**DAUGAVPILS UNIVERSITĀTES**

**STUDIJU KURSA APRAKSTS**

|  |  |
| --- | --- |
| ***Studiju kursa nosaukums*** | ***Fizikālā ķīmija*** |
| ***Studiju kursa kods (DUIS)*** | Ķīmi5031 |
| ***Zinātnes nozare*** | Ķīmija |
| ***Kursa līmenis*** |  |
| ***Kredītpunkti*** | 4 |
| ***ECTS kredītpunkti*** | 6 |
| ***Kopējais kontaktstundu skaits*** | 64 |
| *Lekciju stundu skaits* | 48 |
| *Semināru stundu skaits* | 0 |
| *Praktisko darbu stundu skaits* | 0 |
| *Laboratorijas darbu stundu skaits* | 16 |
| *Studējošā patstāvīgā darba stundu skaits* | 96 |
|  | |
| ***Kursa autors(-i)*** | |
| Dr. chem., lektors Artūrs Zariņš; | |
| ***Kursa docētājs(-i)*** | |
| Mag. paed. Andrejs Zaičenko | |
| ***Priekšzināšanas*** | |
| Bakalaura līmeņa fizikālās ķīmijas zināšanas | |
| ***Studiju kursa anotācija*** | |
| KURSA MĒRĶIS:  Mērķis vēršas uz termodinamikas un kvantu ķīmijas pamatprincipu padziļinātu izpratni un to praktisku pielietojumu reālu sistēmu analīzē un mūsdienu vielas pētīšanas metodēs.  KURSA UZDEVUMI:   1. Attīstīt studentu prasmes termodinamikas metožu lietošanā reālu sistēmu raksturošanai un kvantu ķīmijas izpratnē. 2. Veidot spēju izvēlēties un piemērot efektīvas termodinamikas un kvantu ķīmijas principu aprēķinu metodes dažādu ķīmisko procesu un reakciju analīzē. 3. Veikt patstāvīgu novērtējumu par aprēķinu pareizību, precizitāti un piemērotību praksē. 4. Attīstīt izpratni par termodinamiskiem un kvantu ķīmijas principiem mūsdienu materiālu pētīšanas un tehnoloģiskajos procesos. 5. Spēt analizēt un vērtēt termodinamikas likumu izpildi un ietekmi uz tehnoloģiskiem un ķīmiskiem procesiem. | |
| ***Studiju kursa kalendārais plāns*** | |
| L48, Ld16, Pd96   1. Potenciālās enerģijas maiņa un starpmolekulārās iedarbības reālajās gāzēs. To novērtēšana ar kompresijas faktoru, viriāliem koeficientiem un kritiskām konstantēm L2, L2, Pd6. 2. Reālu gāzu stāvokļa vienādojumi. Gāzu likumu izmantošana atmosfēras pētīšanā L2, Pd3. 3. Ķīmisko un fizikālo procesu entalpijas. Adiabātiskā liesmas un diferenciālā skanējošā kalorimetrija. Rašanās standarta entalpiju izmantošana reakcijas entalpiju noteikšanai L2, L2, Pd6. 4. Bensona termoķīmiskās grupas un to lietošana. Entalpiju izmantošana bioloģijā, ģeoloģijā un kīmiskajā rūpniecībā L2, Pd3. 5. Patvaļīgu pārvērtību kritērijs. Klauziusa nevienādība. Helmholca un Gibsa enerģijas L2, Pd3. 6. Entropijas maiņa dažādos procesos. Entropijas mērīšana un Debaja ekstrapolācija L2, Pd3. 7. Nernsta siltuma teorēma. 2. Termodinamikas likuma matemātiskais ietērps un tā izmantošana ķīmisko procesu aprakstam L2, L2, Pd6. 8. Tīru vielu fizikālās pārvērtības. Fāžu stabilitātes atkarība no apstākļiem. Cietvielas-šķidruma, šķidruma-tvaika un cietvielas tvaika robežu noteikšana L2, L2, Pd6. 9. Ērenfesta fāžu pāreju klasifikācija. Virskritiskie fluīdi. Otrā veida fāžu pāreju molekulārā interpretācija L2, Pd3. 10. Maisījumu termodinamiskais apraksts – sajaukšanās Gibsa enerģija un entropija. Šķidrumu ķīmiskais potenciāls. Ideāli šķīdumi L2, L2, Pd6. 11. Pārākuma funkcijas un regulāri šķīdumi. Dialīze un olbaltumvielu saistīšana L2, Pd3. 12. Mezofāzes. Šķidrie kristāli L2, Pd3. 13. Ultratīru vielu iegūšana un piemaisījumu kontrole. Ŗeaģējošas sistēmas L2, Pd3. 14. Viļņu mehānika, tās izcelšanās viļņu un daļiņu dualitāte L2, Pd3. 15. Šrēdingera vienādojumi, viļņu funkcija, operatori, īpašfunkcijas un īpašvērtības. Nenoteiktības princips L2, L2, Pd6. 16. Translācijas kustība. Daļiņa kastē. Kustība divās un vairāk dimensijās L2, L2, Pd6. 17. Rotācija divās un trijās dimensijās: daļiņas kustība pa riņķa līniju un sfēru. Tunelēšana. Skenējošā mikroskopija L2, Pd3. 18. Ūdeņražveidīgo atomu uzbūve un spektrs. Daudzelektronu atomi L2, L2, Pd6. 19. Orbitāļu tuvinājums. Pašsaskaņotā lauka orbitāles L2, Pd3. 20. Kvantu defekti un jonizācijas ierobežojumi L2, Pd3. 21. Singleta un tripleta stāvokļi. Spina-orbitāla sapārošanās L2, Pd3. 22. Molekulāro orbitāļu teorija. Ūdeņraža molekulārais jons L2, Pd3. 23. Divatomu molekulu uzbūve. Daudzatomu sistēmu molekulārās orbitāles L2, Pd3. 24. Hikeļa tuvinājums. Pašsaskaņotā lauka aprēķini L2, Pd3.   L – lekcija  S – seminārs  P – praktiskie darbi  Ld – laboratorijas darbi  Pd – patstāvīgais darbs | |
| ***Studiju rezultāti*** | |
| Zināšanas:   1. Studenti iegūs zināšanas par starpmolekulārām mijiedarbībām un potenciālās enerģijas maiņu reālajās gāzēs; 2. Prasmes novērtēt gāzu uzvedību izmantojot kompresijas faktoru un kritiskās konstantes, kā arī kvantu mehānikas pamatprincipiem; 3. Prasmes risināt uzdevumus, izmantojot Šredingera vienādojumus un analizēt kvantu defektus.   Prasmes:   1. Studējošie attīstīs prasmes skaidrot termodinamiskās īpašības un veikt aprēķinus šķidrumu maisījumos; 2. Prasmes izmantot Gibsa enerģiju un ķīmisko potenciālu, pārzināt par entalpijas un energijas pārneses procesiem; 3. Prasmes veikt entalpiskus aprēķinus un izmantot tos reakciju analīzē.   Kompetences:   1. Studējošie iegūs kompetenci analizēt enerģijas un entropijas maiņas procesus, izmantojot termodinamikas principus un matemātiskās metodes; 2. Analizēt molekulāro uzbūvi un enerģētiskos procesus; 3. Prasmes pielietot molekulārās orbitāļu teoriju un veikt aprēķinus. | |
| ***Studējošo patstāvīgo darbu organizācijas un uzdevumu raksturojums*** | |
| Pirms katras nodarbības studējošie iepazīstas ar nodarbības tematu un atbilstošo mācību literatūru.  Patstāvīgais darbs paredzēts pēc katras lekcijas un laboratorijas darba un ir saistīts ar katras apskatītās tēmas padziļinātu analīzi. Patstāvīgā darba ietvaros tiek veikta mācību literatūras avotu analīze. Studējošie patstāvīgā darba ietvaros gatavojas laboratorijas darbiem un noslēguma pārbaudījumam. | |
| ***Prasības kredītpunktu iegūšanai*** | |
| Sekmīga laboratorijas darbu izpilde – 40 %; noslēguma pārbaudījums (eksāmens) – 60 %.  STUDIJU REZULTĀTU VĒRTĒŠANAS KRITĒRIJI: Studiju kursa apguve tā noslēgumā tiek vērtēta 10 ballu skalā saskaņā ar Latvijas Republikas normatīvajiem aktiem un atbilstoši "Nolikumam par studijām Daugavpils Universitātē" (apstiprināts DU Senāta sēdē 17.12.2018.,  protokols Nr. 15), vadoties pēc šādiem kritērijiem: iegūto zināšanu apjoms un kvalitāte, iegūtās prasmes un kompetence atbilstoši plānotajiem studiju rezultātiem.  STUDIJU REZULTĀTU VĒRTĒŠANA   |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | | Pārbaudījumu veidi | Studiju rezultāti | | | | | | | | | | 1. | 2. | 3. | 4. | 5. | 6. | 7. | 8. | 9. | | Laboratorijas darbi | X | X | X | X | X | X | X | X | X | | Noslēguma pārbaudījums | X | X | X | X | X | X | X | X | X | | |
| ***Kursa saturs*** | |
| L48, Ld16, Pd96  Lekcijas   1. Potenciālās enerģijas maiņa un starpmolekulārās iedarbības reālajās gāzēs. To novērtēšana ar kompresijas faktoru, viriāliem koeficientiem un kritiskām konstantēm L2, Pd3. 2. Reālu gāzu stāvokļa vienādojumi. Gāzu likumu izmantošana atmosfēras pētīšanā L2, Pd3. 3. Ķīmisko un fizikālo procesu entalpijas. Adiabātiskā liesmas un diferenciālā skanējošā kalorimetrija. Rašanās standarta entalpiju izmantošana reakcijas entalpiju noteikšanai L2, Pd3. 4. Bensona termoķīmiskās grupas un to lietošana. Entalpiju izmantošana bioloģijā, ģeoloģijā un kīmiskajā rūpniecībā L2, Pd3. 5. Patvaļīgu pārvērtību kritērijs. Klauziusa nevienādība. Helmholca un Gibsa enerģijas L2, Pd3. 6. Entropijas maiņa dažādos procesos. Entropijas mērīšana un Debaja ekstrapolācija L2, Pd3. 7. Nernsta siltuma teorēma. 2. Termodinamikas likuma matemātiskais ietērps un tā izmantošana ķīmisko procesu aprakstam L2, Pd3. 8. Tīru vielu fizikālās pārvērtības. Fāžu stabilitātes atkarība no apstākļiem. Cietvielas-šķidruma, šķidruma-tvaika un cietvielas tvaika robežu noteikšana L2, Pd3. 9. Ērenfesta fāžu pāreju klasifikācija. Virskritiskie fluīdi. Otrā veida fāžu pāreju molekulārā interpretācija L2, Pd3. 10. Maisījumu termodinamiskais apraksts – sajaukšanās Gibsa enerģija un entropija. Šķidrumu ķīmiskais potenciāls. Ideāli šķīdumi L2, Pd3. 11. Pārākuma funkcijas un regulāri šķīdumi. Dialīze un olbaltumvielu saistīšana L2, Pd3. 12. Mezofāzes. Šķidrie kristāli L2, Pd3. 13. Ultratīru vielu iegūšana un piemaisījumu kontrole. Ŗeaģējošas sistēmas L2, Pd3. 14. Viļņu mehānika, tās izcelšanās viļņu un daļiņu dualitāte L2, Pd3. 15. Šrēdingera vienādojumi, viļņu funkcija, operatori, īpašfunkcijas un īpašvērtības. Nenoteiktības princips L2, Pd3. 16. Translācijas kustība. Daļiņa kastē. Kustība divās un vairāk dimensijās L2, Pd3. 17. Rotācija divās un trijās dimensijās: daļiņas kustība pa riņķa līniju un sfēru. Tunelēšana. Skenējošā mikroskopija L2, Pd3. 18. Ūdeņražveidīgo atomu uzbūve un spektrs. Daudzelektronu atomi L2, Pd3. 19. Orbitāļu tuvinājums. Pašsaskaņotā lauka orbitāles L2, Pd3. 20. Kvantu defekti un jonizācijas ierobežojumi L2, Pd3. 21. Singleta un tripleta stāvokļi. Spina-orbitāla sapārošanās L2, Pd3. 22. Molekulāro orbitāļu teorija. Ūdeņraža molekulārais jons L2, Pd3. 23. Divatomu molekulu uzbūve. Daudzatomu sistēmu molekulārās orbitāles L2, Pd3. 24. Hikeļa tuvinājums. Pašsaskaņotā lauka aprēķini L2, Pd3.   Laboratorijas darbi   1. Potenciālās enerģijas maiņa un to novērtēšana ar kompresijas faktoru, viriāliem koeficientiem un kritiskām konstantēm Ld2, Pd3. 2. Ķīmisko un fizikālo procesu entalpijas Ld2, Pd3. 3. 2. Termodinamikas likuma matemātiskais ietērps un tā izmantošana ķīmisko procesu aprakstam Ld2, Pd3. 4. Tīru vielu fizikālās pārvērtības Ld2, Pd3. 5. Maisījumu termodinamiskais apraksts – sajaukšanās Gibsa enerģija un entropija Ld2, Pd3. 6. Šrēdingera vienādojumi Ld2, Pd3. 7. Translācijas kustība Ld2, Pd3. 8. Ūdeņražveidīgo atomu uzbūve un spektrs Ld2, Pd3.   L – lekcija  S – seminārs  P – praktiskie darbi  Ld – laboratorijas darbi  Pd – patstāvīgais darbs | |
| ***Obligāti izmantojamie informācijas avoti*** | |
| 1. Atkins, Peter. Physical chemistry / Peter Atkins, Julio de Paula. - 9th ed. - New York, NY : Freeman, 2010., 968 pp. 2. Atkins, Peter. Atkins' Physical chemistry / Peter Atkins, Fellow of Lincoln College, University of Oxford, Oxford, UK, Julio de Paula, Professor of Chemistry, Lewis & Clark College, Portland, Oregon, USA, James Keeler, Senior Lecturer in Chemistry and Fellow of Selwyn College, University of Cambridge, Cambridge, UK. - Eleventh edition. - Oxford, United Kingdom : Oxford University Press ; New York, NY, 2018., 908 pages. 3. Alksnis U. u.c. Fizikālā un koloidālā ķīmija, Rīga, Zvaigzne, 1990., 424 lpp. | |
| ***Papildus informācijas avoti*** | |
| 1. Kļaviņš, Z. Fizikālā un koloidālā ķīmija, Zvaigzne, 1982. 490 lpp. | |
| ***Periodika un citi informācijas avoti*** | |
| - | |
| ***Piezīmes*** | |
| Akadēmiskās maģistra studiju programmas “Ķīmija” studiju kurss. A daļa.  Kurss tiek docēts latviešu valodā. | |