

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Кафедра химии



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

Батыгов З.О.

2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА
КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ**

Факультет: химико-биологический

Направление подготовки /специальность: 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки: «Физическая химия»

Программа подготовки: академическая магистратура

Квалификация (степень) выпускника: Магистр

Форма обучения: очная

МАГАС 2018 г.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Статистическая термодинамика конденсированных систем» являются:

- изучение теоретических основ классической и статистической термодинамики, фазовых равновесий применения термодинамических методов для решения химических проблем;
- формирование у магистрантов знаний и умений, позволяющих моделировать и проводить численные расчеты при описании различных видов химических и фазовых равновесий и свойств веществ в растворах.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Статистическая термодинамика конденсированных систем» относится к вариативной части обязательных дисциплин; изучается в 1 семестре.

Дисциплина представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля – физической химии, коллоидной химии, химической технологии, физико-химических методов исследования.

Перечень дисциплин, необходимых для изучения дисциплины: неорганическая химия, квантовая химия, физика, математика.

Таблица 2.1.

Связь дисциплины «Статистическая термодинамика конденсированных систем» с последующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Статистическая термодинамика конденсированных систем»	Семестр
Б1.В.ОД.3	Химическая термодинамика и фазовые равновесия	2
Б1.В.ОД.4	Химическая динамика элементарных процессов, катализ.	3
Б1.В.ОД.8	Современные проблемы физической химии	3
Б1.В.ДВ.5	Химическая кинетика и механизмы химических реакций	3

В результате освоения дисциплины магистрант должен

Знать:

- роль статистической термодинамики конденсированных систем как теоретического фундамента современной физической химии.
- статистическую термодинамику конденсированных систем как раздел физической химии и ее роли в современной химии;
- возможности применения основ квантовой механики к решению химических задач;
- об установлении связи между макроскопическим и микроскопическим подходами к изучению свойств веществ в равновесном состоянии.

Уметь:

- демонстрировать связь фундаментальных экспериментов с теорией с помощью известных математических методов; решать задачи по данной дисциплине.
- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;
- пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач;
- проводить физико-химические исследования систем и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;
- проводить физико-химические расчеты;
- пользоваться справочной литературой;
- графически отображать полученные зависимости;
- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;
- вести научную дискуссию.

Владеть:

- основами дисциплины для решения практических задач;
- методикой проведения физико-химических исследований;
- современными приборами для физико-химических исследований.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

- а) **обще профессиональных (ОПК)** - ОПК-2;
- б) **профессиональных (ПК)** - ПК-1, ПК-3.

Таблица 3.1.

**Матрица связи компетенций, формируемых на основе изучения дисциплины
«Статистическая термодинамика конденсированных систем», с временными этапами
освоения ее содержания**

Коды компетенций (ФГОС)	Компетенция	Семестр изучения
ОПК-2	Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.	1
ПК-1	Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	1
ПК-3	Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований.	1

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Вид учебной работы	Всего часов	1 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	72	72
Аудиторные занятия	34	34
Лекции	16	16
Лабораторные занятия	16	16
Контроль самостоятельной работы	2	2
Самостоятельная работа студентов	38	38

**5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ
(РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА
АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ
ЗАНЯТИЙ**

Таблица 5.1.

Структура и содержание дисциплины

п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы (час)				Формы контроля
				Лекции	Лабораторные работы	Самостоятельные работы		
1.	Основные положения «Статистической термодинамики конденсированных систем»	1	1,2	2	2	6		Тестир.
2	Статистическая физика открытых систем	1	3-5	2	2	8		Опрос
3	Применение методов статистической физики к задаче расчета термодинамических функций идеального газа	1	6-10	4	4	8		Коллоквиум
4	Проблема учета межмолекулярных взаимодействий в статистической термодинамике	1	11-14	4	4	8		Опрос
5	Молекулярно-статистическое описание процесса адсорбции	1	15-16	4	4	8		Опрос
	Итого:			16	16	38		

Таблица 5.2.

Конкретизация результатов освоения дисциплины

<i>ОПК-2 Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации</i>		
Знать: возможности использования современных информационных технологий в образовании и науке; системы сбора, обработки и хранения химической информации; виды программного обеспечения для представления результатов химических исследований, принципы создания, построения и виды компьютерных презентаций; использовать презентационную графику для визуализации результатов теоретического и экспериментального исследований.	Уметь: создавать авторские и пользоваться стандартными банками компьютерных программ и банками данных; анализировать результаты математической обработки научных данных с целью определения их достоверности и области использования; использовать презентационную графику для визуализации результатов теоретического и экспериментального исследований.	Владеть: методами обработки информации системами мультимедиа, навыками создания компьютерных презентаций, в том числе интерактивных; всеми видами научного общения.
<i>ПК-1 Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты</i>		
Знать: о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии твердого тела (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и др.); электрические и магнитные свойства перспективных материалов, используемых в современной технике; принципы обработки полученных в исследованиях результатов; возможности использования Интернет-ресурсов для ознакомления с передовыми исследованиями в	Уметь: анализировать состав и свойства полученных веществ с целью доказательства выполнения поставленной задачи; давать рекомендации на основании проведенных исследований; оценивать экологические последствия, связанные с развитием ядерной промышленности, производить целенаправленный выбор источников ионизирующего излучения, необходимых для получения желаемого эффекта при обработке различных природных и искусственных объектов, и применять их в соответствии с различными требованиями; классифицировать материа-	Владеть: современными технологиями получения энергетических и наноматериалов, радиоактивных элементов, физико-химическим инструментарием, необходимым для определения степени воздействия ионизирующего излучения на различные объекты окружающей среды; навыками работы с поисковыми и информационными ресурсами на английском языке в сети Интернет.

сфере профессиональных результатов.	лы по различным признакам.	
<i>ПК-3 Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований</i>		
Знать: принципы работы на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований.	Уметь: работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований, выбирать средства измерений, методику анализа, оценивать уровень загрязнений; анализировать современные материалы и средства регистрации информации; делать выбор средств и материалов регистрации информации при проведении научных исследований.	Владеть: навыками выбора оптимального метода исследования функциональных материалов в зависимости от объема и целей исследования для решения поставленных задач на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся данных.

Содержание дисциплины

Раздел 1. Основные положения статистической термодинамики

Тема 1. Предмет и задачи статистической термодинамики

Основные понятия и определения. Микро- и макросостояния. Канонические переменные и фазовое пространство классической механической системы, фазовая точка, фазовая траектория. Функция плотности распределения вероятностей, ее свойства. Статистический ансамбль. Постулаты статистической термодинамики.

Методы описания систем микрочастиц. Классическое квантовомеханическое описание системы микрочастиц. Теорема Луивилля, ее обобщение для квантовых систем. Проблема обоснования постулатов статистической термодинамики. Эргодичность, квазиэргодичность, «размещиваемость» (по Н.С.Крылову). H-теорема Больцмана, ее современная трактовка, связь со вторым началом термодинамики. Распределения Гиббса. Общая схема вывода для квантовомеханических систем. Микроканоническое, каноническое и большое каноническое распределения. Переход к классической статистике.

Тема 2. Статистическая физика открытых систем

Большое каноническое распределение и большая статистическая сумма. Применение большого канонического распределения для определения среднего числа частиц в открытой системе. Выражение давления в открытой системе через большую статистическую сумму. Квантовый идеальный газ. Распределение Больцмана для больших числа частиц в данном квантовом состоянии. Распределение Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна. Понятие о вырожденном и невырожденном газе.

Флуктуации. Общая формула для вероятности флуктуации в изолированной системе. Понятие о мере (средней величине) флуктуации и относительной флуктуации. Теорема о зависимости относительной флуктуации от числа независимых частей системы. Распределение Гаусса для одного или нескольких величин. Флуктуации в системе, находящейся в термостате. Флуктуации основных физических величин. Связь флуктуации энергии и теплоемкости. Особенности флуктуации энергии при фазовых переходах и при

низких температурах. Флуктуация плотности. Флуктуации в открытой системе. Формула для величины флуктуации числа частиц. Формула Пуассона.

Тема 3. Применение методов статистической термодинамики к задаче расчета термодинамических функций идеального газа

Связь термодинамических функций с молекулярными параметрами. Выражение статистической суммы идеального газа через статистическую сумму молекул. Возможность приближенного разделения уровней энергии молекул на составляющие. Колебательные, вращательные и электронные уровни энергии молекул. Представление статистической суммы молекул в виде произведения поступательной, вращательной, колебательной и электронной статистических сумм. Возможность классического расчета поступательной статистической суммы, формулы для поступательной статистической суммы.

Расчеты статистических сумм разных форм молекулярного движения. Расчет колебательной статистической суммы молекул в гармоническом приближении. Задача расчета вращательной статистической суммы и выражения для вращательной статистической суммы двухатомных молекул. Задача расчета электронной статистической суммы и возможность выражения при не очень высоких температурах электронной статистической суммы основного состояния. Формула для энтропии одноатомного идеального газа (формула Сакура-Тетроде) и сравнение расчета энтропии по этой формуле с опытом для некоторых газов. Выражения для констант равновесия химических газовых реакций через молекулярные статистические суммы. Применение этих формул для расчетов степени ионизации газов. Формула Саха.

Раздел 2. Основные положения статистической термодинамики неравновесных систем

Тема 4. Проблема учета межмолекулярных взаимодействий в статистической термодинамике

Общий характер зависимости потенциальной энергии молекул от расстояния между центрами молекул. Формула Леннарда - Джонса. Случаи парных и непарных (специфических) взаимодействий молекул. Конфигурационный интеграл как сомножитель в выражении статистической суммы, отражающий взаимодействие молекул.

Метод Майера разложения конфигурационного интеграла в ряд. Расчет конфигурационного интеграла в первом приближении метода Майера, групповые интегралы. Представление о диаграммной технике вычисления групповых интегралов. Термодинамические величины классической плазмы. Уравнения самосогласованного электрического поля электронов и ионов. Метод Дебая-Хюккеля. Дебаевский радиус. Метод корреляционных функций.

Раздел 3. Молекулярно-статистическая теория адсорбции

Тема 5. Молекулярно-статистическое описание процесса адсорбции

Статистическо - термодинамическое описание адсорбции. Анализ адсорбционного равновесия с использованием большого канонического ансамбля. Вириальное выражение для Гиббсовской адсорбции. Связь константы Генри с потенциальной энергией молекулы адсорбата в силовом поле адсорбента. Система атом-атомных потенциалов.

Молекулярно-статистическая теория адсорбции на адсорбентах с однородной плоской поверхностью. ГТС как модельный адсорбент для молекулярно-статистических расчетов. Общие принципы построения потенциальной функции межмолекулярного взаимодействия «адсорбат-адсорбент». Модель двумерного идеального газа Уравнение Лопаткина.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе обучения используются традиционные образовательные технологии (лекции, семинары, практические работы) и активные инновационные образовательные технологии:

1. Семинар в диалоговом режиме применяется в основном при обсуждении выступлений магистрантов с докладами (рефератами)
2. Групповой разбор результатов контрольных работ
3. Встречи с сотрудниками и руководителями профильных лабораторий и предприятий - потенциальными работодателями выпускников.

В целом при изучении курса активные и интерактивные формы проведения занятий составляют не менее 30% аудиторных занятий.

7. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

7.1. Перечень-учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Дмитриев А.В. Основы статистической физики материалов. М. Изд-во МГУ, 2004.
2. Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. Основы физической химии. Теория и задачи. М.: МГУ, 2005.
3. Ягодовский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. М.: БИНОМ, 2005.

Лекционные занятия проводятся 1 раз в неделю в объеме 1 часа и 1 час лабораторных занятий в 1 семестре. После окончания изучения каждой темы магистранты проходят тестирование, выполняют контрольные работы.

7.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 7.1.

Содержание самостоятельной работы обучающихся

№№ п/п	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
1.	Основные положения «Статистической термодинамики конденсированных систем»	6	собеседование
2.	Статистическая физика открытых систем	8	собеседование
3.	Применение методов статистической физики к задаче расчета термодинамических функций идеального газа	8	собеседование
4.	Проблема учета межмолекулярных взаимодействий в статистической термодинамике	8	собеседование
5.	Молекулярно-статистическое описание процесса адсорбции	8	собеседование

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Фонды оценочных средств и критерии оценки представлены отдельно, как приложение к рабочей программе.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература:

1. Дмитриев А.В. Основы статистической физики материалов. М. Изд-во МГУ, 2004.
2. Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. Основы физической химии. Теория и задачи. М.: МГУ, 2005.

3. Ягодовский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. М.: БИНОМ, 2005.
4. Физическая химия. В двух книгах. /Под ред. К.С. Краснова. М.: Высшая школа, 1995г., 2001. Строение вещества. Термодинамика.
5. Стромберг А.Г., Д.П. Семченко. Физическая химия. М.: Высшая школа, 1999г.
6. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, 1991г.
7. Кудряшов И.В., Каретников Г.С. Сборник примеров и задач по физической химии. М.: Высшая школа, 1991г.

б) дополнительная литература

1. Курс физической химии /под редакцией Герасимова Я.И., М.:Химия, 1969 (т.1), 1973 (т.2.0)
2. Авгуль Н.Н., Киселев А.В., Пошкус Д.П. Адсорбция газов и паров на однородных поверхностях. М.:Химия, 1975.
3. Гиббс Дж.В. Термодинамика и статистическая физика. М.: Наука, 1982.
4. Киселев А.В. Физическая химия. Современные проблемы /Под редакцией Я.М.Колотыркина. М.:Химия, 1982.
5. Кубо Р. Статистическая механика. М.:Мир, 1967.
6. Лопаткин А.А. Теоретические основы физической адсорбции. М.:Изд-во МГУ, 1982.
7. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.:Высшая школа, 1982.
8. Шиллинг Г. Статистическая физика в примерах. М.:Мир, 1976.

в) электронные источники информации

1. Научная электронная база данных издательства Elsevier, <http://www.sciencedirect.com/>
2. Научная электронная база данных издательства ACS Publication, <http://pubs.acs.org/>
3. Научно-поисковая электронная база данных Reaxys. <https://www.reaxys.com/>
4. Научная электронная база данных издательства Springer, <http://www.springerlink.com/>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Требования к аудитории для лекционных и практических занятий: бесшумная светлая аудитория на 25 посадочных мест с доской.

Требования к аудитории для лабораторных занятий: лаборатория 60-70 м² с вытяжкой, общим и местным (над шестью рабочими столами) освещением, канализацией (холодная и горячая вода).

Требования к специализированному оборудованию: вытяжной шкаф, химически стойкая раковина, шесть лабораторных столов со стойким покрытием, один стол преподавателя, двенадцать лабораторных стульев, доска, технические и аналитические весы.

Теоретический курс:

1. Лекции, презентации.
2. Контрольные тесты.

3. Список вопросов для проведения коллоквиумов.
4. Таблицы.
5. Варианты заданий для контрольных работ.
6. Набор реактивов и оборудования для лекционных опытов.

Лабораторный практикум:

1. Тематика и описание лабораторных работ (специально разработанный и изданный лабораторный практикум для студентов химического направления).
2. Набор химических реактивов к каждой лабораторной работе.
3. Лабораторные установки, оборудование.

Материальное обеспечение дисциплины

- Калориметр
- Рефрактометр УРЛ, УРЛ-15
- Установка для криоскопии
- Установка для термического анализа
- Модуль "Термостат"
- Аналитические весы
- Технические весы
- Лабораторная посуда