

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Введение	5
Глава 1. Основы классической статистической термодинамики	8
1.1. Динамическая закономерность и статистическая закономерность	8
1.2. Определение основных понятий	11
1.2.1. Микросостояния и фазовое пространство	11
1.2.2. Функция статистического распределения	14
1.2.3. Статистический ансамбль	17
1.2.4. Статистические средние. Флюктуации	18
1.3. Проблема обоснования статистической физики	20
1.4. Теорема Лиувилля	24
1.5. Метод Больцмана	27
1.5.1. Распределение молекул идеального газа по значениям скоростей и импульсов	34
1.5.2. Решение некоторых задач с помощью распределения Максвелла	41
1.5.3. Распределение Больцмана. Барометрическая формула	44
1.5.4. О распределении Максвелла—Больцмана для идеального газа с учетом внутренних степеней свободы молекул	46
1.6. Метод Гиббса	47
1.6.1. Свойства функции распределения	48
1.6.2. Микроканоническое распределение	50
1.6.3. Каноническое распределение	52
1.6.4. Каноническое распределение Гиббса для идеального одноатомного газа	56
Вопросы и задания	62
Глава 2. Квантовомеханическая модель вещества	64
2.1. Квантовомеханическое описание микросостояния системы	64
2.1.1. Общие положения	64
2.1.2. Чистые состояния	66
2.1.3. Смешанные состояния	67
2.2. Статистическая неразличимость частиц	69

2.3.	Квантовомеханический аналог теоремы Лиувилля	70
2.4.	Единица объема фазового пространства	72
2.5.	Число состояний	73
2.6.	Каноническое распределение Гиббса в квантовой модели вещества	78
2.7.	Матрица плотности	83
2.8.	Большое каноническое распределение ($T - \mu$ -распределение)	87
2.9.	Квантовая статистика идеального газа	95
2.9.1.	Статистика Бозе—Эйнштейна	98
2.9.2.	Статистика Ферми—Дирака	100
2.9.3.	Квантовые статистики и закон Больцмана	101
2.9.4.	Вырожденный газ Бозе—Эйнштейна	103
2.9.5.	Вырожденный газ Ферми—Дирака. Электронный газ в металлах	106
	Вопросы и задания	111
Глава 3.	Статистическая физика и термодинамика	112
3.1.	Постулаты связи	112
3.2.	Закрытые системы	115
3.3.	Термодинамические функции и суммы по состояниям закрытых систем	124
3.4.	Открытые системы	130
3.5.	Термодинамические функции открытых систем	134
3.6.	Другие способы выражения большой статистической суммы	137
3.7.	Вывод распределений Ферми—Дирака и Бозе—Эйнштейна из большого канонического распределения	140
3.8.	Большое каноническое распределение для многокомпонентных систем	142
	Вопросы и задания	143
Глава 4.	Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа	145
4.1.	Выражение термодинамических функций через суммы по состояниям атомов и молекул	145
4.2.	Суммы по состояниям атомов	148
4.3.	Суммы по состояниям двухатомных молекул	154
4.4.	Суммы по состояниям многоатомных молекул	161
4.4.1.	Колебательная сумма по состояниям	161
4.4.2.	Вращательная сумма по состояниям	164
4.5.	Явные выражения для термодинамических функций	177
4.5.1.	Идеальный одноатомный газ	177
4.5.2.	Идеальный газ двухатомных молекул	180
4.5.3.	Идеальный газ многоатомных молекул	185
4.6.	Примеры вычисления термодинамических функций	188
	Вопросы и задания	192

Глава 5. Газы и жидкости	194
5.1. Реальные газы	194
5.1.1. Силы межмолекулярного взаимодействия	195
5.1.2. Статистический вывод уравнения Ван-дер-Ваальса	200
5.1.3. Вириальное уравнение состояния газа	204
5.1.4. Статистический анализ вириального уравнения состояния. Задача Майера	204
5.1.5. Вычисление вириальных коэффициентов	219
5.1.6. Термодинамические функции реальных газов	223
5.2. Жидкое состояние вещества	229
5.2.1. Решеточные теории	231
5.2.2. Метод молекулярных функций распределения	239
5.3. Методы численного эксперимента	253
5.3.1. Метод Монте-Карло	253
5.3.2. Метод молекулярной динамики	256
Вопросы и задания	258
Глава 6. Растворы	260
6.1. Растворы неэлектролитов	260
6.1.1. Термодинамические характеристики двухкомпонентных растворов	260
6.1.2. Идеальные растворы	263
6.1.3. Применение теории ячеек к реальным растворам	265
6.1.4. Решеточные теории регулярных растворов	268
6.2. Растворы электролитов	278
6.2.1. Общая характеристика растворов электролитов	279
6.2.2. Теория Дебая—Хюккеля	282
Вопросы и задания	293
Глава 7. Твердое тело	294
7.1. Колебания кристаллической решетки	295
7.1.1. Классическое приближение	297
7.1.2. Квантовомеханическое приближение	299
7.2. Кооперативные явления	313
7.2.1. Ферромагнетизм и антиферромагнетизм	313
7.3. Дефекты кристаллической решетки	328
7.4. Электронные состояния в твердых телах	335
7.4.1. Общая характеристика электронных состояний кристалла	335
7.4.2. Металлы, полупроводники и диэлектрики	341
Вопросы и задания	348
Глава 8. Химическое равновесие	350
8.1. Общее описание химического равновесия	350
8.2. Статистическое описание химического равновесия	352
8.3. Табличный способ вычисления констант равновесия	359
8.4. Химическое равновесие в неидеальных системах	362
Вопросы и задачи	364

Глава 9. Адсорбция	365
9.1. Термодинамическое описание адсорбции	366
9.1.1. Метод Гиббса	366
9.1.2. Адсорбция на поверхности твердых тел	370
9.2. Статистическое описание адсорбции	376
9.2.1. Идеальный адсорбционный слой	377
9.2.2. Реальный адсорбционный слой на однородной по- верхности	387
9.2.3. Адсорбция на неоднородной поверхности	407
Вопросы	413
Глава 10. Элементарный химический акт	415
10.1. Вывод уравнения Аррениуса с помощью элементарной теории столкновений	415
10.1.1. Полное число двойных столкновений молекул в идеальном газе	417
10.1.2. Число активных столкновений	420
10.2. Основы теории столкновений	424
10.3. Адиабатическое приближение. Поверхность потенциаль- ной энергии	428
10.4. Теория активированного комплекса (переходного состоя- ния)	433
10.4.1. Вывод основных формул	433
10.4.2. Примеры расчетов	439
10.4.3. Общая характеристика теории активированного комплекса	444
Вопросы и задания	445
Глава 11. Плазма	447
11.1. Общая характеристика плазмы	447
11.2. Основные свойства плазмы	448
11.3. Плазма в химических процессах	448
11.4. Экранирование электрического заряда	450
11.4.1. Плазма низкой плотности (электрические разряды в газах, электронно-дырочный газ в полупроводни- ках)	450
11.4.2. Плазма высокой плотности ($n_0 \approx 10^{22} \text{ см}^{-3}$)	451
11.5. Термодинамические функции плазмы низкой плотности ..	455
11.6. Расчет свободной энергии Гельмгольца	456
11.7. Колебания плотности объемного заряда	461
Вопросы и задания	463
Заключение	464
Приложения	466
К главе 1	466
К главе 2	468
К главе 4	471
К главе 5	477

К главе 7	478
К главе 10	480
Значения некоторых постоянных	484
Переводные множители	484
Литература	485
Основная	485
Дополнительная	486
Издания справочного характера	487
Предметный указатель	488