



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФГБОУ ВО «ИГУ»

Кафедра физической и коллоидной химии

УТВЕРЖДАЮ:

Декан химического факультета, доц.

 А.И. Вильмс

“ 17 ” мая 2021 г.



Рабочая программа дисциплины

Наименование дисциплины **Б1.В.ДВ.01.01 СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА**

Направление подготовки **04.04.01 - Химия**

Направленность подготовки **Научно-технологическая**

Квалификация выпускника - **магистр**

Форма обучения **Очная**

Согласовано с УМК химического
факультета

Протокол № 6 от «17» мая 2021 г.


Председатель


А.И. Вильмс.

Рекомендовано кафедрой физической и
коллоидной химии:

Протокол № 6 от «12» мая 2021 г.

Зав. кафедрой


Шмидт А.Ф.

Иркутск 2021 г.

Содержание

	стр.
I. Цели и задачи дисциплины (модуля)	3
II. Место дисциплины (модуля) в структуре АОПОП.	3
III. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)	3
IV. Содержание и структура дисциплины (модуля)	
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	
4.3 Содержание учебного материала	
4.3.1 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ	
4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение в рамках самостоятельной работы студентов	
4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	
V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)	12
а) перечень литературы	
б) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	
VI. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	13
6.1. Учебно-лабораторное оборудование:	
6.2. Программное обеспечение:	
6.3. Технические и электронные средства обучения:	
VII. Образовательные технологии	14
VIII. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации	14

I. Цели и задачи дисциплины:

Цели:

овладение магистрантами химического факультета теоретическими основами классической и квантовой статистической термодинамики.

Задачи:

- сформировать у обучающихся комплексный подход к методам расчета термодинамических функций идеального и реального газа, статистическому описанию химического равновесия и элементарного химического акта.
- расширить и углубить фундаментальные знания студентов в области физической химии;
- закрепить необходимый понятийный аппарат важнейших разделов дисциплины;
- - сформировать умение применять на практике полученные знания.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ АОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина «Статистическая термодинамика» относится к дисциплинам по выбору вариативной части профессионального цикла (Б1.В.ДВ.01.01).

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами (на предыдущем уровне образования в бакалавриате), а именно:

«Математика» (Б1.О.10), «Механика и молекулярная физика» (Б1.О.13), «Физическая химия. Химическая термодинамика» (Б1.О.24), «Физическая химия. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ» (Б1.О.25), «Строение вещества» (Б1.О.30).

Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

«Квантовая химия» (Б1.О.04), «Научно-исследовательская работа» (Б2.В.03(Н)), выполнения выпускных квалификационных работ и формирования профессиональных компетенций.

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций в соответствии с ФГОС ВО и АОП ВО по направлению подготовки 04.04.01 «Химия», программа: научно-технологическая

**Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю),
соотнесенных с индикаторами достижения компетенций**

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
<p align="center"><i>ПК-4.2</i> <i>Проводит</i> <i>расчетно-теоретические</i> <i>исследования по заданной</i> <i>теме в выбранной</i> <i>области химии</i></p>	<p align="center"><i>ИДК_{ПК4.2}</i> <i>Умеет</i> <i>проводить расчетно-</i> <i>теоретические</i> <i>исследования по заданной</i> <i>теме в выбранной</i> <i>области химии</i></p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - фундаментальные понятия и теоретические основы статистической термодинамики; - методы и способы решения задач по статистической термодинамике; <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять методы статистической термодинамики при описании термодинамических свойств химических систем; анализировать полученные результаты с использованием информационных ресурсов, научной, опытно-экспериментальной и приборной базы; <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - теоретическими представлениями в области статистической термодинамики, подходами, применяемыми для вычисления термодинамических функций по молекулярным данным методами статистической термодинамики; основами статистической физики неравновесных систем и возможностью ее применения в химической кинетике; - навыками сбора и обработки научной и научно-технической информации, необходимой для решения исследовательских задач; - навыками формулирования выводов по итогам проведенных исследований, экспериментов, наблюдений, измерений.

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Объем дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часа,
в том числе 1 зачетная единица, 35 часов на экзамен
Из них 18 часов – практическая подготовка

Форма промежуточной аттестации: экзамен

.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/тема	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточн ой аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися				
					Лекции	Семинарские/ практические/ лабораторные занятия	Консультации		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	Основные постулаты статистической термодинамики	1	27	4	6	4	1	16	УО, ПЗ
2	Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа	1	33	8	4	8	1	20	УО, ПЗ
3	Статистический расчет термодинамических функций реального газа	1	16	2	2	2	2	10	УО, ПЗ

4	Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики	1	33	4	6	4	3	20	УО, ПЗ
	всего		109	18	18	18	7	66	35 (Экзамен)

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
1	Основные постулаты статистической термодинамики	Работа с литературой. Подготовка к практическим занятиям на тему «Закон распределения молекул по энергиям (закон Больцмана)».		16	УО	№№ 1,2 в списке основной литературы
1	Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа	Работа с литературой. Подготовка к практическим занятиям на тему «Суммы по состояниям»		4	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы
1		Работа с литературой. Подготовка к практическим занятиям на тему «Связь суммы по состояниям с термодинамическими функциями. Расчет термодинамических функций для поступательного движения одноатомного газа»		8	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
		Работа с литературой. Подготовка к практическим занятиям на тему «Связь суммы по состояниям с термодинамическими функциями. Расчет термодинамических функций для двухатомных молекул»		8	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы
1	Статистический расчет термодинамических функций реального газа	Работа с литературой. Подготовка к практическим занятиям на тему «Статистический расчет термодинамических функций реального газа»		10	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы
1	Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики	Работа с литературой. Подготовка к практическим занятиям на тему «Расчет константы равновесия реакций методами статистической термодинамики»		20	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы
Общий объем самостоятельной работы по дисциплине (час)				66		

4.3 Содержание учебного материала

1. Введение. (2 ч.)

Основы классической статистической термодинамики. Динамическая и статистическая закономерность. Основные понятия: микросостояния и фазовое пространство, функция статистического распределения, статистический ансамбль.

2. Основные постулаты статистической термодинамики (6 ч)

Постулаты статистической физики. Теорема Лиувилля. Микроканоническое и каноническое распределение Гиббса. Статистический интеграл и его связь с термодинамическими функциями. Статистическое обоснование первого и второго законов термодинамики. Особенность квантово-механического описания системы. Распределение в квантовой статистической физике. Функции распределения Максвелла-Больцмана, Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака.

3. Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа (4 ч)

Вычисление термодинамических функций по молекулярным данным методами статистической термодинамики. Выражение термодинамических функций идеального газа через сумму по состояниям молекулы. Суммы по состояниям атомов. Суммы по состояниям двухатомных молекул. Явные выражения для термодинамических функций. Примеры вычисления термодинамических функций.

4. Статистический расчет термодинамических функций реального газа (2 ч.)

Статистическая термодинамика реальных газов. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Вириальное уравнение состояния газа. Термодинамические функции реальных газов.

5. Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики (4 ч)

Статистическое описание химического равновесия. Способ вычисления констант равновесия. Теория активированного комплекса (переходного состояния). Вывод основного уравнения теории активированного комплекса. Примеры расчета константы скорости с помощью теории активированного комплекса. Мономолекулярные и бимолекулярные реакции.

4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/н	№ Раздела и темы	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)		Оценочные средства	Формируемые компетенции (индикаторы)*
			Всего часов	Из них практическая подготовка		
1	2	3	4	5	6	7
2	1. Основные постулаты статистической термодинамики	Закон распределения молекул по энергиям (закон Больцмана).	4	4	ПЗ	ПК-4.2 Знает фундаментальные понятия и теоретические основы

						статистической термодинамики; Умеет применять методы статистической термодинамики при описании термодинамических свойств химических систем; Владеет теоретическими представлениями и в области статистической термодинамики
3	2. Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа	Суммы по состояниям. Расчет для Н и Н ₂ при 298.15 и 1000 К	2	2	ПЗ	ПК-4.2 Умеет применять методы статистической термодинамики при описании термодинамических свойств химических систем; Владеет подходами, применяемыми для вычисления термодинамических функций по молекулярным данным методами статистической термодинамики
		Связь суммы по состояниям с термодинамическими функциями. Расчет термодинамических функций для поступательного движения одноатомного газа	3	3	ПЗ	Знает фундаментальные понятия и теоретические основы статистической термодинамики; Владеет подходами, применяемыми для вычисления термодинамических

						ких функций по молекулярным данным методами статистической термодинамики
		Связь суммы по состояниям с термодинамическими функциями. Расчет термодинамических функций для двухатомных молекул.	3	3	ПЗ	<p>Знает фундаментальные понятия и теоретические основы статистической термодинамики;</p> <p>Владеет подходами, применяемыми для вычисления термодинамических функций по молекулярным данным методами статистической термодинамики</p>
4	3. Статистический расчет термодинамических функций реального газа	Статистический расчет термодинамических функций реального газа	2	2	ПЗ	<p>Знает фундаментальные понятия и теоретические основы статистической термодинамики; методы и способы решения задач по статистической термодинамике;</p> <p>Умеет применять методы статистической термодинамики при описании термодинамических свойств химических систем;</p> <p>Владеет подходами, применяемыми для вычисления</p>

						термодинамических функций по молекулярным данным методами статистической термодинамики
5	4. Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики	Расчет константы равновесия реакций методами статистической термодинамики	4	4	ПЗ	Знает фундаментальные понятия и теоретические основы статистической термодинамики; методы и способы решения задач по статистической термодинамике; Умеет применять методы статистической термодинамики при описании термодинамических свойств химических систем; анализировать полученные результаты; Владеет теоретическими представлениями и в области статистической термодинамики, подходами, применяемыми для вычисления термодинамических функций по молекулярным данным методами статистической термодинамики; основами статистической

						физики неравновесных систем и возможностью ее применения в химической кинетики;
--	--	--	--	--	--	---

4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде решения задач проводится во внеаудиторное время

Организация самостоятельной работы студента представлена в методических рекомендациях по организации самостоятельной работы студента, подготовленных преподавателями кафедры.

Примеры решения типовых задач представлены в рекомендуемых учебных пособиях и задачниках по физической химии:

Еремин, В.В. Основы физической химии [Текст] : учеб.пособие для студ. вузов, обуч. по спец. 011000 - Химия и по напр. 510500 - Химия : в 2 т. / В. В. Еремин [и др.]. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Бинوم. Лаборатория знаний, 2013 - . - ISBN 978-5-9963-0377-9. Ч. 2 : Задачи. - 2013. - 263 с. : ил., табл. - ISBN 978-5-9963-0536-0.

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

а) основная литература

1. Шмидт, Ф.К. Основы статистической физики и термодинамики для химиков [Текст] : учеб. пособие для обуч. по напр. подгот. 04.04.01 - "Химия" / Ф. К. Шмидт, Л. Б. Белых ; рец.: В. С. Ткач, С. А. Скорникова ; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2015. - 320 с. ; 21 см. - Библиогр.: с. 319-320. - ISBN 978-5-9624-1272-6 : 41 экз.+
2. Основы физической химии [Текст] : учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по спец. 011000 - Химия и по напр. 510500 - Химия : в 2 т. Ч. 1 : Теория / В. В. Еремин [и др.]. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Бинوم. Лаборатория знаний, 2013 - 320 с. - ISBN 978-5-9963-0535-3. 6 экз.+

дополнительная литература

3. Шмидт, Ф.К. Основы статистической физики для химиков : учеб. пособие / Ф. К. Шмидт ; М-во образования РФ, Гос. образоват. учреждение высш. проф. образования, Иркут. гос. ун-т. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2003. - 264 с. ; 21см. 14 экз.+

5. Каретников, Г.С. Основы статистического метода расчета термодинамических

свойств газов [Текст] : учеб. пособие / Г. С. Каретников ; Ленингр. технол. ин-т им. Ленсовета, Каф. физ. химии. - Л. : ЛТИ, 1982. - 56 с. ; 20 см. - Библиогр.: с. 54-55 : 2 экз.+

6. Ансельм, А.И. Основы статистической физики и термодинамики [Электронный ресурс] : учеб. пособие / А. И. Ансельм. - Москва : Лань, 2007. - 423, [3] с. [3] с. : ил. - (Учебники для вузов : специальная литература) (Классическая учебная литература по физике) (Лучшие классические учебники). - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=692. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-0756-9 :+



базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/stat-td/welcome.html>

Данный ресурс представляет собой набор задач по статистической термодинамике с решениями, разработанных коллективом химического факультета МГУ.

2. https://www.chemport.ru/data/chemipedia/article_6337.html

Данный ресурс содержит справочные материалы по статистической термодинамике из «Химической энциклопедии».

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Помещения для проведения лекционных и лабораторных занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, приборной базой и реактивами, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 303, 402, 426); ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.

6.2. Программное обеспечение

6.3. Технические и электронные средства обучения:

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины «Статистическая термодинамика» читаются лекции, проводятся практические занятия, на которых проводят выполнение практических заданий.

Активные формы обучения. На практических занятиях, которые составляют около половины от контактной работы, каждый студент самостоятельно решает задачи на различные темы, участвует в дискуссионном разборе конкретных ситуаций. Такой вид организации обучения способствует закреплению теоретических положений статистической термодинамики, приобретению практических навыков решения расчетных задач по нахождению термодинамических функций для различных видов

движения и равновесных параметров физических и химических систем, умению использовать теоретические знания для решения фундаментальных и прикладных задач статистической термодинамики.

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Оценочные средства текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета. Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить у обучающихся сформированность компетенции ПК 4.2.

8.1. Оценочные материалы (ОМ):

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Выполнение практических заданий. УО.	Введение. Основные понятия статистической термодинамики.	ПК 4.2
2	Выполнение практических заданий. УО.	Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа	ПК 4.2
3	Выполнение практических заданий. УО.	Статистический расчет термодинамических функций реального газа	ПК 4.2
4	Выполнение практических заданий. УО.	Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики	ПК 4.2

ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ

Вопросы для УО №1. Понятийный аппарат и основные постулаты статистической термодинамики

1. Основные понятия статистической термодинамики: макросостояние и микросостояние системы, различимые и неразличимые частицы, термодинамическая вероятность, фазовое пространство; микроканонический ансамбль, канонический ансамбль, большой канонический ансамбль.
2. Распределение Максвелла по скоростям.
3. Определение термодинамической вероятности с помощью классической статистики Больцмана.
4. Закон распределения молекул по энергиям (закон Больцмана), его вывод.

Вопросы для УО №2. Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа

1. Молекулярная и полная суммы по состояниям: физический смысл; связь между ними в случае различимых и неразличимых частиц. Статистический вес.
2. Связь сверхнулевого значения внутренней энергии идеального газа с полной и молекулярной суммами по состояниям.
3. Связь сверхнулевого значения энтальпии идеального газа с полной и молекулярной суммами по состояниям.
4. Связь значений теплоемкостей при постоянном объеме и при постоянном давлении с полной и молекулярной суммами по состояниям.
5. Связь энтропии идеального газа с полной и молекулярной суммами по состояниям.
6. Связь сверхнулевого значения энергии Гиббса и энергии Гельмгольца с полной и молекулярной суммами по состояниям.
7. Принцип разделения молекулярной суммы по состояниям на составляющие, связанные с различными видами движения. Виды движения, характерные для одноатомных молекул.
8. Электронная сумма по состояниям.
9. Поступательная сумма по состояниям.
10. Уравнение Закура-Тетроде.
11. Термодинамические функции одноатомных молекул, обусловленные электронным возбуждением молекул и их поступательным движением: $(U-U_0)_{\text{пост.}}$; $(H-H_0)_{\text{пост.}}$; C_v пост., $(F-U_0)_{\text{пост.}}$; $(G-U_0)_{\text{пост.}}$.
12. Сумма по состояниям «ядерного движения».
13. Вращательная сумма по состояниям двухатомных молекул.
14. Термодинамические функции для вращательного движения двухатомных молекул: $(U-U_0)_{\text{вращ.}}$; $(H-H_0)_{\text{вращ.}}$; C_v вращ., $(F-U_0)_{\text{вращ.}}$; $(G-U_0)_{\text{вращ.}}$.
15. Колебательная сумма по состояниям двухатомных молекул.
16. Термодинамические функции для колебательного движения двухатомных молекул: $(U-U_0)_{\text{кол.}}$; $(H-H_0)_{\text{кол.}}$; C_v кол., $(F-U_0)_{\text{кол.}}$; $(G-U_0)_{\text{кол.}}$?

Вопросы для УО №3. Статистический расчет термодинамических функций реального газа

1. Статистическая термодинамика реальных газов.
2. Уравнение состояния реального газа. Вычисление термодинамических функций реальных газов.

Вопросы для УО №4. Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики

1. Статистическое описание химического равновесия.
2. Способ вычисления констант равновесия.
3. Теория активированного комплекса.
4. Расчет констант скоростей с помощью теории активированного комплекса

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ К ЭКЗАМЕНУ

1. Предмет и задачи статистической термодинамики.
2. Динамическая и статистическая закономерность.
3. Макро- и микросостояния системы, фазовое пространство.
4. Функция статистического распределения. Статистический ансамбль.
5. Постулаты статистической физики.
6. Распределения Гиббса.
7. Статистическое обоснование законов термодинамики.
8. Распределения Максвелла-Больцмана, Бозе-Эйнштейна, Ферми-Дирака.
9. Связь термодинамических функций со статистической суммой по состояниям молекулы.
10. Вычисление термодинамических функций.
11. Статистическая термодинамика реальных газов.
12. Статистическое описание химического равновесия.
13. Способ вычисления констант равновесия.
14. Теория активированного комплекса.
15. Расчет констант скоростей с помощью теории активированного комплекса.

Разработчик:



доцент
(занимаемая должность)

Курохтина А.А.
(Ф.И.О.)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.04.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии
«12» мая 2021 г

Протокол № 6.

Зав. кафедрой



/А.Ф. Шмидт/

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.