

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д.А. Гаурский

(ДО КФУ)

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Элементы статистической термодинамики Б1.В.ДВ.6

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Физическая химия

Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Седов И.А.

Рецензент(ы):

Верещагина Я.А.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 72719

Казань
2019

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) ведущий научный сотрудник, к.н. (доцент) Седов И.А. НИЛ Лаборатория синтетических физиологически активных веществ Химический институт им. А.М. Бутлерова, Igor.Sedov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Осознание связей между фундаментальными законами макро- и микромира, общности и различий квантовомеханического и классического подхода к описанию окружающего мира, строгое обоснование законов термодинамики, знакомство с современными теоретическими методами физической химии.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ДВ.6 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина 'Элементы статистической термодинамики' относится к вариативной части блока дисциплин учебного плана подготовки бакалавров по направлению 'Химия' по профилю 'Физическая химия'. (курс по выбору). Студенты, приступающие к освоению дисциплины, должны владеть знаниями по следующим дисциплинам: Физическая химия, Физика, Математика.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-7 (общекультурные компетенции)	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ПК-3 (профессиональные компетенции)	владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания
ПСК-1	способностью использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия в профессиональной деятельности в соответствии с выбранной специализацией

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные постулаты статистической термодинамики, принцип Паули и неразличимость элементарных частиц, виды статистических ансамблей и функций распределения, понятие статистической суммы и ее связь с термодинамическими функциями, расчет статистической суммы (интеграла) на основе представлений квантовой и классической механики, вклады отдельных видов энергии в статистические суммы и термодинамические функции, вириальное уравнение и другие уравнения состояния неидеальных газов, связь параметров межмолекулярных взаимодействий и параметров уравнений состояния, методы численного моделирования реальных систем.

2. должен уметь:

рассчитывать статистические суммы и термодинамические функции для модельных объектов: идеальных газов, жесткого ротатора, гармонического осциллятора; неидеальных газов с определенным видом потенциала межмолекулярного взаимодействия

3. должен владеть:

теоретическим аппаратом статистической термодинамики

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять расчетные методы для предсказания термодинамических свойств веществ

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 8 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Основы статистической термодинамики. Вывод основных видов функций распределения. Связь статистической суммы с макроскопическими свойствами вещества.	8	1-7	16	0	0	Устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Интерпретация свойств идеальных объектов на основе статистической термодинамики. Расчет статистических сумм и термодинамических функций для различных газов, констант равновесия и энтальпий газофазных реакций.	8	8-12	16	0	0	Письменное домашнее задание
3.	Тема 3. Применение статистической термодинамики к реальным системам. Методы численного моделирования.	8	13-17	10	0	0	Контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	Зачет
	Итого			42	0	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Основы статистической термодинамики. Вывод основных видов функций распределения. Связь статистической суммы с макроскопическими свойствами вещества.

лекционное занятие (16 часа(ов)):

Основные принципы статистики. Молекулярные модели макроскопических тел: идеальный газ. Термодинамика газа, макроскопическое состояние, внешние условия, отклик на внешнее возмущение, релаксация и квазистатические процессы, стационарные и равновесные состояния, энергия и энтропия, уравнение состояния, теплоемкости. Основные идеи и задачи статистики: система и подсистемы, характеристики "точки" газа, усреднение по времени и объему, термодинамический предел, энергия и давление, флуктуации. Задачи статистики.

Тема 2. Интерпретация свойств идеальных объектов на основе статистической термодинамики. Расчет статистических сумм и термодинамических функций для различных газов, констант равновесия и энтальпий газофазных реакций.

лекционное занятие (16 часа(ов)):

Классическая статистика газа. Функция распределения, соображения о размерностях, масштабирование фазового пространства. Симметрия функции распределения: независимость от начальных условий, метод ансамблей, квазистационарные состояния, теорема Лиувилля, аддитивные интегралы движения, микроканоническое распределение, исключение импульса и момента, вид функции распределения, проблемы с определением энтропии. Квантовая статистика газа. Соотношения неопределенностей, чистые и смешанные состояния, матрица плотности, теорема Лиувилля, микроканоническое распределение, вид функции распределения, статистический вес макроскопического состояния. Квазиклассический переход, введение постоянной Планка в классическую статистику, квантование фазового пространства, статистические веса макросостояний в классической статистике

Тема 3. Применение статистической термодинамики к реальным системам. Методы численного моделирования.

лекционное занятие (10 часа(ов)):

. Термодинамические величины, Энтропия в квантовой и классической статистике, физический смысл энтропии, различные полезные формулы, закон возрастания энтропии, теорема Нернста. Температура и давление. Термическое и механическое равновесия. Основное термодинамическое тождество. Термодинамические неравенства: устойчивость равновесия, стабильные и метастабильные состояния. Термодинамические функции: энергия, энтальпия, свободная энергия и термодинамический потенциал. Зависимость термодинамических функций от числа частиц. Химический потенциал. 3. Распределение Гиббса. Каноническое распределение Гиббса, распределение Максвелла, свободная энергия в распределении Гиббса, большое каноническое распределение Гиббса с переменным числом частиц. Упрощения для идеального газа: принцип равнораспределения, распределения Больцмана, Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна, свободная энергия и уравнение состояния идеального газа. Вычисление термодинамических функций одно-, двух- и многоатомного газов, термодинамические таблицы, стандартные состояния.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Основы статистической термодинамики. Вывод основных видов функций распределения. Связь статистической суммы с макроскопическими свойствами вещества.	8	1-7	подготовка к устному опросу	11	устный опрос
2.	Тема 2. Интерпретация свойств идеальных объектов на основе статистической термодинамики. Расчет статистических сумм и термодинамических функций для различных газов, констант равновесия и энтальпий газофазных реакций.	8	8-12	подготовка домашнего задания	11	домашнее задание
3.	Тема 3. Применение статистической термодинамики к реальным системам. Методы численного моделирования.	8	13-17	подготовка к контрольной работе	8	контрольная работа
	Итого				30	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Лекции, мультимедийные презентации, практические занятия, в том числе с использованием компьютерных программ для решения задач.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Основы статистической термодинамики. Вывод основных видов функций распределения. Связь статистической суммы с макроскопическими свойствами вещества.

устный опрос , примерные вопросы:

Микроканонический ансамбль. Эргодическая гипотеза. Понятие энтропии и второе начало термодинамики. Канонический ансамбль и вывод распределения Больцмана. Статистическая сумма и ее связь с термодинамическими функциями. Статистический интеграл.

Тема 2. Интерпретация свойств идеальных объектов на основе статистической термодинамики. Расчет статистических сумм и термодинамических функций для различных газов, констант равновесия и энтальпий газофазных реакций.

домашнее задание , примерные вопросы:

Большой канонический ансамбль, вывод функции распределения. Бозоны и статистика Бозе-Эйнштейна. Фермионы и статистика Ферми-Дирака. Колебательная статистическая сумма и характеристическая колебательная температура. Вращательная сумма и характеристическая вращательная температура. Поступательная сумма, статистический интеграл для одноатомного идеального газа.

Тема 3. Применение статистической термодинамики к реальным системам. Методы численного моделирования.

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе: Ядерная и электронная статистические суммы. Молекулы орто- и параводорода. Теплоемкость идеального кристалла и температура Дебая. Электронный газ, сверхпроводимость и сверхтекучесть. Неидеальные системы, конфигурационный интеграл. Модель решеточного газа. Потенциалы межмолекулярных взаимодействий. Вывод уравнений состояния неидеальных газов. Применение статистической термодинамики к описанию жидкостей. Методы численного моделирования.

Итоговая форма контроля

зачет (в 8 семестре)

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету:

1. Определение понятия сольватация. Растворенное вещество. Растворитель.
2. Идеальные растворы. Объем, энтальпия и энтропия смешения.
3. Закон Рауля.
4. Закон Генри.
5. Парциальные мольные величины.
6. Химический потенциал и равновесие. Фазовое равновесие. Химическое равновесие.
7. Неидеальные газы. Изменение химического потенциала от температуры.
8. Уравнение Гиббса - Гельмгольца. Изменение химического потенциала от мольной доли.
9. Неидеальные растворы. Активность. Коэффициент активности.
10. Стандартные состояния: чистая жидкость и идеальный газ.
11. Концентрационная зависимость термодинамических параметров растворения и сольватации.
12. Представления, основанные на законах физики для макроскопических объектов.
13. Уравнение Кирквуда. Электростатическая модель Онзагера-Бетчера.

14. Модели, применяемые для расчета термодинамических параметров растворения, основанные на представлениях о растворе как о "растворе групп".
15. Модели ASOG и UNIFAC.
16. Модель Роршнайдера.
17. Модель MOSCED.
18. Классификация органических соединений и функциональных групп по энергии дисперсионных взаимодействий, приходящейся на единицу собственного объема их молекул.
19. Водородная связь.
20. Комплексы с переносом заряда.
21. Ассоциированные растворители.
22. Гидрофобные взаимодействия.
23. Компенсационная зависимость между свободной энергией и энтальпией сольватации и растворения.
24. Абсолютное и относительное влияние растворителя.
25. Положение равновесия химических реакций.
26. Кислотно-основное равновесие.
27. Таутомерное равновесие. Конформационное равновесие.
28. Кинетика реакций. Количественный учет влияния растворителя с помощью формальных и физических моделей.
29. Уравнение Кирквуда. Уравнение Уинштейна-Грюнвальда. Уравнение Пальма-Коппеля.
30. Влияние растворителя на УФ-спектры. Сольватохромные соединения.
31. Ет-шкала полярности растворителей.
32. Влияние среды в ИК- и ЯМР-спектроскопии.
33. Термодинамический подход к описанию влияния растворителя, на ф/х процессы.

7.1. Основная литература:

1. Афанасьев Б.Н. Физическая химия: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям 'Химическая технология', 'Биотехнология' и 'Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии' / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2012. - 463 с.
2. Афанасьев Б.Н. Акулова Ю.П. Физическая химия. [Электронный ресурс]. - Санкт-Петербург.: Лань, 2012. - 416 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4312
3. Еремин, В.В. Основы общей и физической химии: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, изучающих дисциплину 'Химия', по направлению подготовки ВПО 011200 / В. В. Еремин, А. Я. Борщевский. ? Долгопрудный: Интеллект, 2012. ? 847 с.:
4. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Термодинамика химических реакций [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2015. ? 101 с.
Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=64336

7.2. Дополнительная литература:

1. Физическая химия : Учеб. для вузов: В 2кн. Кн.1. Строение вещества. Термодинамика / ; Краснов К.С., Воробьев Н.К., Годнев И.Н.; Под ред. К.С.Краснова .? 3-е изд., испр. ? М. : Высшая школа, 2001 .? 512с.
2. Горшков, Владимир Иванович. Основы физической химии : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Биология' / В. И. Горшков, И. А. Кузнецов .? Издание 4-е .? Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011 .? 407 с.

3. Пурмаль, Анатолий Павлович. А, Б, В. химической кинетики : учеб. пособие для студентов хим. фак. университетов, обучающихся по спец. 011000 'Химия' и направлению 510500 'Химия' / А.П. Пурмаль .? Москва : Академкнига, 2004 .

4. Дамаскин, Б.Б. Электрохимия [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.Б. Дамаскин, О.А. Петрий, Г.А. Цирлина. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2015. - 671 с.

Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=58166

7.3. Интернет-ресурсы:

Cambridgesoft ChemBioOffice - <http://www.cambridgesoft.com/software/ChemBioOffice/>

TINKER molecular modeling software - <http://dasher.wustl.edu/tinker/>

книги - <http://elibrary.ru>

книги - <http://gen.lib.rus.ec>

Портал - http://en.wikipedia.org/wiki/Statistical_mechanics

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Элементы статистической термодинамики" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Проектор, персональные компьютеры или ноутбуки для решения задач.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по специальности: 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации Физическая химия .

Автор(ы):

Седов И.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Верещагина Я.А. _____

"__" _____ 201__ г.