



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
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
«13» мая 2024 г.

Рабочая программа дисциплины Б1.В.ДВ.01.01

Наименование дисциплины **СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА**

Направление подготовки **04.04.01 - Химия**

Программа подготовки: **Фундаментальная химия.**

Квалификация выпускника – **МАГИСТР**

Форма обучения **очная**

Согласовано с УМК_химического
факультета

Протокол № 4 от «13» мая 2024 г.

Председатель

А.И. Вильмс .

Рекомендовано кафедрой физической и
коллоидной химии:

Протокол № 9 «26» апреля 2024 г.

И.о. зав. кафедрой

Бельх Л.Б.

Иркутск 2023 г..

Содержание

	стр.
1. Цели и задачи дисциплины (модуля)	3
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП.	3
3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)	3
4. Содержание и структура дисциплины (модуля)	5
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	7
4.3 Содержание учебного материала	10
5. Перечень семинарских, практических занятий, лабораторных работ, план самостоятельной работы студентов, методические указания по организации самостоятельной работы студентов	12
6. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)	
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)	13
а) основная литература;	
б) дополнительная литература;	
в) программное обеспечение;	
г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	13
9. Образовательные технологии	14
10. Оценочные материалы (ОС)	14

1. Цели и задачи дисциплины:

Цели:

овладение магистрантами химического факультета теоретическими основами классической и квантовой статистической термодинамики и навыками их применения при решении химических задач.

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.

2. 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.28), «Квантовая механика» (Б1.О.29).

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.

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОП 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><i>ПК-4</i> Способен проводить экспериментальные и расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p><i>ИДК_{ПК4.2}</i> Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии</p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - фундаментальные понятия и теоретические основы статистической термодинамики; - методы и способы решения задач в области статистической термодинамики; <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; <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.

4. 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 промежуточно й аттестации (<i>по семестрам</i>)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися				
					Лекции	Семинарские/ практические/ лабораторные занятия	КСР + консультации + КО		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	Введение	1	2	-	2	-	-	-	-
2	Основные постулаты статистической термодинамики	1	31	4	6	4	2	15	УО, ПЗ
3	Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа	1	33	8	4	8	4	20	УО, ПЗ

№ 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 промежуточно й аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися				
					Лекции	Семинарские/ практические/ лабораторные занятия	Консультации		
4	Статистический расчет термодинамических функций реального газа	1	15	2	2	2	3	10	УО, ПЗ
5	Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики	1	28	4	4	4	4	15	УО, ПЗ
Итого часов			109	18	18	18	13	60	Экзамен

Примечание: УО – устный опрос, ПЗ – практические задания

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)».		15	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
		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.)		
1		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»		15	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы
Общий объем самостоятельной работы по дисциплине (час)				60		
Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)				60		

Контактная работа может быть аудиторной, внеаудиторной, а также проводиться в электронной информационно-образовательной среде.

Контактная работа при проведении учебных занятий по дисциплинам (модулям) включает в себя:

занятия лекционного типа (лекции и иные учебные занятия, предусматривающие преимущественную передачу учебной информации педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, обучающимся),

занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия),

групповые консультации,

индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях (в том числе индивидуальные консультации);

иную контактную работу (при необходимости), предусматривающую групповую или индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, определяемую организацией самостоятельно.

4.3 Содержание учебного материала

Введение. (2 ч.)

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

1. 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.

2. 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.

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

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

4. 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.

5. 5.1. 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
1	1. Основные постулаты статистической термодинамики	Закон распределения молекул по энергиям (закон Больцмана).	4	4	ПЗ	ПК-4

2	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
		Связь суммы по состояниям с термодинамическими функциями. Расчет термодинамических функций для поступательного движения одноатомного газа	3	3	ПЗ	ПК-4
		Связь суммы по состояниям с термодинамическими функциями. Расчет термодинамических функций для двухатомных молекул.	3	3	ПЗ	ПК-4
3	3. Статистический расчет термодинамических функций реального газа	Статистический расчет термодинамических функций реального газа	2	2	ПЗ	ПК-4
4	4. Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики	Расчет константы равновесия реакций методами статистической термодинамики	4	4	ПЗ	ПК-4

5.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	Основные постулаты статистической термодинамики	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Выполнение практических заданий.	ПК-4	<i>ИДК ПК-4.2</i>
2	Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Выполнение практических заданий.	ПК-4	<i>ИДК ПК-4.2</i>
3	Статистический расчет термодинамических функций реального газа	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Выполнение практических заданий.	ПК-4	<i>ИДК ПК-4.2</i>
4	Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Выполнение практических заданий.	ПК-4	<i>ИДК ПК-4.2</i>

5.3. 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.

6. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии) _____

7. 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.+

б) дополнительная литература

1. 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.+
2. Эткинс, П. Физическая химия [Текст] : в 3 ч. / П. Эткинс, Д. де Паула. - М. : Мир, 2007 - . - 25 см. - (Лучший зарубежный учебник). - ISBN 5-03-003789-6. Ч.1 : Равновесная термодинамика / Пер. с англ. И. А. Успенской, В. А. Иванова. - 2007. - 495 с. - Библиогр. в конце глав. - Пер. изд.: Atkins' Physical Chemistry / P. Atkins, Paula, J. De Paula. - Oxford, 2002. - ISBN 5-03-003786-1 : 3 экз.+
3. 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.+
4. 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 :



в) программное обеспечение

г) 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».

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

8.1. 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.

8.2. Программное обеспечение

8.3. Технические и электронные средства обучения

9. 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.

10. 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.

10.1. 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	Выполнение практических заданий. УО.	Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа	ПК 4
3	Выполнение практических	Статистический расчет термодинамических функций	ПК 4

	заданий. УО.	реального газа	
4	Выполнение практических заданий. УО.	Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики	ПК 4

ПРИМЕРЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАНИЙ

1. Основные постулаты статистической термодинамики

В некоторой молекуле есть два уровня энергии, отстоящих друг от друга на 1000 см^{-1} . Нижний уровень не вырожден, верхний – трехкратно вырожден. Рассчитайте среднюю энергию молекулы (в см^{-1}) при температуре 1200 К .

2. Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа

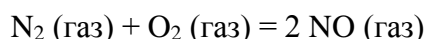
Рассчитайте поступательный вклад в энтропию газообразного кислорода при температуре $10 \text{ }^\circ\text{C}$ и давлении 1.1 атм .

3. Статистический расчет термодинамических функций реального газа

Рассчитайте конфигурационный интеграл для идеального газа. Зависит ли его величина от температуры?

4. Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики

Рассчитайте константу равновесия K_p для реакции



при $T = 600 \text{ К}$. Молекулярные постоянные:

N_2	$\omega = 2358 \text{ см}^{-1}$	$V = 2.00 \text{ см}^{-1}$	$g_0 = 1$
O_2	$\omega = 1579.8 \text{ см}^{-1}$	$V = 1.447 \text{ см}^{-1}$	$g_0 = 3$
NO	$\omega = 1904.4 \text{ см}^{-1}$	$V = 1.705 \text{ см}^{-1}$	$g_0 = 4$

Теплота реакции при абсолютном нуле $\Delta U_0^\circ = 180.3 \text{ кДж/моль}$.

Возбужденными электронными состояниями пренебречь.

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.
3. 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. Способы 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.

**ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ
КОМПЕТЕНЦИЙ**

Индикаторы достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
<p align="center"><i>ИДК ПК-4,2</i></p> <p>Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии</p>	<p>Знает: фундаментальные понятия и теоретические основы статистической термодинамики; методы и способы решения задач в области статистической термодинамики</p>	<p>Собеседование в форме устного опроса.</p>
	<p>Умеет: применять методы статистической термодинамики при описании термодинамических свойств химических систем; анализировать полученные результаты с использованием информационных ресурсов.</p>	<p>Выполнение практических заданий.</p>
	<p>Владеет: 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</p>	<p>Собеседование в форме устного опроса. Выполнение практических заданий.</p>

Программа оценивания контролируемых компетенций:

Тема или раздел дисциплины ¹	Код индикатора компетенции	Планируемый результат	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС ²	
					ТК ³	ПА ⁴
1. Основные постулаты статистической термодинамики	ИДКпк-4.2 Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знать: основные понятия и постулаты статистической термодинамики. Уметь: решать типовые расчетные задачи с использованием различных типов статистического распределения	Знает основные фундаментальные понятия статистической термодинамики и выражения различных видов функций распределения; Умеет использовать функции распределения для расчета состояний химических систем	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», УО № 1. Решил задачу на использование функции статистического распределения.	УО, ПЗ	Экзамен
2. Суммы по состояниям молекул и термодинамические функции идеального газа	ИДКпк-4.2 Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знать: физический смысл и способы расчета молекулярных и полных сумм по состояниям различных видов движения и уравнения их связи с	Знает физический смысл и способы расчета молекулярных и полных сумм по состояниям и связь этих величин с различными термодинамическими	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», УО № 2. Решил задачу на расчет вкладов	УО, ПЗ	

		<p>термодинамическими функциями идеальных газов;</p> <p>Уметь: находить значения термодинамических функции идеальных газов по молекулярным данным методами статистической термодинамики;</p> <p>Владеть: навыками расчета значений термодинамических функций идеальных газов по молекулярным данным методами статистической термодинамики</p>	<p>функциями идеальных газов;</p> <p>Умеет рассчитывать термодинамические функции и идеальных газов с использованием значений молекулярных и полных сумм по состояниям;</p> <p>Владеет подходами, применяемыми для вычисления термодинамических функций по молекулярным данным методами статистической термодинамики</p>	<p>различных видов движения в термодинамические функции идеальных газов</p>		
<p>3. Статистический расчет термодинамических функций реального газа</p>	<p>ИДКпк-4.2 Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии</p>	<p>Знать: вид уравнения состояния реального газа и его статистическое обоснование;</p> <p>Владеть: навыками обработки результатов эксперимента</p>	<p>Знает физический смысл и способы определения вириальных коэффициентов уравнения состояния реального газа;</p> <p>Владеет навыками расчета конфигурационных</p>	<p>Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», УО № 3. Решил задачу на расчет конфигурационного</p>	УО, ПЗ	

			интегралов реальных газов	интеграла реального газа		
4. Описание химического равновесия и элементарного химического акта методами статистической термодинамики	ИДКпк-4.2 Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знать: способы расчета термодинамических констант равновесия методами статистической термодинамики; Уметь: рассчитывать величины термодинамических констант равновесия методами статистической термодинамики; Владеть: навыками расчета термодинамических констант равновесия методами статистической термодинамики.	Знает способы расчета констант равновесия химической реакции по молекулярным данным веществ-участников реакции; Умеет рассчитывать термодинамические константы равновесия по молекулярным данным веществ-участников реакции; Владеет навыками расчета термодинамических констант равновесия по молекулярным данным веществ-участников реакции и анализа получаемых результатов;	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», УО № 4. Решил задачу на расчет константы равновесия химической реакции по молекулярным данным веществ-участников реакции методами статистической термодинамики	УО, ПЗ	

УО – устный опрос, ПЗ – практическое задание.

КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ:

Оценка «отлично»:

Имеет четкое, целостное представление о теоретических основах статистической термодинамики, понимание их сущности; сформированные умения и навыки в области решения химических задач различного уровня сложности на основании молекулярных данных и формулировки выводов на основе получаемых решений.

Оценка «хорошо»:

Демонстрирует в целом сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания предмета, умения и навыки применения методов и подходов статистической термодинамики при решении химических задач базового уровня с минимальным количеством ошибок не принципиального характера.

Оценка «удовлетворительно»:

Имеет несистематизированные знания предмета (владеет понятийным аппаратом статистической термодинамики, знает основные законы, но допускает неточности в формулировках и выводах), частично сформированные умения и навыки применения методов и подходов статистической термодинамики при решении химических задач базового уровня (допускает неточности и ошибки в решении).

Оценка «неудовлетворительно»:

Фрагментарное знание предмета, отсутствие умений и навыков применения методов и подходов статистической термодинамики при решении химических задач базового уровня.

Разработчик:



(подпись)

доцент
(занимаемая должность)

Куроختина А.А.
(Ф.И.О.)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению подготовки 04.04.01 – «Химия», профиль: Фундаментальная химия.

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии
«26» апреля 2024 г

Протокол № 9

И. о. зав. кафедрой



/Л.Б. Белых/

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