

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского»

ИНСТИТУТ ХИМИИ

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебно-методической
работе, д-р филол. наук, профессор

Е.Г. Елина

2016 г.



Рабочая программа дисциплины

**МЕТОДЫ НЕРАВНОВЕСНОЙ И СТАТИСТИЧЕСКОЙ
ТЕРМОДИНАМИКИ В ХИМИИ**

Направление подготовки кадров высшей квалификации
04.06.01 Химические науки

Направленность
«Электрохимия»

Квалификация выпускника
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения
Очная

Саратов
2016

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цель дисциплины

Сформировать у слушателей общее представление о наиболее значимых результатах, полученных в неравновесной статистической термодинамике. Дать представление о возможностях их использования для решения актуальных проблем химии и практических приложений

Задачи: параллельное изучение классических подходов и методов, применяемых вблизи равновесного состояния, и новых подходов термодинамики с последующим их сопоставлением и анализом

2. Место дисциплины в структуре ООП аспирантуры

Дисциплина «Методы неравновесной и статистической термодинамики в химии» является обязательной, входит в состав Блока 1 «Дисциплины (модули)» и относится к вариативной части ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, направленность – «Электрохимия» Б1.В.ОД.2.1.

Дисциплина «Методы неравновесной и статистической термодинамики в химии» изучается в 3 семестре.

Входные знания, умения и компетенции, необходимые для изучения данного курса, формируются в процессе изучения таких дисциплин, как: «Информационные ресурсы и базы данных». Взаимосвязь курса с другими дисциплинами ООП способствует углубленной подготовке аспирантов к решению специальных практических профессиональных задач и формированию необходимых компетенций.

3. Результаты обучения, определенные в картах компетенций и формируемые по итогам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины «Методы неравновесной и статистической термодинамики в химии» направлен на формирование следующих компетенций:

- умение прогнозировать конечный результат исследования при выполнении профессиональных функций, опираясь на фундаментальные основы химии, накопленный экспериментальный опыт в избранной области, современные наукоемкие технологии и аппаратурный парк (ПК-1).

В результате освоения дисциплины аспирант должен:

- **знать** современное состояние неравновесной и статистической термодинамики;
- **уметь** решать задачи по лекционному материалу;
- **владеть** основами методов неравновесной и статистической термодинамики в химии.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 ч.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу аспирантов и трудоемкость (в часах)			Формы текущего контроля успеваемости (по темам) Формы промежуточной аттестации (по семестрам)
			лекции	практические	СР	
I	Раздел 1 Статистическая термодинамика	3				(Формы текущего контроля указываются по всем видам учебной работы)
1.1	Тема 1.1. Предмет статистической термодинамики. Классический и квантовый подходы при определении макро- и микросостояний системы	3	4		10	Контрольные вопросы для самостоятельной работы
1.2	Тема 1.2. Ансамбли Гиббса и их классификация. Определение средних величин по ансамблю Гиббса. Постулаты статистической термодинамики	3	4		10	Контрольные вопросы для самостоятельной работы
1.3	Тема 1.3. Микроканоническое и каноническое распределение Гиббса. Статистический интеграл. Статистический расчет термодинамических функций с применением квазиклассического приближения	3	8		10	Контрольные вопросы для самостоятельной работы
1.4	Тема 1.4. Статистическая термодинамика идеального газа. Распределение Макс-	3	8		10	Контрольные вопросы для самостоятельной работы

	велла-Больцмана по энергиям и скоростям					
1.5	Тема.1.5. Определение средних величин по ансамблю Гиббса при квантовом подходе. Сумма по состояниям. Их связь с термодинамическими функциями	3	8		10	Контрольные вопросы для самостоятельной работы
1.6	Тема 1.6. Статистические суммы по состояниям для различных степеней свободы и их вклад в термодинамические функции	3	8		10	Собеседование по теме самостоятельной домашней работы
II	Раздел II Термодинамика неравновесных процессов	3	8		10	
2.1	Тема 2.1. Описание систем в термодинамике неравновесных процессов	3	8		10	Контрольные вопросы для самостоятельной работы
2.2	Тема 2.2. Термодинамика систем вблизи равновесия (линейная неравновесная термодинамика)	3	8		10	Дискуссия (круглый стол)
2.3	Тема 2.3. Термодинамика систем вдали от равновесия(нелинейная термодинамика)	3	8		10	Контрольные вопросы для самостоятельной работы

2.4	Тема 2.4. Энтропия и информация	3	8	18	Презентация
					зачет
Итого: 180 часа/ов			72	108	

Содержание дисциплины

Раздел 1 Статистическая термодинамика

Тема №1.1. Предмет статистической термодинамики. Классический и квантовый подходы при определении макро- и микросостояний системы

Обобщенные координаты, скорости и импульсы. Полная энергия системы. Уравнения движения Гамильтона. Понятие фазы и фазового пространства, фазовая траектория. « μ » и « Γ » - фазовые пространства. Динамическая и вероятностная задачи при определении микросостояния системы.

Квантово-механическое описание системы. Фермионы и бозоны. Способы распределения фермионов и бозонов по квантовым состояниям. Сравнение с классическим приближением. Квазиклассическое приближение. Нормированный фазовый объем.

Тема 1.2. Ансамбли Гиббса и их классификация. Определение средних величин по ансамблю Гиббса. Постулаты статистической термодинамики

Макросвойства системы как средние значения случайных величин. Усреднение по времени и ансамблю Гиббса. Микроканонический, канонический и большой канонический ансамбли Гиббса. Плотность вероятности и вероятность микросостояния системы в квазиклассическом приближении. Теорема Лиувилля. Постулаты статистической термодинамики.

Тема 1.3. Микроканоническое и каноническое распределение Гиббса. Статистический интеграл. Статистический расчет термодинамических функций с применением квазиклассического приближения

Определение микроканонического ансамбля. Вероятность макросостояния. Статистическое определение энтропии. Энтропия изолированной системы в условиях равновесия. Канонический ансамбль Гиббса. Плотность вероятности и нормированная плотность вероятности для канонического ансамбля Гиббса. Статистический интеграл. Расчет термодинамических функций: внутренней энергии, теплоемкости, энтропии, изохорно-изотермического и изобарно-изотермического потенциалов, энтальпии в квазиклассическом приближении (использование статистического интеграла).

Тема 1.4. Статистическая термодинамика идеального газа. Распределение Максвелла-Больцмана по энергиям и скоростям

Статистический интеграл для одной частицы и N -частиц. Их взаимосвязь. Расчет средней энергии одной частицы и системы из N -частиц. Вклад различных степеней свободы в общий статистический интеграл. Статистический интеграл для поступательных степеней свободы. Распределение частиц по скоростям и импульсам. Средние значения скорости.

Тема.1.5. Определение средних величин по ансамблю Гиббса при квантовом подходе. Сумма по состояниям. Их связь с термодинамическими функциями

Вероятность определенного квантового состояния. Принцип равной вероятности состояний с одинаковой энергией. Квантовый подход при рассмотрении канонического ансамбля Гиббса. Сумма по состояниям для системы в целом. Молекулярная сумма по состояниям. Взаимосвязь суммы по состояниям и молекулярной суммы по состояниям для неразличимых частиц. Расчет термодинамических функций и констант равновесия химических реакций с использованием суммы по состояниям и молекулярной суммы по состояниям.

Тема 1.6. Статистические суммы по состояниям для различных степеней свободы и их вклад в термодинамические функции

Молекулярные суммы по состояниям для поступательной, вращательной, колебательной, электронной степеням свободы. Оценка вклада различных степеней свободы в значения термодинамических функций для простых молекулярных моделей (линейный гармонический осциллятор, жесткий ротор).

Раздел 2. Термодинамика неравновесных процессов

Тема 2.1. Описание систем в термодинамике неравновесных процессов

Второе начало термодинамики в открытых системах. Движущие силы и скорости необратимых термодинамических процессов и соотношение между ними. Термодинамические силы в системах с пространственной неоднородностью. Термодинамические силы в пространстве однородных систем

Тема 2.2. Термодинамика систем вблизи равновесия (линейная неравновесная термодинамика)

Связь между величинами потока и термодинамической силы вблизи термодинамического равновесия. Взаимодействие термодинамических процессов и линейные соотношения Онзагера. Примеры взаимодействующих процессов в однородных системах (транспорт вещества через мембрану при наличии осмоса; активный транспорт вещества через мембрану; сопряженные химические реакции). Примеры сопряженных процессов в пространственно-неоднородных системах. Термодинамические критерии достижения и устойчивости стационарных состояний.

Тема 2.3. Термодинамика систем вдали от равновесия(нелинейная термодинамика)

Термодинамический и кинетический подходы к описанию эволюции систем. Общие

критерии устойчивости стационарных состояний. Критерии эволюции в нелинейной термодинамике. Универсальный критерий эволюции Гленсдорфа-Пригожина. Химически реакционноспособные системы вдали от термодинамического равновесия. Термодинамика и устойчивость нелинейных кинетических систем. Точки бифуркации и возникновение новых диссипативных структур. Диссипативные структуры.

Тема 2.4. Энтропия и информация

Иерархия процессов по временному фактору в сложных динамических системах. Квазистационарные подсистемы. Связь энтропии и устойчивости динамического процесса. Связь энтропии и информации. Ценность информации. Рецепция и возникновение информации в динамических системах.

5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины

При изучении дисциплины «Методы неравновесной и статистической термодинамики в химии» предусматривается использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения аудиторных занятий в сочетании с самостоятельной работой с целью развития профессиональных навыков обучающихся. К активным и интерактивным формам проведения занятий относятся:

- 1) лекции с элементами дискуссии;
- 2) групповые дискуссии по контрольным вопросам к разделам дисциплины, вырабатывающие у обучающегося навыки физико-химического мышления.

Успешное освоение материала курса предполагает большую самостоятельную работу аспирантов и руководство этой работой со стороны преподавателей.

Предусмотрены встречи со специалистами ОАО «Электроисточник» (г. Саратов), ОАО «Завод АИТ» (г. Саратов), ОАО «Литий-Элемент» (г. Саратов), ЗАО «НИИХИТ-2» (г. Саратов), ЗАО «ОЗ НИИХИТ» (г. Саратов), а также проведение экскурсий в лаборатории этих учреждений.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов.

Самостоятельная работа аспирантов проводится в форме изучения теоретических вопросов по предлагаемой литературе, лекциям и заданий для домашней работы с дальнейшим их разбором или обсуждением на аудиторных занятиях. Во время самостоятельной подготовки обучающиеся обеспечены доступом к библиотечным фондам и сети Интернет.

6.1. Виды самостоятельной работы

Раздел/Тема дисциплины	Вид самостоятельной работы	Литература
Раздел 1 Статистическая термодинамика	Проработка конспектов лекций и вопросов, вынесенных на самостоятельное углубленное изучение с помощью основной и дополнительной литературы.	[1-7] Современные публикации по теме дисциплины в периодической печати
Раздел 2 Термодинамика неравно-	Проработка конспектов лекций и вопросов, вынесенных на самостоятельное углубленное	[1-7] Современные

весных процессов	изучение с помощью основной и дополнительной литературы.	публикации по теме дисциплины в периодической печати
Итого часов на самостоятельную работу: 108 часов		

6.2. Вопросы для углубленного самостоятельного изучения

1. Химически реакционноспособные системы вдали от термодинамического равновесия. 2. Термодинамика и устойчивость нелинейных кинетических систем.

3. Точки бифуркации и возникновение новых диссипативных структур. Диссипативные структуры.

4. Примеры взаимодействующих процессов в однородных системах (транспорт вещества через мембрану при наличии осмоса; активный транспорт вещества через мембрану; сопряженные химические реакции).

5. Статистическое определение энтропии. Энтропия изолированной системы в условиях равновесия.

6. Сумма по состояниям для системы в целом. Молекулярная сумма по состояниям. Взаимосвязь суммы по состояниям и молекулярной суммы по состояниям для неразличимых частиц.

6.3. Задания для самостоятельной домашней работы (см. раздел ФОС)

6.4. Порядок выполнения самостоятельной работы

Самостоятельная подготовка к занятиям осуществляется регулярно по каждой теме и разделу дисциплины и определяется календарным графиком изучения дисциплины. Ко всем разделам дисциплины аспирантом осуществляется проработка конспектов лекций и прилагаемых вопросов, вынесенных на самостоятельное углубленное изучение с помощью основной и дополнительной литературы. В ходе освоения курса предполагается выполнение презентации по научно-исследовательской работе.

7. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Формы текущего контроля работы аспирантов

1) Вопросы для углубленного самостоятельного изучения (ко всем разделам дисциплины) и собеседования с аспирантом.

2) Презентация по научно-исследовательской работе

7.2. Порядок осуществления текущего контроля

Текущий контроль выполнения заданий осуществляется регулярно, начиная с 5 недели семестра:

1) по контрольным вопросам для самостоятельной работы по всей дисциплине (контроль и оценивание осуществляется в ходе собеседования с аспирантом);

2) в виде презентаций по теме научно-исследовательской работы.

Система текущего контроля успеваемости служит в дальнейшем наиболее качественному и объективному оцениванию в ходе промежуточной аттестации.

7.3. Промежуточная аттестация по дисциплине

Промежуточная аттестация проводится в форме зачета.

7.4. Фонд оценочных средств

Содержание фонда оценочных средств см. в приложении №1.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература

1. Леонтович, М.А. Введение в термодинамику. Статистическая физика [Электронный ресурс] : учебное пособие. — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2008. — 420 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=226
2. Шашкова, Л. В. Введение в синергетику. От классической (равновесной) к современной (неравновесной) термодинамике и синергетике : учеб. пособие / Л. В. Шашкова. — Оренбург : ГОУ ОГУ, 2006. (ЭБС Руконт).

Дополнительная литература

1. Лоренц Г.А. Статистические теории в термодинамике [Электронный ресурс]/ Лоренц Г.А.— Электрон. текстовые данные.— Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2001.— 184 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/17657>.— ЭБС «IPRbooks»
2. Ансельм, А.И. Основы статистической физики и термодинамики [Электронный ресурс] : учебное пособие. — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2007. — 427 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=692

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Учебная аудитория для чтения лекций.
2. Мультимедийная установка.
3. Для проведения научно-исследовательской работы имеется комплекс современного цифрового оборудования для решения учебных и научных проблем: учебно-лабораторные комплексы «Химия», трехэлектродные ячейки, электронные потенциостаты, сочетающие исполнительные устройства: потенциостаты/гальваностаты серии РС, частотные анализаторы FRA; комплекс электрохимического оборудования «Autolab», криостат «Криовист», люминисцентный микроскоп «Альтами Люм 1», цифровые мультиметры, амперметры и вольтметры, энергодисперсионный рентгенофлуоресцентный спектрометр EDX – 720HS (Шимадзу, Япония),

лазерный дифракционный анализатор размера частиц SALD - 2021(Шимадзу, Япония), адсорбционная станция для измерения величины удельной поверхности, прибор Quantachrome NOVA 1200e (США) для распределения пор по радиусам адсорбционным методом.

Это позволяет проводить измерение физико-химических величин и изучение кинетики химических и электрохимических реакций стационарными и нестационарными методами с использованием компьютерных технологий.

На компьютерах установлено лицензионное программное обеспечение: Microsoft Office 2003, 2007, Mathcad, Matlab

10. Особенности освоения дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Для аспирантов с ограниченными возможностями здоровья предусмотрены следующие формы организации педагогического процесса и контроля знаний:

-для слабовидящих:

обеспечивается индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс; для выполнения контрольных заданий при необходимости предоставляется увеличивающее устройство; задания для выполнения, а также инструкция о порядке выполнения контрольных заданий оформляются увеличенным шрифтом (размер 16-20);

- для глухих и слабослышащих:

обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости аспирантам предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;

- для лиц с тяжелыми нарушениями речи, глухих, слабослышащих все контрольные задания по желанию аспирантов могут проводиться в письменной форме.

Основной формой организации педагогического процесса является интегрированное обучение инвалидов, т.е. все аспиранты обучаются в смешанных

группах, имеют возможность постоянно общаться со сверстниками, легче адаптируются в социуме.

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

Автор программы И.А. Казаринов Казаринов Иван Алексеевич, д.х.н., профессор, заведующий кафедрой физической химии

Разработанная программа одобрена на заседании кафедры физической химии от 18 июня 2014 года, протокол № 14

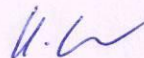
Актуализированная программа одобрена на заседании кафедры физической химии

от 15 июня 2015 года, протокол № 12

Актуализированная программа одобрена на заседании кафедры физической химии

от 1 июня 2016 года, протокол № 10

Зав. кафедрой физической химии
д.х.н., профессор



И.А. Казаринов

Директор Института химии
д.х.н., профессор



О.В.Федотова

