

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии
высокочистых веществ им. Г.Г.Девярых Российской академии наук

ПРИНЯТО

Ученым советом ИХВВ РАН

Протокол № 8 от «09» 06 2018 г.

Ученый секретарь, д.х.н. Лазукина О.П.

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИХВВ РАН

д.х.н. Буланов А.Д.

«01» 08 2018 г.

Рабочая программа дисциплины
Основы статистической термодинамики

Направление подготовки
04.06.01 «Химические науки»

Направленность подготовки
02.00.04 «Физическая химия»

Квалификация выпускника
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения
очная

Нижний Новгород
2018

1. Место дисциплины (модуля) в структуре основной образовательной программы (ООП)

Дисциплина «Основы статистической термодинамики» является обязательной дисциплиной выбора. Данная дисциплина находится в логической и содержательно-методической взаимосвязи с курсами физики, физической химии, квантовой химии.

Для успешного освоения дисциплины аспирант должен:

- знать основные понятия, постулаты и теоремы статистической физики;
- знать статистическое обоснование второго начала термодинамики и физический смысл энтропии;
- знать статистический вывод теорий теплоемкости;
- владеть навыками расчёта термодинамических функций для идеального газа по статистическим суммам по состояниям;
- уметь рассчитывать константы равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики и сопоставлять статистический и классический термодинамические расчеты;
- иметь представление о статистических теориях реальных систем: реальных газов, твердых тел, жидкостей и растворов.

Изучение дисциплины «Основы статистической термодинамики» необходимо для подготовки аспиранта к сдаче кандидатского экзамена по специальности.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ООП (компетенциями выпускников)

Таблица 1

Планируемые результаты обучения по дисциплине

Код формируемой компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций
ОПК-1	<i>З1 Знать:</i> современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности. <i>У1 Уметь:</i> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования. <i>В1 Владеть:</i> навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований. <i>В2 Владеть:</i> навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов. <i>В3 Владеть:</i> навыками представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности.
ПК-1	<i>З1 Знать:</i> перспективы и проблемы развития химии; фундаментальные основы химии, а также наук о материалах. <i>З2 Знать:</i> приоритетные направления научных исследований в

	<p>организации, а также приоритетные направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации.</p> <p><i>У1 Уметь:</i> прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной тем.</p> <p><i>У2 Уметь:</i> проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки.</p> <p><i>В1 Владеть:</i> навыками организации самостоятельной научно-исследовательской работы в научно-исследовательской организации.</p> <p><i>В2 Владеть:</i> навыками взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях.</p>
--	---

3. Структура и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 4 зачетные единицы, всего 144 часа, из которых 72 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (72 часа лекции), 72 часа составляет самостоятельная работа обучающегося.

Структура дисциплины

Наименование раздела дисциплины	Всего, часов	В том числе					Самостоятельная работа обучающегося, часов
		Контактная работа, часов					
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Консультации	Всего	
Основные постулаты статистической физики. Функции распределения. Ансамбли Гиббса	36	18	-	-	-	18	18
Энтропия в классической термодинамике и статистике	36	18	-	-	-	18	18
Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью термодинамических функций. Теорема равнораспределения и область ее применимости. Вывод теорий теплоемкостей. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики	36	18	-	-	-	18	18
Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем	36	18	-	-	-	18	18
Аттестация по дисциплине: зачет							
Итого	144	72	-	-	-	72	72

3.1. Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Основные постулаты статистической физики. Функции распределения. Ансамбли Гиббса

Фазовые Γ - и μ -пространства. Фазовые траектории. Закон распределения Максвелла – Больцмана (метод ячеек). Плотность вероятности в фазовом пространстве. Микроканонический и канонический ансамбли Гиббса. Функции распределения в статистике (Максвелла-Больцмана, Бозе-Эйнштейна, Ферми-Дирака, Гиббса). Каноническая функция распределения Гиббса. Метод наибольшего слагаемого при расчете суммы по состояниям

Раздел 2. Энтропия в классической термодинамике и статистике

Энтропия в классической термодинамике и статистике. Формула Больцмана для энтропии (вывод). Постулат Планка и абсолютная энтропия

Раздел 3. Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью термодинамических функций. Теорема равнораспределения и область ее применимости. Вывод теорий теплоемкостей. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики

Поступательная сумма по состояниям и поступательные составляющие термодинамических функций (энтропии, внутренней энергии и теплоемкости). Формула Закура – Тетроде для энтропии идеального газа.

Теорема равнораспределения и область ее применимости. Применение к теории теплоемкостей.

Колебательная сумма по состояниям для гармонического осциллятора. Составляющие внутренней энергии, теплоемкости и энтропии, обусловленные колебательным движением. «Замороженные» колебательные степени свободы и их свойства. Теории теплоемкостей Эйнштейна и Дебая (с выводом).

Вращательная сумма по состояниям. Вклады вращательного движения в термодинамические функции (внутреннюю энергию, теплоемкость, энтропию) на примере модели жесткого ротатора.

Электронная и ядерная суммы по состояниям. Электронная составляющая теплоемкости атомарного хлора.

Сопоставление статистического и классического термодинамического расчетов

Раздел 4. Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем Конфигурационный интеграл для реального газа. Метод Урселла-Майер. Статистическое рассмотрение вириального уравнения (без вывода).

Метод ячеек в статистической термодинамике жидкостей. Статистическое описание идеальных и неидеальных растворов (без вывода).

Точечные дефекты кристаллических решеток. Вакансии. Междоузельные частицы. Равновесные и неравновесные дефекты решеток. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание

4. Образовательные технологии

Для достижения планируемых результатов обучения, в дисциплине используются различные образовательные технологии:

информационно-развивающие технологии (самостоятельное изучение литературы, применение новых информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая использование технических и электронных средств информации);

деятельностные практико-ориентированные технологии (анализ, сравнение методов проведения химических и физико-химических исследований, выбор метода, в зависимости от объекта исследования в конкретной ситуации и его практическая реализация);

развивающие проблемно-ориентированные технологии (учебные дискуссии, коллективная мыслительная деятельность, решение задач повышенной сложности).

Лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей и проекционного оборудования.

5. Формы организации и контроля самостоятельной работы обучающихся

Целью самостоятельной работы является овладение навыками работы с литературой (в читальном зале библиотеки, с доступом к ресурсам Интернет), более углубленное изучение отдельных разделов дисциплины при выполнении индивидуальных заданий. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия.

Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме опроса.

Итоговый контроль проводится в виде зачета.

Контрольные вопросы к зачету:

1. Основные постулаты статистической физики. Функции распределения. Ансамбли Гиббса.
2. Энтропия в классической термодинамике и статистике.
3. Статистическое обоснование II начала.
4. Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью термодинамических функций.
5. Суммы по состояниям и их составляющие. Теорема равнораспределения и область ее применимости.
6. Статистический вывод теорий теплоемкостей Эйнштейна и Дебая.
7. Примеры расчета констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики; сопоставление с классическим расчетом методом потенциалов.
8. Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем.
9. Статистическая термодинамика реальных газов и реальных растворов. Уравнения с вириальными коэффициентами.
10. Статистическая термодинамика дефектных кристаллов.

6. Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине

6.1. Перечень компетенций выпускников образовательной программы с указанием результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы их формирования

Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования приведен в приложении 1.

6.2. Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине. Описание шкал оценивания

Уровень освоения учебной дисциплины обучающимися определяется следующими оценками: «зачтено», «не зачтено».

Оценка «зачтено» предполагает:

- хорошее знание основных терминов и понятий курса;

- последовательное изложение материала;

- умение формулировать некоторые обобщения по теме вопросов;

- достаточно полные ответы на вопросы при сдаче зачета;

- умение использовать фундаментальные понятия из базовых естественнонаучных и общепрофессиональных дисциплин при ответе на зачете.

- оценка «не зачтено» предполагает:

- неудовлетворительное знание основных терминов и понятий курса;

- отсутствие логики и последовательности в изложении материала;

- неумение формулировать отдельные выводы и обобщения по теме вопросов;

- неумение использовать фундаментальные понятия из базовых естественнонаучных и общепрофессиональных дисциплин при ответах на зачете.

6.3. Примеры типовых контрольных заданий или иных материалов, необходимых для оценки результатов обучения, характеризующих сформированность компетенций.

Уровни освоения дисциплины оцениваются согласно требованиям, изложенным в паспорте каждой из указанных компетенций, где указаны критерии оценивания результатов обучения и Планируемые результаты обучения.

Контрольные вопросы к зачету:

1. Основные постулаты статистической физики. Функции распределения. Ансамбли Гиббса (ОПК-1).
2. Энтропия в классической термодинамике и статистике (ОПК-1).
3. Статистическое обоснование II начала (ОПК-1).
4. Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью термодинамических функций (ОПК-1).
5. Суммы по состояниям и их составляющие. Теорема равномерного распределения и область ее применимости (ОПК-1).
6. Статистический вывод теорий теплоемкостей Эйнштейна и Дебая (ОПК-1).
7. Примеры расчета констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики; сопоставление с классическим расчетом методом потенциалов (ПК-1).
8. Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем (ПК-1).

9. Статистическая термодинамика реальных газов и реальных растворов. Уравнения с вириальными коэффициентами (ПК-1).
10. Статистическая термодинамика дефектных кристаллов (ПК-1).

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

а) основная литература:

1. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. – М.: Высшая школа, 1973. – 480 с. **В бумажном варианте 2 экз.**
2. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1977. – 336 с. **В бумажном и электронном виде**
3. Степанов В.М., Колесников А.Н. Термодинамика межфазного распределения примесей при получении высокочистых веществ. Монография. ИХВВ РАН. 2013. **В бумажном виде 4 экз.**
4. Булавин Л.А., Выгорницкий Н.В.; Лебовка Н.И. Компьютерное моделирование физических систем. – М.: Интеллект, 2011 г. **в бумажном виде**
5. Розанов Ю.А. Лекции по теории вероятностей. – М.: Интеллект, 2008 г. **в бумажном виде**
6. Грибов Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул. – М.: Интеллект, 2010 г. **в бумажном виде**
7. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. – М.: Интеллект, 2008 г. **в бумажном и электронном виде**
8. Салем Р.Р. Физическая химия. Термодинамика. М.: Физматлит, 2004 **в бумажном варианте**
9. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии: Учеб. для хим. и хим.-технол. спец. вузов. М.: Высш. шк., 1991 **в бумажном виде 2 экз.**
10. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И. Химическая кинетика: Уч. Для ВУЗов. М.: Химия, 2000 **в бумажном виде**
11. Агеев Е.П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. М.: МЦНМО, 2005 **в бумажном и электронном виде**
12. Асиновский Э.И. Кириллин А.В. Нетрадиционные методы исследования термодинамических свойств веществ при высоких температурах. М.: Янус-К, 1997 **в бумажном виде**
13. Ватолин Н.А. Моисеев Г.К. Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование в высоко-температурных неорганических системах. М.: Металлургия, 1994 **в бумажном виде 2 экз.**
14. Глазов В.М. Павлова Л.М. Химическая термодинамика и фазовые равновесия. (Двухкомпонентные металлические и полупроводниковые системы). М.: Металлургия, 1981 **в бумажном виде**
15. Дуров В.А. Агеев Е.П. Термодинамическая теория растворов: Учеб. пос. М.: Едиториал УРСС, 2003 **в бумажном виде 2 экз.**
16. Казенас Е.К. Термодинамика испарения двойных оксидов. М.: Наука, 2004 **в бумажном виде 2 экз.**
17. Карякин Н.В. Основы химической термодинамики: Учеб. для вузов. Н.Новгород: НГУ, 2003 **в бумажном виде 5 экз.**

б) дополнительная литература:

1. Кудинов В.А. Техническая термодинамика. М.: Высш.школа, 2003 **в бумажном виде 6 экз.**
2. Музыкантов В.С. Бажин Н.М. Пармон В.Н. Задачи по химической термодинамике: Учеб. пос. для вузов. М.: Химия, 2001 **в бумажном виде**
3. Мюнстер А. Химическая термодинамика. М.: Едиториал УРСС, 2002 **в бумажном виде 3 экз.; в электронной форме**
4. Панченков Г.М. Лебедев В.П. Химическая кинетика и катализ: Учеб. пос. для вузов. 3-е изд. М.: Химия, 1985 **в бумажном виде 2 экз.**
5. Пурмаль А.П. А, Б, В ... химической кинетики. М.: ИКЦ Академкнига (277) 2004 **в бумажном и электронном виде**

6. Степанов В.М. Статистическая термодинамика разбавленных растворов: Учеб. Пос. Н.Новгород: НГУ, 1999 **в бумажном виде 11 экз.**
7. Степанов В.М. Методологические основы системного анализа примесей в средах и материалах: Учеб. Пос. НГУ, 1997 **в бумажном виде 10 экз.**

в) Интернет-ресурсы:

<http://elibrary.ru>

<http://нэб.рф>

<http://info.sciencedirect.com/techsupport/journals/freedomcoll.htm>

<http://www.elsevier.com/solution/sciencedirect/content/book-title-lists>

<http://webbook.nist.gov>; <http://www.chem.msu.ru>

г) периодические издания:

1. Доклады Академии наук
2. Журнал аналитической химии
3. Журнал неорганической химии
4. Журнал физической химии
5. Заводская лаборатория
6. Известия ВУЗ: Материалы электронной техники
7. Квантовая электроника
8. Коллоидный журнал
9. Масс-спектрометрия
10. Металлы
11. Мир измерений
12. Неорганические материалы
13. Оптика и спектроскопия
14. Оптический журнал
15. Перспективные материалы
16. Теоретические основы химической технологии
17. Успехи химии
18. Физика и химия стекла
19. Фотоника
20. Химия и жизнь

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Современный компьютер, мультимедиапроектор, экран, доска, специализированный пакет программ.

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных документов:

1. Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования по направлению подготовки 04.06.01. Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации) - приказ Минобрнауки России от 30.07.2014 № 869.
2. Паспорт научной специальности 02.00.04 – физическая химия, разработанный экспертами ВАК Минобрнауки России в рамках Номенклатуры специальностей научных работников, утвержденной приказом Минобрнауки России от 25.02.2009 г. № 59.

Автор:

В.н.с. ЛТВСиРСВ, д.х.н.

Кутьин А.М.

Рецензент:

Зам.директора, д.х.н.

Ширяев В.С.

Карты компетенций, в формировании которой участвует дисциплина

Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения				
	1	2	3	4	5
ОПК 1					
ЗНАТЬ: современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	В целом успешные, но не систематические представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	Сформированные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности
УМЕТЬ: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Фрагментарное использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но не систематическое использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	Сформированное умение выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи
ВЛАДЕТЬ: навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	В целом успешное, но не систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	Успешное и систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации

ВЛАДЕТЬ: навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	В целом успешное, но не систематическое применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	Успешное и систематическое применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов
ВЛАДЕТЬ: навыками представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	В целом успешное, но не систематическое применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	Успешное и систематическое применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности
ПК 1					
ЗНАТЬ: перспективы и проблемы развития химии; фундаментальные основы химии, а также наук о материалах	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах	Неполные знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах	Сформулированные, но содержащие отдельные пробелы знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах	Полные и систематические знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах
ЗНАТЬ: приоритетные направления научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития науки, технологий	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития	Неполные знания о знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития	Сформулированные, но содержащие отдельные проблемы знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также	Полные и систематические знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также приоритетные

и техники в Российской Федерации		науки, технологий и техники в Российской Федерации	науки, технологий и техники в Российской Федерации	приоритетные направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации	направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации
УМЕТЬ: прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	Отсутствие умений	Частично освоенное умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	В целом успешное, но не систематическое умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	Успешное и систематическое умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме
УМЕТЬ: проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	Отсутствие умений	Частично освоенное умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	В целом успешное, но не систематическое умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	Успешное и систематическое умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки
ВЛАДЕТЬ: навыками организации самостоятельной научно-исследовательской работы в научно-	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков организации самостоятельной научно-исследовательской	В целом успешное, но не систематическое применение навыков организации самостоятельной научно-	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы применение навыков организации самостоятельной научно-	В целом успешное и систематическое применение навыков организации самостоятельной научно-исследовательской работы

исследовательской организации		работы в научно-исследовательской организации	исследовательской работы в научно-исследовательской организации	исследовательской работы в научно-исследовательской организации	в научно-исследовательской организации
ВЛАДЕТЬ: навыками взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	В целом успешное, но не систематическое применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	В целом успешное и систематическое применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях