

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

А.Л. Толстик

08.06.2016
(дата утверждения)

Регистрационный № УД-2066 /уч.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

Учебная программа для специальности:

1-31 05 04 Фундаментальная химия

Минск
2016 г.

Учебная программа составлена на основе Образовательного стандарта высшего образования ОСВО 1-31 05 04-2013 «Фундаментальная химия» утвержденного и введенного в действие Постановлением Министерства образования РБ от 30.08.13 № 87 и учебного плана специальности G-31-147/уч 2013 г.

СОСТАВИТЕЛЬ:

Г. Я. Кабо, профессор кафедры физической химии, доктор химических наук, профессор.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой физической химии Белорусского государственного университета (протокол № 9 от 14 апреля 2016 г.);

Научно-методическим советом Белорусского государственного университета (протокол № 5 от 28 апреля 2016)



ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Учебная дисциплина «Статистическая термодинамика» предназначена для студентов химического факультета, обучающихся по специальности 1-31 05 04 «Фундаментальная химия и относится к циклу специальных дисциплин.

Целью освоения дисциплины «Статистическая термодинамика» является формирование у специалистов - химиков глубокого понимания зависимости между строением молекул и свойствами веществ. Одним из важнейших этапов решения этой задачи является изучение статистической термодинамики, которая определяет принципы описания свойств макроскопических систем на основе знания свойств микрочастиц, из которых состоят системы.

Статистическая термодинамика является одним из теоретических разделов физической химии, принадлежит к числу фундаментальных естественнонаучных дисциплин и поэтому является базисной дисциплиной современного химического образования. Методы статистической термодинамики позволяют также эффективно проводить теоретическую проработку технологических производства химических продуктов, в связи с чем знание основ статистической термодинамики необходимо не только в естественнонаучном, но и в прямом прикладном плане.

В ходе преподавания дисциплины излагаются принципы статистического описания макроскопических систем, демонстрируется продуктивность такого описания для понимания сущности равновесного состояния и необратимости при эволюции макроскопических систем. Рассматриваются методы статистического расчета термодинамических свойств на основе классического и квантового подхода к определению энергетических состояний молекул. Обсуждаются экспериментальные методы, позволяющие получать молекулярные данные для статистических расчетов. Анализируется практическое значение статистических расчетов для решения задач химической технологии, энергетики, а также для установления строения молекул.

В содержательную часть курса включены актуальные результаты исследований в области разработки и верификации методов расчета физико-химических свойств веществ, проводимых сотрудниками химического факультета БГУ. Дисциплина прямым образом связана с разделом «Химическая

термодинамика» общего курса «Физическая химия», необходима студентам 4 - го и 5-го курсов при выполнении курсовых и дипломных работ. Для изучения курса привлекаются знания и навыки, полученные студентами в ходе изучения дисциплин «Высшая математика» и «Физика».

В результате изучения дисциплины обучаемый должен

знать:

- основные постулаты статистической термодинамики;
- виды статистических ансамблей, основные соотношения между вероятностями;
- основы эволюции макроскопических систем;
- принципы статистического описания макроскопических систем;
- понятие статистической суммы и ее связь с термодинамическими функциями;
- экспериментальные методы исследования энергетических уровней молекул и определения молекулярных постоянных для статистических расчетов;
- уравнения состояния реальных газов;
- основы статистической термодинамики конденсированного состояния;

уметь:

- рассчитывать статистические суммы и термодинамические функции для модельных объектов: идеальных газов, жесткого ротатора, гармонического осциллятора;
- оценивать применимость классических приближений при расчете термодинамических свойств реальных газов и веществ в конденсированном состоянии;

владеть:

- теоретическим аппаратом статистической термодинамики;
- методикой расчета термодинамических свойств веществ по молекулярным и спектральным данным.

В результате изучения учебной дисциплины студент должен закрепить и развить следующие компетенции, предусмотренные образовательным стандартом высшего образования ОСВО 1-31 05 04-2013 «Фундаментальная химия»).

Академические компетенции:

АК-1. Уметь применять базовые научно-теоретические знания для решения теоретических и практических задач.

АК-2. Владеть системным и сравнительным анализом.

АК-3. Владеть исследовательскими навыками.

АК-4. Уметь работать самостоятельно.

АК-5. Быть способным порождать новые идеи (обладать креативностью).

АК-6. Владеть междисциплинарным подходом при решении проблем.

Социально-личностные компетенции:

СЛК-6. Уметь работать в команде.

Профессиональные компетенции в области научно-исследовательской деятельности:

ПК-1. Использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, анализировать перспективы и направления развития отдельных областей химической науки.

ПК-2. Принимать участие в научных исследованиях, связанных с совершенствованием и развитием химии, современных ее направлений и физико-химических методов исследования.

ПК-3. Формулировать цели и задачи научно-исследовательской деятельности, осуществлять ее планирование, принимать участие в подготовке отчетов и публикаций.

ПК-4. Применять методы прикладной квантовой химии, молекулярной динамики и математического моделирования для предсказания свойств химических систем и их поведения в химических процессах.

Профессиональные компетенции в области производственно-технологической деятельности:

ПК-5. Формулировать и решать задачи, возникающие в ходе производственно-технологической деятельности.

Профессиональные компетенции в области инновационной деятельности:

ПК-9. Работать с научной, технической и патентной литературой, электронными базами данных.

Преподавание курса предусматривает проведение лекций и практических занятий. При чтении лекционного курса необходимо применять наглядные материалы в виде таблиц, графиков, мелового рисунка, а также использовать технические средства обучения для демонстрации слайдов,

презентаций. Контроль самостоятельной работы студентов осуществляется в форме устного опроса, коллоквиумов, контрольных работ и при выполнении индивидуального задания. На семинарских и практических занятиях осваивается методика статистических расчетов термодинамических свойств веществ по молекулярным и спектральным данным. Индивидуальное задание включает в себя расчет термодинамических свойств индивидуального вещества.

Дисциплина преподается в 8 семестре четвертого курса. Общее количество часов для изучения дисциплины – 136, аудиторных 60 (лекции – 32, практические занятия – 26, УСП – 2).

Форма получения высшего образования – очная.

Форма текущей аттестации по учебной дисциплине – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Введение.

Понятие о макроскопических системах и макроскопических свойствах. Особенности различных способов описания макроскопических систем термодинамического, динамического (механического), статистического.

Основные задачи статистической термодинамики.

2. Некоторые понятия теории вероятности.

Статистические ансамбли. Основные соотношения между вероятностями (некоторые задачи комбинаторики). Среднее значение свойств по ансамблю. Распределение вероятностей и плотность вероятности. (Вероятностная трактовка эволюции макроскопических систем).

3. Эволюция макроскопических систем.

Вероятность состояния макроскопических систем. Понятие о термодинамической вероятности. Равновесие и свойства равновесного состояния макроскопических систем. Флуктуация макроскопических систем в состоянии равновесия. Понятие о необратимости. Парадоксы Лошмидта и Цермело. Конструктивная роль необратимых процессов в физическом мире.

4. Принципы статистического описания макроскопических систем.

Фазовое пространство и его свойства - теорема Лиувилля, эргодическая гипотеза. Объем ячеек фазового пространства в классической и квантовой статистике. Определение термодинамической вероятности по методу Больцмана, e -теорема Больцмана. Больцмановская формулировка второго начала термодинамики. Метод Гиббса. Ансамбли систем в $6N$ - мерном фазовом пространстве. Понятие о сумме состояний. Классическая и квантовая статистики.

5. Суммы состояний по энергетическим уровням идеального газа.

О независимости видов движения молекул. Модель жесткий ротатор - гармонический осциллятор. Суммы состояний и вклады в термодинамические функции поступательного движения. Суммы состояний и вклады в термодинамические функции вращательного движения молекул. Суммы состояний и вклады колебательного движения в термодинамические функции. Суммы состояний и вклады в термодинамические функции внутреннего вращения и конформационных переходов. Электронные составляющие термодинамических функций.

6. Экспериментальное исследование уровней энергии молекул и определение молекулярных постоянных для статистических расчетов.

Экспериментальные методы определения геометрии и моментов инерции молекул. Определение групп симметрии и чисел симметрии молекул.

Колебательные спектры молекул и отнесение частот колебаний. Исследование внутреннего вращения конформационных переходов молекул. Приведенные моменты инерции и потенциальные барьеры конформационных переходов.

7. Реальные газы.

Межмолекулярные взаимодействия в реальном газе. Уравнение состояния реального газа с вириальными коэффициентами. Конфигурационный интеграл, групповое разложение, вычисление второго вириального коэффициента.

8. Статистическая термодинамика конденсированного состояния веществ.

Жидкое состояние, модели жидкостей. Выражение термодинамических свойств жидкостей через функции распределения. Твердое состояние вещества. Теории теплоемкости твердых тел Эйнштейна и Дебая. Элементы статистической теории дефектов в кристаллах.

9. Практика статистических расчетов термодинамических свойств веществ.

Практическое значение статистических расчетов термодинамических свойств веществ. Экспериментальные исследования и статистические расчеты термодинамических свойств веществ. Значение статистических расчетов термодинамических свойств веществ для установления строения молекул. Методика статистических расчетов термодинамических свойств. Определение чисел симметрии молекул. Расчет моментов инерции. Допущения в расчетах и оценка погрешности рассчитанных величин.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Введение	4	4					
1.1	Понятие о макроскопических системах и макроскопических свойствах.	2	2					Устный опрос
1.2	Особенности различных способов описания макроскопических систем термодинамического, динамического (механического), статистического. Основные задачи статистической термодинамики.	2	2					Устный опрос
2	Некоторые понятия теории вероятности	4	2					
2.1	Статистические ансамбли. Основные соотношения между вероятностями (некоторые задачи комбинаторики). Среднее значение свойств по ансамблю.	2	1					Устный опрос, коллоквиум
2.2	Распределение вероятностей и плотность вероятности. (Вероятностная трактовка эволюции макроскопических систем).	2	1					Устный опрос, коллоквиум
3.	Эволюция макроскопических	4	4					

	систем							
3.1	Вероятность состояния макроскопических систем. Понятие о термодинамической вероятности. Равновесие и свойства равновесного состояния макроскопических систем. Флуктуация макроскопических систем в состоянии равновесия.	2	2					Устный опрос, коллоквиум
3.2	Понятие о необратимости. Парадоксы Лошмидта и Цермело. Конструктивная роль необратимых процессов в физическом мире.	2	2					Устный опрос, коллоквиум
4	Принципы статистического описания макроскопических систем.	4	4					Устный опрос
4.1	Фазовое пространство и его свойства - теорема Лиувилля, эргодическая гипотеза. Объем ячеек фазового пространства в классической и квантовой статистике. Определение термодинамической вероятности по методу Больцмана, е-теорема Больцмана. Больцмановская формулировка второго начала термодинамики.	2	2					Устный опрос
4.2.	Метод Гиббса. Ансамбли систем в $6N$ - мерном фазовом пространстве. Понятие о сумме состояний. Классическая и квантовая статистики.	2	2					Устный опрос
5	Суммы состояний по	4	4				1	

	энергетическим уровням идеального газа.							
5.1	О независимости видов движения молекул. Модель жесткий ротатор - гармонический осциллятор. Суммы состояний и вклады в термодинамические функции поступательного движения. Суммы состояний и вклады в термодинамические функции вращательного движения молекул.	2	2				0.5	контрольная работа
5.2	Суммы состояний и вклады колебательного движения в термодинамические функции. Суммы состояний и вклады в термодинамические функции внутреннего вращения и конформационных переходов. Электронные составляющие термодинамических функций.	2	2				0.5	контрольная работа
6	Экспериментальное исследование уровней энергии молекул и определение молекулярных постоянных для статистических расчетов.	2	1					Устный опрос
7.	Реальные газы	2	1					Устный опрос
8.	Статистическая термодинамика конденсированного состояния веществ.	4	2					
8.1	Жидкое состояние, модели жидкостей. Выражение термодинамических	2	1					Устный опрос

	свойств жидкостей через функции распределения.							
8.2	Твердое состояние вещества. Теории теплоемкости твердых тел Эйнштейна и Дебая. Элементы статистической теории дефектов в кристаллах.	2	1					Устный опрос
9.	Практика статистических расчетов термодинамических свойств веществ.	4	4				1	
9.1	Практическое значение статистических расчетов термодинамических свойств веществ. Экспериментальные исследования и статистические расчеты термодинамических свойств веществ. Значение статистических расчетов термодинамических свойств веществ для установления строения молекул.	2	2				0.5	контрольная работа
9.2	Методика статистических расчетов термодинамических свойств. Определение чисел симметрии молекул. Расчет моментов инерции. Допущения в расчетах и оценка погрешности рассчитанных величин.	2	2				0.5	контрольная работа
	Итого	32	26				2	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Рекомендуемая учебная литература

Основная:

1. Рейф Ф. Статистическая физика., М., Наука, 1986.
 2. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии, М., ВШ, 1982.
- Кузнецова Е.М., Обрезкова М.В. Физическая химия. ч.1. Статистическая термодинамика идеального газа. М.: изд-во МГУ, 2002 г.

Дополнительная:

1. Годнев И.Н. Вычисление термодинамических функций по молекулярным и спектральным данным., М., ГИТТЛ, 1956.
2. Кабо Г.Я., Роганов Г.Н., Френкель М.Л. Термодинамика и равновесия изомеров., Минск, изд-во "Университетское", 1987.
3. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии., М., ВШ, 1987.
4. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебания молекул., М., Наука, 1970.

ПЕРЕЧЕНЬ ЗАДАНИЙ УПРАВЛЯЕМОЙ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Темы: № 5 «Суммы состояний по энергетическим уровням идеального газа», № 9 «Практика статистических расчетов термодинамических свойств веществ»

Задание: Расчет термодинамических свойств индивидуального вещества по молекулярным и спектральным данным.

Перечень средств диагностики:

Контрольная работа.

ПЕРЕЧЕНЬ ИСПОЛЬЗУЕМЫХ СРЕДСТВ ДИАГНОСТИКИ

1. Устный опрос в формате вопрос – ответ по темам № 1 «Введение», № 4 «Принципы статистического описания макроскопических систем», № 6 «Экспериментальное исследование уровней энергии молекул и определение молекулярных постоянных для статистических расчетов», № 7 «Реальные газы», № 8 «Статистическая термодинамика конденсированного состояния»

2. Коллоквиум по темам № 2 «Некоторые понятия теории вероятности», № 3 «Эволюция макроскопических систем».

3. Контрольная работы по темам № 5 «Суммы состояний по энергетическим уровням идеального газа» и № 9 «Практика статистических расчетов термодинамических свойств веществ».

4. Устный экзамен по дисциплине.

ТЕМАТИКА ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

Сложение и умножение вероятностей. Свойства биномиального распределения вероятностей. Оценка величин флуктуации макроскопических свойств. Вероятность состояний модельных систем.

Принципы комбинаторики Больцмана, статистики Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака (расчеты термодинамической вероятности состояний модельных систем).

Расчет числа ячеек фазового пространства для идеального одноатомного газа. Нахождение пределов применимости классического приближения при расчете сумм (интегралов) состояний.

Расчет термодинамических свойств идеального одноатомного газа.

Вклады в термодинамические функции вращательного движения молекул. Расчет главных, центральных моментов инерции молекул по структурным данным. Определение групп и чисел симметрии молекул. Оценка пределов применимости классического приближения при расчете вкладов вращательного движения в термодинамические функции. Расчет вращательных вкладов в термодинамические функции многоатомных молекул. Определение главных моментов инерции молекул по вращательным спектрам.

Оценка применимости классического приближения при расчете колебательных вкладов в термодинамические функции.

Методы расчета вкладов внутреннего вращения в термодинамические свойства газов. Расчет вкладов в термодинамические функции, обусловленных конформационными и таутомерными превращениями.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Физическая химия	Кафедра физической химии	Нет изменений	Вносить изменения не требуется. Протокол № 9 от 14.04.2016 г.

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УВО

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры физической химии Белорусского государственного университета (протокол № ____ от _____ г.)

Заведующий кафедрой

Доктор химических наук,

Профессор

(ученая степень, ученое звание)

(подпись)

В.В. Паньков

(И.О. Фамилия)

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета

Доктор химических наук,

Член-корр. НАН Беларуси

(ученая степень, ученое звание)

(подпись)

Д.В. Свиридов

(И.О. Фамилия)