

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи



Павленко В.О.

« 8 » травня 2019 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

СТАТИСТИЧНА ТЕРМОДИНАМІКА

для студентів

галузь знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **Бакалавр**
освітня програма **Хімія**

Вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2019 – 2020**
Семестр **VI**
(програми підготовки за ОР «бакалавр»)
Кількість кредитів **4**
Мова викладання, навчання
та оцінювання **українська**
Форма заключного
контролю **іспит**

Викладач: доц. Усенко Н.І.

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.


на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2019

Розробники:

Усенко Наталія Ігорівна, доц., к.х.н., доц.

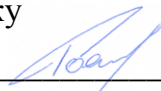
ЗАТВЕРДЖЕНО
Зав.кафедри фізичної хімії

 (Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від «9» квітня 2019 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол №4 від «08» травня 2019 року

Голова науково-методичної комісії _____  (Роїк О.С.)
«08» травня 2019 року

Протокол № від « » 2020 року

Голова науково-методичної комісії _____ (Роїк О.С.)

1. Мета дисципліни – засвоєння студентами системи теоретичних уявлень стосовно основних законів статистичної термодинаміки, які визначають термодинамічні властивості хімічних речовин, та отримання практичних умінь в галузі розрахунку термодинамічних властивостей речовин методами статистичної термодинаміки.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни

Володіти базовими знаннями університетських курсів фізики, математики, статистичних методів в хімії (теорія імовірностей), а також основ фізичної хімії на рівні бакалаврату.

3. Анотація навчальної дисципліни

Курс “Статистична термодинаміка” побудований таким чином, щоб студенти детально розібралися із обчисленням термодинамічних функцій речовин на основі знань про їх молекулярну будову. В курсі викладено основні методи статистичної термодинаміки – метод Больцмана, метод Гіббса, квантові статистики Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака, а також застосування цих методів до різних фізико-хімічних об’єктів. Термодинамічні властивості ідеального газу, реального газу, рідин, кристалічних твердих тіл розглядаються на основі статистики Гіббса. Розуміння зв’язку між статистичними обрахунками термодинамічних властивостей речовин та їх будовою, розуміння основних принципів проведення статистико-термодинамічних розрахунків є важливим етапом формування цілісної системи поглядів на будову речовини та взаємозв’язок її із конкретними властивостями речовин. Саме формування такої системи є однією з передумов успішного проведення всебічних фізико-хімічних досліджень речовин на сучасному рівні, з використанням різноманітних спектроскопічних та рентгенівських методів, а також вміння робити відповідні висновки з цих досліджень.

4. Завдання (навчальні цілі):

- сформувати у студентів уявлення про загальні принципи проведення статистичного обчислення термодинамічних функцій різних систем, про основні види функцій розподілу систем у фазовому просторі;
- навчити обраховувати та аналізувати заселеності різних енергетичних рівнів молекул ідеальних газів, та аналізувати їх вплив на термодинамічні властивості ідеальних газів, а також практично використовувати отримані знання стосовно розподілів Максвелла–Больцмана при проведенні фізико-хімічних досліджень термодинамічних та кінетичних властивостей систем у газовому стані;
- навчити студентів практично розраховувати термодинамічні властивості різноманітних газів, обумовлені різними видами руху, а також константи рівноваги хімічних реакцій за участю газів;
- розвинути уявлення про фізико-хімічні властивості квантових газів (вільних електронів у металах, бозонів при низьких температурах);
- розвинути уявлення про зв’язок між потенціалом міжмолекулярної взаємодії та рівнянням стану реальної системи та навчити студентів практично розраховувати рівняння стану, зокрема реальних газів, використовуючи найпростіші модельні потенціали міжмолекулярної взаємодії;
- сформувати розвинуту систему уявлень про розрахунки термодинамічних властивостей рідин та рідких розчинів;
- надати уявлення про взаємозв’язок між термодинамічними властивостями рідини та її структурою, а також про зв’язок бінарних корелятивних функцій розподілу, виражених методами статистичної термодинаміки, із функцією радіального розподілу атомів, що визначається експериментально у рентгенографічних дослідженнях рідин;

- сформувати розвинуту систему уявлень про розрахунки термодинамічних властивостей твердих тіл та про їх зв'язок з електронною будовою та структурою твердих тіл.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1. знати; 2, вміти; 3, комунікація; 4, автономність та відповідальність)		Форма викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час практичних робіт ПтК-1 та контроль самостійної роботи ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результати навчання			
1. Знання				
1.1	Знати основні методи статистичної термодинаміки (Больцмана, Гіббса, квантові статистики).	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.2	Знати принципи інтерпретації термодинамічних функцій на основі статистики Гіббса.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
1.3	Знати принципи обчислення молекулярних статистичних сум та термодинамічних властивостей ідеальних газів, обумовлених різними видами руху.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
1.4	Знати особливості врахування міжмолекулярної взаємодії при обчисленні статистичних сум реальних систем.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	8
1.5	Знати принципи знаходження бінарної корелятивної функції розподілу для простих рідин та принципи обчислення термодинамічних функцій рідин з використанням цієї функції.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
1.6	Знати принципи статистичного розрахунку теплоємності, внутрішньої енергії та ентропії твердих тіл	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	7
2. Уміння				
2.1	Вміти проводити розрахунки заселеності енергетичних рівнів, середніх значень енергії молекул та аналізувати зміну цих величин з температурою	Практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
2.2	Вміти вирішувати різноманітні практично важливі для фізичної	Практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5

	хімії задачі з використанням розподілів Максвелла за імпульсами, швидкостями та енергіями для систем з різною кількістю ступенів вільності			
2.3	Вміти обчислювати статистичні суми, обумовлені різними видами руху, та відповідні їм внески в термодинамічні властивості ідеальних газів при різних умовах та константи рівноваги газових реакцій.	Практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	15
2.4	Вміти виводити та аналізувати вирази для парних потенціалів міжмолекулярної взаємодії в реальних газах.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
2.5	Вміти виводити рівняння стану та термодинамічні властивості реальних газів, базуючись на вигляді парних потенціалів взаємодії.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
2.6	Вміти пояснювати зв'язок між будовою твердих речовин, температурою Дебая та теплоємністю твердих тіл.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі фізико-хімічного матеріалознавства	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5

7. Схема формування оцінки

Оцінка за дисципліну = Σ балів змістових модулів + бали за письмовий екзамен

7.1. Форми оцінювання студентів:

– семестрове оцінювання

1. групові письмові тематичні контрольні роботи (2) – 38 балів (ПТК)
2. обов'язкові розрахункові практичні роботи (7) – 14 балів (РПР)
3. домашні самостійні роботи (2) – 5 бали (ДСР)
4. активність під час аудиторних занять – 3 бали (УО)

– підсумкове оцінювання – письмовий екзамен – 40 балів (ПЕ)

– умови допуску до підсумкового екзамену: сумарна кількість балів за формами поточного контролю не менше **36**.

7.2. Організація оцінювання:

		Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2
Модульна контрольна робота	<i>Мінімум</i>	12	12
	Максимум	19	19
Практична розрахункова робота 1	<i>Мінімум</i>	1	1
	Максимум	2	2
Практична розрахункова робота 2	<i>Мінімум</i>	1	1
	Максимум	2	2
Практична розрахункова робота 3	<i>Мінімум</i>	1	1
	Максимум	2	2
Практична розрахункова робота 4	<i>Мінімум</i>		1
	Максимум		2
Виконання домашньої самостійної роботи	<i>Мінімум</i>	1	1
	Максимум	3	2
Усні опитування		3	

До іспиту може бути допущений студент, **який виконав усі обов'язкові види робіт**, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Статистична термодинаміка" (а саме, написання модульних контрольних робіт, виконання 5 практичних розрахункових задач) **і при цьому** за результатами модульно-рейтингового контролю **отримав** за два змістові модулі сумарну **оцінку в балах не менше 36 балів**.

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно **меншу** кількість балів ніж **критично-розрахунковий мінімум** для допуску до іспиту допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання колоквиуму чи МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / колоквиуму / МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Відмінно/Excellent	90-100
Добре/Good	75-89
Задовільно/Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

**СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ**

№	Назва теми	Кількість годин		
		Лекції	Практ.	Сам. роб.
Змістовий модуль 1. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ І МЕТОДИ СТАТИСТИЧНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ				
1	Предмет статистичної термодинаміки. Теорія імовірностей – математичний апарат статистичної термодинаміки	1	1	5
2	Основні поняття і постулати статистичної термодинаміки.	1		5
3	Статистичний метод Больцмана	3	2	4
4	Розподіл Максвелла за швидкостями, імпульсами, енергіями для молекул ідеального газу	3	2	7
5	Метод Гіббса	3		4
6	Квантові статистики ідеального газу Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака. Властивості газів Бозе та Фермі.	3	2	4
7	Інтерпретація термодинаміки на основі статистичної фізики	3		3
Усього за модулем		17	7	32
Змістовий модуль 2. СТАТИСТИЧНА ТЕРМОДИНАМІКА ГАЗІВ, РІДИН І ТВЕРДИХ ТІЛ				
8	Термодинамічних функцій ідеального газу. Молекулярна статистична сума	2		4
9	Молекулярні статистичні суми ідеального газу для різних видів руху	8	3	4
10	Статистичний розрахунок констант рівноваги, що перебігають в газовій фазі. Статистико-термодинамічні аспекти теорії активного комплексу.	1	1	4
11	Реальний газ, модельні потенціали взаємодії	2		4
12	Конфігураційний інтеграл реального газу, врахування міжмолекулярної взаємодії. Метод Майера для обчислення конфігураційного інтегралу. Поняття про групові інтеграли, їх зв'язок з рівняннями стану.	2	1	4
13	Статистичне обчислення термодинамічних функцій реальних газів з використанням різних модельних потенціалів	2	1	4
14	Суми станів коливального руху і термодинамічні властивості ідеальних кристалічних тіл	2	1	4
15	Статистична термодинаміка рідин. Корелятивні функції розподілу, методи їх знаходження. Статистичні теорії реальних розчинів неелектролітів	4		6
Усього за модулем		23	7	34
Іспит				
Усього за дисципліною		40	14	66

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекцій – 40 год.

Практичні заняття - 14 год

Консультації – за вимогою студентів, але не менше ніж 1 раз на 2 тижні

Самостійна робота - 66 год.

Література

Основна

1. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. – М., Высшая школа, 1998.
2. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. – М., Высшая школа, 1991.
3. Еремин В.Н. Основы химической термодинамики. – М., Высшая школа, 1978.
4. Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А. и др. Задачи по физической химии. – М.: Экзамен, 2003. – 318 с.
5. Усенко Н.І., Роїк О.С. Статистична термодинаміка ідеального газу. Теорія і задачі. – К.:Логос, 2007. – 52 с.
6. Усенко Н.І. Основні поняття і методи статистичної термодинаміки. – К.: ВПЦ „Київський університет”, 2005. – 55 с.
7. Усенко Н.І. Статистичний розрахунок властивостей реальних газів. – К.:Логос, 2007. – 24 с.

Додаткова

8. Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2005. – 495 с.
9. Никольский Б.П. Физическая химия. – Л.: Химия, 1987. – 880 с.
10. Радужкевич Л.В. Курс статистической физики. – М.: Просвещение, 1966. – 420 с.
11. Кубо Р. Статистическая механика. – М.: Мир, 1967. – 452 с.
12. Шиллинг Г. Статистическая физика в примерах. – М.: Мир, 1976. – 432 с.
13. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1977. – 337 с.