

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет  
им. Н.И. Лобачевского»

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением Ученого совета ННГУ

протокол от

31 августа 2021 г. № 11

Рабочая программа дисциплины  
**Основы статистической термодинамики**

Направление подготовки  
**04.06.01 «Химические науки»**

Направленность подготовки  
**02.00.04 «Физическая химия»**

Квалификация выпускника  
***Исследователь. Преподаватель-исследователь***

Форма обучения  
**Очная**

---

Нижний Новгород  
2021

## 1. Место дисциплины (модуля) в структуре основной образовательной программы (ООП)

Дисциплина «Основы статистической термодинамики» относится к числу общепрофессиональных дисциплин и изучается на 2 году обучения, в 4 семестре.

Данная дисциплина находится в логической и содержательно-методической взаимосвязи с курсами физики, физической химии, квантовой химии.

Для успешного освоения дисциплины аспирант должен:

- знать основные понятия, постулаты и теоремы статистической физики;
- знать статистическое обоснование второго начала термодинамики и физический смысл энтропии;
- знать статистический вывод теорий теплоемкости;
- владеть навыками расчёта термодинамических функций для идеального газа по статистическим суммам по состояниям;
- уметь рассчитывать константы равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики и сопоставлять статистический и классический термодинамические расчеты;
- иметь представление о статистических теориях реальных систем: реальных газов, твердых тел, жидкостей и растворов.

Изучение дисциплины «Основы статистической термодинамики» как предшествующей составляет основу дальнейшей подготовки аспиранта к сдаче кандидатского экзамена по специальности.

## 2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ООП (компетенциями выпускников)

**Таблица 1**

### Планируемые результаты обучения по дисциплине

Код формируемой компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций
ОПК-1 базовый	<i>З1 Знать:</i> современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности. <i>У1 Уметь:</i> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования. <i>В1 Владеть:</i> навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований. <i>В2 Владеть:</i> навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов. <i>В3 Владеть:</i> навыками представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности.

ПК-1 базовый	<p>З1 Знать: перспективы и проблемы развития химии; фундаментальные основы химии, а также наук о материалах.</p> <p>З2 Знать: приоритетные направления научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации.</p> <p>У1 Уметь: прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной тем.</p> <p>У2 Уметь: проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки.</p> <p>В1 Владеть: навыками организации самостоятельной научно-исследовательской работы в научно-исследовательской организации.</p> <p>В2 Владеть: навыками взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях.</p>
--------------	--

### 3. Структура и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 1 зачетная единица, всего 36 часов (18 часов лекции, 18 часов самостоятельная работа обучающегося)

#### Структура дисциплины

Наименование раздела дисциплины	Всего, часов	В том числе					Самостоятельная работа обучающегося, часов
		Контактная работа, часов					
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Консультации	Всего	
Основные постулаты статистической физики. Функции распределения. Ансамбли Гиббса	8	4	-	-	-	4	4
Энтропия в классической термодинамике и статистике	8	4	-	-	-	4	4
Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью термодинамических функций. Теорема равнораспределения и область ее применимости. Вывод теорий теплоемкостей. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики	8	4	-	-	-	4	4
Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем	8	6	-	-	-	6	6
Аттестация по дисциплине: зачет							

Итого	36	18	-	-	-	18	18
-------	----	----	---	---	---	----	----

**Таблица 3**

**Содержание дисциплины**

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Форма проведения занятия	Форма текущего контроля*
1.	Основные постулаты статистической физики. Функции распределения. Ансамбли Гиббса	Фазовые Г- и $\mu$ -пространства. Фазовые траектории. Закон распределения Максвелла – Больцмана (метод ячеек). Плотность вероятности в фазовом пространстве. Микроканонический и канонический ансамбли Гиббса. Функции распределения в статистике (Максвелла-Больцмана, Бозе-Эйнштейна, Ферми-Дирака, Гиббса). Каноническая функция распределения Гиббса. Метод наибольшего слагаемого при расчете суммы по состояниям	Лекции, самостоятельная работа обучающегося	зачет
2.	Энтропия в классической термодинамике и статистике	Энтропия в классической термодинамике и статистике. Формула Больцмана для энтропии (вывод). Постулат Планка и абсолютная энтропия	Лекции, самостоятельная работа обучающегося	зачет
3.	Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью термодинамических функций. Теорема равнораспределения и область ее применимости. Вывод теорий теплоемкостей. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической	Поступательная сумма по состояниям и поступательные составляющие термодинамических функций (энтропии, внутренней энергии и теплоемкости). Формула Закура – Тетроде для энтропии идеального газа. Теорема	Лекции, самостоятельная работа обучающегося	зачет

	термодинамики	<p>равнораспределения и область ее применимости.</p> <p>Применение к теории теплоемкостей.</p> <p>Колебательная сумма по состояниям для гармонического осциллятора.</p> <p>Составляющие внутренней энергии, теплоемкости и энтропии, обусловленные колебательным движением.</p> <p>«Замороженные» колебательные степени свободы и их свойства.</p> <p>Теории теплоемкостей Эйнштейна и Дебая (с выводом).</p> <p>Вращательная сумма по состояниям. Вклады вращательного движения в термодинамические функции (внутреннюю энергию, теплоемкость, энтропию) на примере модели жесткого ротатора.</p> <p>Электронная и ядерная суммы по состояниям.</p> <p>Электронная составляющая теплоемкости атомарного хлора.</p> <p>Сопоставление статистического и классического термодинамического расчетов</p>		
4.	Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая	Конфигурационный интеграл для реального	Лекции, самостоятельная работа	зачет

	термодинамика реальных систем	газа. Метод Урселла-Майер. Статистическое рассмотрение вириального уравнения (без вывода). Метод ячеек в статистической термодинамике жидкостей. Статистическое описание идеальных и неидеальных растворов (без вывода). Точечные дефекты кристаллических решеток. Вакансии. Междоузельные частицы. Равновесные и неравновесные дефекты решеток. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание	обучающегося	
--	-------------------------------	---	--------------	--

*\* В рамках занятий семинарского типа, групповых или индивидуальных консультаций может осуществляться текущий контроль успеваемости*

#### **4. Образовательные технологии**

Для достижения планируемых результатов обучения, в дисциплине используются различные образовательные технологии:

информационно-развивающие технологии (самостоятельное изучение литературы, применение новых информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая использование технических и электронных средств информации);

деятельностные практико-ориентированные технологии (анализ, сравнение методов проведения химических и физико-химических исследований, выбор метода, в зависимости от объекта исследования в конкретной ситуации и его практическая реализация);

развивающие проблемно-ориентированные технологии (учебные дискуссии, коллективная мыслительная деятельность, решение задач повышенной сложности).

Лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей и проекционного оборудования.

## 5. **Формы организации и контроля самостоятельной работы обучающихся**

Целью самостоятельной работы является овладение навыками работы с литературой (в читальном зале библиотеки, с доступом к ресурсам Интернет), более углубленное изучение отдельных разделов дисциплины при выполнении индивидуальных заданий. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия.

Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме контроля самостоятельной работы (защита реферата).

Итоговый контроль проводится в виде зачета.

Контрольные вопросы к зачету:

1. Основные постулаты статистической физики. Функции распределения. Ансамбли Гиббса.
2. Энтропия в классической термодинамике и статистике.
3. Статистическое обоснование II начала.
4. Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью термодинамических функций.
5. Суммы по состояниям и их составляющие. Теорема равнораспределения и область ее применимости.
6. Статистический вывод теорий теплоемкостей Эйнштейна и Дебая.
7. Примеры расчета констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики; сопоставление с классическим расчетом методом потенциалов.
8. Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем.
9. Статистическая термодинамика реальных газов и реальных растворов. Уравнения с вириальными коэффициентами.
10. Статистическая термодинамика дефектных кристаллов.

## 6. **Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине**

### **6.1. *Перечень компетенций выпускников образовательной программы с указанием результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы их формирования***

Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования приведен в приложении 1.

### **6.2. *Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине. Описание шкал оценивания***

Уровень освоения учебной дисциплины обучающимися определяется следующими оценками: «зачтено», «не зачтено».

Оценка «зачтено» предполагает:

- хорошее знание основных терминов и понятий курса;
- последовательное изложение материала;
- умение формулировать некоторые обобщения по теме вопросов;

- достаточно полные ответы на вопросы при сдаче зачета;
- умение использовать фундаментальные понятия из базовых естественнонаучных и общепрофессиональных дисциплин при ответе на зачете.
- оценка «не зачтено» предполагает:
- неудовлетворительное знание основных терминов и понятий курса;
- отсутствие логики и последовательности в изложении материала;
- неумение формулировать отдельные выводы и обобщения по теме вопросов;
- неумение использовать фундаментальные понятия из базовых естественнонаучных и общепрофессиональных дисциплин при ответах на зачете.

**6.3. Примеры типовых контрольных заданий или иных материалов, необходимых для оценки результатов обучения, характеризующих сформированность компетенций.**

Уровни освоения дисциплины оцениваются согласно требованиям, изложенным в паспорте каждой из указанных компетенций, где указаны критерии оценивания результатов обучения и Планируемые результаты обучения.

Контрольные вопросы к зачету:

1. Основные постулаты статистической физики. Функции распределения. Ансамбли Гиббса (ОПК-1).
2. Энтропия в классической термодинамике и статистике (ОПК-1).
3. Статистическое обоснование II начала (ОПК-1).
4. Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью термодинамических функций (ОПК-1).
5. Суммы по состояниям и их составляющие. Теорема равнораспределения и область ее применимости (ОПК-1).
6. Статистический вывод теорий теплоемкостей Эйнштейна и Дебая (ОПК-1).
7. Примеры расчета констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики; сопоставление с классическим расчетом методом потенциалов (ПК-1).
8. Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем (ПК-1).
9. Статистическая термодинамика реальных газов и реальных растворов. Уравнения с вириальными коэффициентами (ПК-1).
10. Статистическая термодинамика дефектных кристаллов (ПК-1).

**7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)**

а) основная литература:

1. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. – М.: Высшая школа, 1973. – 480 с.
2. Борщевский А.Я. Физическая химия. Том 2. Статистическая термодинамика. – М.: ИНФРА-М, 2017. – 383 с. [Электронный ресурс]: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=543170>.
3. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1977. – 336 с.

б) дополнительная литература:

1. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. – М.: Высшая школа, 1991. – 318 с.

2. Ландау Л., Лифшиц Е. Статистическая физика. (Классическая и квантовая). – М.; Л.: Гостехиздат, 1951. – 480 с.

3. Еремин Е.Н. Основы химической термодинамики. – М.: Высшая школа, 1978. – 391 с.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. <http://webbook.nist.gov>;

2. <http://www.chem.msu.ru>

#### **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)**

- помещения для проведения занятий: лекционного типа, семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования и помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ННГУ;
- материально-техническое обеспечение, необходимое для реализации дисциплины, включая лабораторное оборудование;
- лицензионное программное обеспечение: *Windows, Microsoft Office*

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (уровень подготовки кадров высшей квалификации).

Автор

Д.х.н., профессор \_\_\_\_\_ Маркин А.В.

Рецензент \_\_\_\_\_ Князев А.В.

Заведующий кафедрой физической химии  
химического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского \_\_\_\_\_ Маркин А.В.

Программа рекомендована на заседании кафедры физической химии «\_\_» \_\_\_\_\_  
2021 г. протокол № \_\_\_\_.

Программа одобрена на заседании Методической комиссии химического факультета от 27  
августа 2021, протокол № 1.

## Карты компетенций, в формировании которой участвует дисциплина

Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения				
	1	2	3	4	5
<b>ОПК 1</b>					
ЗНАТЬ: современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	В целом успешные, но не систематические представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	Сформированные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности
УМЕТЬ: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Фрагментарное использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но не систематическое использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	Сформированное умение выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи
ВЛАДЕТЬ: навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	В целом успешное, но не систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	Успешное и систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации

ВЛАДЕТЬ: навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	В целом успешное, но не систематическое применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов	Успешное и систематическое применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов
ВЛАДЕТЬ: навыками представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	В целом успешное, но не систематическое применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности	Успешное и систематическое применение навыков представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности
<b>ПК 1</b>					
ЗНАТЬ: перспективы и проблемы развития химии; фундаментальные основы химии, а также наук о материалах	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах	Неполные знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах	Сформулированные, но содержащие отдельные пробелы знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах	Полные и систематические знания о перспективах и проблемах развития химии; фундаментальных основах химии, а также наук о материалах
ЗНАТЬ: приоритетные направления научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития науки, технологий	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития	Неполные знания о знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также приоритетные направления развития	Сформулированные, но содержащие отдельные проблемы знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также	Полные и систематические знания о приоритетных направлениях научных исследований в организации, а также приоритетные

и техники в Российской Федерации		науки, технологий и техники в Российской Федерации	науки, технологий и техники в Российской Федерации	приоритетные направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации	направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации
УМЕТЬ: прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	Отсутствие умений	Частично освоенное умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	В целом успешное, но не систематическое умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме	Успешное и систематическое умение прогнозировать социальные последствия действия химических производств, составлять план работы по заданной теме
УМЕТЬ: проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	Отсутствие умений	Частично освоенное умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	В целом успешное, но не систематическое умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки	Успешное и систематическое умение проводить исследования по согласованному с руководителем плану, решать типовые задачи по выбранной направленности подготовки
ВЛАДЕТЬ: навыками организации самостоятельной научно-исследовательской работы в научно-	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков организации самостоятельной научно-исследовательской	В целом успешное, но не систематическое применение навыков организации самостоятельной научно-	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы применение навыков организации самостоятельной научно-	В целом успешное и систематическое применение навыков организации самостоятельной научно-исследовательской работы

исследовательской организации		работы в научно-исследовательской организации	исследовательской работы в научно-исследовательской организации	исследовательской работы в научно-исследовательской организации	в научно-исследовательской организации
ВЛАДЕТЬ: навыками взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	В целом успешное, но не систематическое применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях	В целом успешное и систематическое применение навыков взаимодействия с учеными и научными группами, проводящими исследования в аналогичных направлениях