical Chemistry, 9th ed.		Oxford University Press
Levine I. N.	1998	Physical Chemistry, 6th ed.		McGraw-Hill