

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ
Директор Института химии
д.х.н. проф. Федотова О.В.

"04" _____ 2019 г.

Рабочая программа дисциплины
Алгоритмические подходы в статистической термодинамике

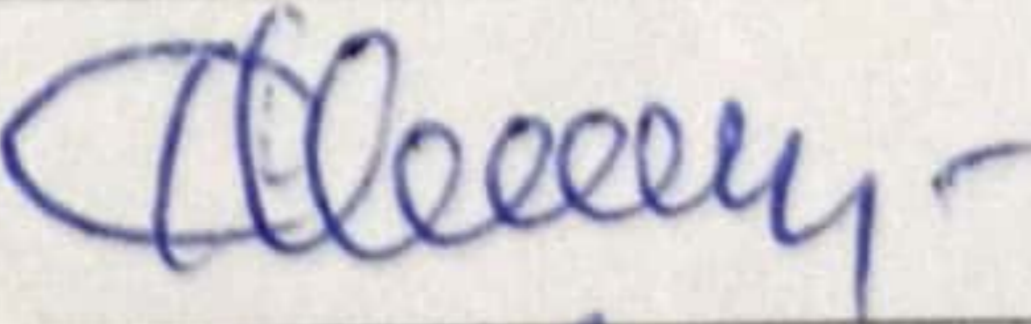
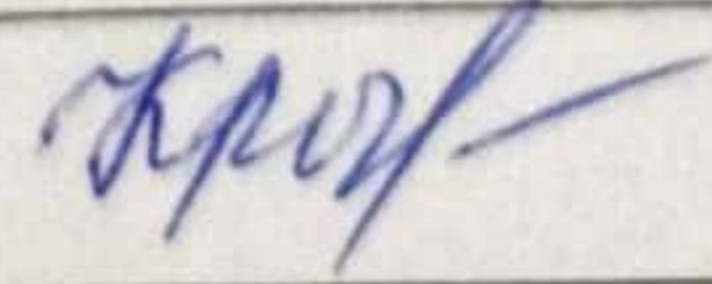

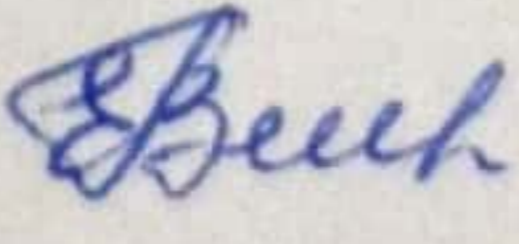
Направление подготовки бакалавриата
04.03.01 Химия

Профиль подготовки бакалавриата
Физическая химия

Квалификация (степень) выпускника
Бакалавр

Форма обучения
Очная

Саратов,
2019

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Шмаков Сергей Львович		06.06.2019
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна		06.06.2019
Заведующий кафедрой	Шиповская Анна Борисовна		06.06.2019
Специалист Учебного управления	Зими́на Елена Валерьевна		06.06.2019

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Алгоритмические подходы в статистической термодинамике» является ознакомление студентов с основными идеями и методами статистической термодинамики и алгоритмами расчёта термодинамических свойств макросистем по молекулярным данным.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Алгоритмические подходы в статистической термодинамике» (Б1.В.03) относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 «Дисциплины (модули)» рабочего учебного плана ООП по направлению 04.03.01 Химия, профилю «Физическая химия» и преподаётся в 7 семестре.

Для освоения программы по дисциплине «Алгоритмические подходы в статистической термодинамике» студент должен иметь базовое среднее (полное) общее образование и должен обладать общими навыками работы на персональном компьютере (операционная система Windows), а также накопить запас знаний по широкому кругу дисциплин математического и физико-химического цикла: математика (интегральное и дифференциальное исчисление, теория вероятностей), классическая механика (различные формы уравнений движения), квантовая механика (энергетические спектры частицы в потенциальной яме, жёсткого ротатора, гармонического осциллятора; энергетические термы атомов и молекул), молекулярная спектроскопия (спектральные методы получения молекулярных данных), феноменологическая термодинамика (расчёт термодинамических свойств систем на основе характеристических функций — энергий Гиббса и Гельмгольца, условие химического равновесия и расчёт состава равновесной газовой смеси).

Предшествующими дисциплинами являются «Математика» (семестры 1–2), «Информатика» (1 семестр) и профессиональные дисциплины в объёме курсов ООП по направлению 04.03.01 — «Химия», профиль «Физическая химия».

3. Результаты обучения по дисциплине

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
ПК-1. Способен владеть системой фундаментальных химических понятий и законов.	ПК-1.1. Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических	Знать: теоретические основы метода ансамблей Гиббса, распределения Максвелла и Больцмана для идеальных газовых систем, каноническое распределение Гиббса,

	<p>методов исследования.</p> <p>ПК-1.2. Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности</p> <p>ПК-1.3. Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин</p>	<p>алгоритмы расчёта статистических сумм, термодинамических характеристик и констант равновесия реакций для одно- и двухатомных газов по молекулярным данным;</p> <p>Уметь:</p> <p>рассчитывать кинетические характеристики молекул, вычислять по молекулярным данным термодинамические характеристики одно- и двухатомных газов, а также константы равновесия реакций с их участием;</p> <p>Владеть:</p> <p>методами расчётов статистической термодинамики.</p>
--	---	--

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачётные единицы, 144 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости. Формы промежуточной аттестации
				Лекции	Лабораторные	Самостоят.	Всего	
1	Введение. Элементы классической механики и теории вероятностей	7	1–2	4	6	6	16	Проверка конспектов лекций и результатов работы на компьютере
2	Статистические распределения	7	3–6	8	10	10	28	
3	Модель идеального газа. Распределения Максвелла и Больцмана	7	7–8	4	8	8	20	
4	Расчёт статистической суммы молекулы одно- и двухатомного газа по молекулярным	7	9–10	4	10	10	24	

	данным							
5	Расчёт термодинамических характеристик газов по молекулярным данным	7	11–14	8	10	10	28	
6	Расчёт констант химического равновесия и выхода реакций с участием одно- и двухатомных газов по молекулярным данным	7	15–18	8	10	10	28	
7	Промежуточная аттестация	7						зачёт
Итого часов				36	54	54	144	

Содержание дисциплины

1. Введение. Элементы классической механики и теории вероятностей
 Особенности феноменологического и молекулярно-статистического методов изучения состояния макросистем. Понятие о макро- и микросостоянии системы и способах их задания. Макропараметры системы и динамические переменные отдельных частиц. Описание микросостояния механической системы с помощью обобщённых импульсов и координат. Число степеней свободы атома, многоатомной молекулы и механической системы в целом. Уравнения движения в форме Ньютона, Лагранжа и Гамильтона. Эквивалентность различных форм уравнений движения в декартовой системе координат.

Дискретные и непрерывные случайные величины. Классическое определение вероятности для дискретной случайной величины и плотность распределения вероятности для непрерывной случайной величины. Теорема сложения вероятностей и теорема произведения вероятностей.

2. Статистические распределения

Фазовое пространство, интегралы движения, фазовые точки и фазовые траектории. Методика расчёта фазовой траектории и трудности при её реализации. Динамические переменные как случайные величины. Элемент объёма фазового пространства в квазиклассическом приближении.

Метод ансамблей Гиббса. Три типа канонических ансамблей Гиббса. Условия статистического равновесия. Теорема Лиувилля и её следствия. Статистический интеграл. Статистическое определение энтропии и её

основные свойства. Явный вид фазовой плотности вероятности для микроканонического распределения в адиабатически изолированной системе.

Явный вид фазовой плотности вероятности для изотермической равновесной системы. Связь канонического распределения Гиббса и термодинамических параметров.

Энергия Гельмгольца равновесной системы и её взаимосвязь со статистическим интегралом. Фундаментальная роль статистического интеграла при расчёте термодинамических характеристик макросистем по молекулярным данным.

3. Модель идеального газа. Распределения Максвелла и Больцмана.

Свойства аддитивности полной энергии газовой системы и мультипликативности плотности распределения вероятностей. Плотность распределения вероятностей для отдельной молекулы идеального газа в μ -фазовом пространстве. Формула Больцмана для расчёта числа частиц в заданном микросостоянии. Связь статистического интеграла газовой системы со статистическим интегралом отдельной молекулы.

Вычисление свободной энергии и других термодинамических параметров идеального газа. Приложения теоремы о равномерном распределении кинетической энергии по степеням свободы. Теплоёмкость идеального газа и твёрдых тел.

Распределение Максвелла и Больцмана для молекул идеального газа как частный случай канонического распределения Гиббса. Независимость распределения по составляющим импульса молекулы от распределения по её координатам.

Различные формы записи распределения Максвелла: по составляющим импульса, по составляющим скорости, по модулю скорости, по кинетической энергии поступательного движения. Распределение Больцмана для частиц идеального газа во внешнем силовом поле.

Элементы квантовой статистики. Основные положения квантовой статистической физики. Основные законы квантовой механики. Квантовый статистический ансамбль. Матрица плотности квантового статистического ансамбля. Квантовая статистическая сумма. Квантовое распределение Больцмана. Статистики Ферми–Дирака и Бозе–Эйнштейна.

4. Расчёт статистической суммы молекулы одно- и двухатомного газа по молекулярным данным.

Энергетический спектр жёсткого ротатора, вращательное квантовое число, степень вырождения энергетических уровней. Вращательные спектры поглощения гетероядерных двухатомных молекул, правило отбора, определение положения линий в спектре, вращательные постоянные молекул и расчёт длины химической связи.

Энергетический спектр гармонического осциллятора, колебательное квантовое число, степень вырождения энергетических уровней. Расчет относительной заселённости колебательных уровней энергии.

Основное и возбуждённые электронные состояния атома, их энергетические термы и степени вырождения (статистический вес). Выражения для статистических сумм атомов и двухатомных молекул в приближении жёсткий ротатор – гармонический осциллятор.

5. Расчёт термодинамических характеристик газов по молекулярным данным.

Использование характеристических свойств энергии Гельмгольца при расчёте термодинамических свойств макросистем. Алгоритм расчёта суммы вкладов различных видов движения в термодинамические свойства одноатомного газа как функций температуры T , объема V и числа частиц N на основе статистической суммы атома.

Алгоритм расчёта суммы вкладов различных видов движения в термодинамические свойства двухатомного газа как функций температуры T , объема V и числа частиц N на основе статистической суммы двухатомной молекулы в приближении жесткий ротатор – гармонический осциллятор.

Сопоставление температурных зависимостей стандартных молярных энтропии S_m^0 , приращения энтальпии ($H_T^0 - H_{298}^0$) и изобарной теплоёмкости (C_p^0), полученных по молекулярным данным и на основе справочных данных в рамках феноменологической термодинамики.

6. Расчёт констант химического равновесия и выхода реакций с участием одно- и двухатомных газов по молекулярным данным

Расчёт константы химического равновесия при диссоциации. Установление температурной зависимости $K_C(T)$ и её связи с молекулярными характеристиками на основе явного вида статистических сумм молекулы A_2 и атома A .

Расчёт константы химического равновесия при обмене. Установление температурной зависимости $K_C(T)$ и её связи с молекулярными характеристиками на основе явного вида статистических сумм молекул. Понятие энергии диссоциации двухатомной молекулы и тепловой эффект реакции при абсолютном нуле.

Структура и календарный план лабораторных занятий

1. Элементы классической механики. Уравнения движения в форме Гамильтона, их интегрирование и расчёт фазовых траекторий для простейших механических систем: вертикально падающее тело, одномерный гармонический осциллятор. Элементы теории вероятностей.

2. Канонические распределения Гиббса. Принцип сохранения фазового объёма для ансамбля фиксированного числа частиц.

3. Распределения Больцмана и Максвелла. Расчёт скоростных характеристик молекул идеальных газовых систем. Поведение газовых молекул и коллоидных частиц аэрозолей в гравитационном поле Земли.

4. Статистические суммы атомов и двухатомных молекул. Вычисление термодинамических характеристик газовых систем по молекулярным данным.

5. Вычисление констант равновесия простейших газовых реакций с участием атомов и двухатомных молекул по молекулярным данным.
6. Применение решёточных моделей в теории жидкого состояния.
7. Применение решёточных моделей в теории фазовых переходов.
8. Применение решёточных моделей в теории растворов и жидких кристаллов.
9. Использование метода вторичного квантования в решёточных теориях.

5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины

Программа включает в себя как материал лекционного курса и лабораторных занятий, так и разделы для самостоятельной работы студентов. Лабораторные занятия посвящены компьютерному решению теоретических и расчётных задач по ключевым разделам дисциплины. Предусмотрена индивидуальная контрольная работа, включающая расчёт по молекулярным данным температурной зависимости термодинамических характеристик двухатомного газа и констант равновесия и выхода реакций с участием одно- и двухатомных газов.

Традиционные образовательные технологии: чтение лекций, консультирование студентов, индивидуальная беседа со студентом и т.п.

Технологии, основанные на современных информационных средствах и методах научно-технического творчества: учебные дискуссии.

Компьютерные технологии: выполнение студентами упражнений и заданий на компьютере под руководством преподавателя в порядке возрастания сложности.

Курс завершается зачётом. Билет состоит из двух частей: первая выявляет уровень подготовки студента, вторая задаёт ему задачу для решения на компьютере.

Адаптивные образовательные технологии для лиц с ОВЗ и инвалидностью. Формы обучения и проведения промежуточной аттестации для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья устанавливается с учётом индивидуальных психофизических особенностей. Варианты промежуточной аттестации в данном случае могут быть следующими: только устный ответ без письменного конспекта на бумаге, только письменный ответ (конспект ответа) на бумаге или письменный ответ (конспект ответа) на компьютере без устного ответа, ответ на зачётный билет в форме тестирования. При необходимости предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на промежуточной аттестации.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Виды самостоятельной работы студентов: знакомство с основной и дополнительной литературой, изучение документации к используемым программам, планирование предстоящих занятий, поиск и разбор ошибок в программах, использовании Интернета. Она может проходить в Дисплейном классе Института химии СГУ (в свободные часы), библиотеке, а также в домашних условиях. Контроль будет осуществляться на занятиях. Предусмотрено также аудиторное самостоятельное решение типовых задач.

Вопросы к курсу

Общие вопросы теории. Законы статистической физики. Статистическая физика как наука, опирающаяся на молекулярно-кинетическую теорию. Этапы развития статистической физики. Элементы теории вероятностей, реализуемые в статистической физике. Возможности и ограничения использования классического описания молекулярных систем. Необходимость двойственной формулировки основных положений статистической физики — квантовой и классической (квазиклассической). Задача вычислений средних значений физических величин как одна из главных задач статистической физики. Понятия фазового пространства, плотности вероятности в классической статистической физике, вероятности состояния, матрицы плотности в квантовой статистической физике. Ансамбли в статистической физике. Среднее по времени и среднее по ансамблю. Эргодическая гипотеза. Микроканонический ансамбль и микроканоническое распределение в квантовом и классическом случаях. Число состояний в квазиклассическом случае. Смысл $N!$ в знаменателе выражения для числа состояний в квазиклассическом случае. Канонические распределения (распределение Гиббса). Вывод канонического распределения. Запись формул канонического распределения для классического и квантового случая. График зависимости вероятности энергии от энергии. Статистическая сумма. Выражения для статистической суммы в квантовом и классическом случаях. Первое начало термодинамики с точки зрения статистической физики. Выражение для энтропии через вероятности и через число состояний. Статистический смысл закона возрастания энтропии. Третье начало термодинамики с точки зрения статистической физики. Выражение свободной энергии Гельмгольца через статистическую сумму. Значение этого выражения в практических применениях статистической физики.

Понятие идеального газа в молекулярно-кинетической теории, применение канонического распределения к идеальному газу. Распределение молекул по координатам и по скоростям как следствие применения канонического распределения к идеальному газу. Применение распределения Максвелла для расчёта средней с среднеквадратичной скоростей молекул. Распределение молекул в поле силы тяжести. Теорема о распределении кинетической энергии молекул по степеням свободы. Классическая теория теплоемкости идеального газа и её недостатки.

Применение методов статистической физики к задаче расчёта термодинамических функций идеального газа. Выражение статистической суммы идеального газа через статистическую сумму молекул. Возможность приближённого 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 расчёта поступательной статистической суммы, формулы для поступательной статистической суммы. Расчёт колебательной статистической суммы молекул в гармоническом приближении. Задача расчёта вращательной статистической суммы и выражения для вращательной статистической суммы двухатомных молекул. Задача расчёта 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 расчёта энтропии на этой формуле с опытом для некоторых газов. Выражения для констант равновесия химических газовых реакций через молекулярные статистические суммы. Применение этих формул для расчётов степени ионизации газов. Формула Саха.

Проблема учёта взаимодействия молекул при расчёте термодинамических функций неидеального газа. Общий характер зависимости потенциальной энергии молекул от расстояния между центрами молекул. Формула Леннард-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. Расчёт 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.

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 числа частиц 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. Флуктуация в системе, находящейся в термостате. Флуктуации основных физических величин. Связь флуктуации энергии и теплоёмкости. Особенности флуктуации энергии при фазовых переходах и при низких температурах. Флуктуация плотности. Флуктуации в открытой системе. Формула для величины флуктуации числа частиц. Формула Пуассона.

Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена. Определение давления в малой молекулярной системе. Давление на стенку. Частицы между двумя стенками. Вириал сил. Частицы в ящике. Формулы для давления. Напряжение в сечении, параллельном стенке. Периодические граничные условия. Вывод формул для давления. Баростат Берендсена.

Основные положения классической статистической механики.

Задачи статистической физики. Понятие фазового пространства и плотности вероятности.

Ансамбли в статистической физике. Микроканонический ансамбль и микроканоническое распределение. Классический и квантовый случаи.

Каноническое распределение. Его вывод. Каноническое распределение в классической и квантовой статистике.

Первое начало термодинамики с точки зрения статистической физики. Выражения для внутренней энергии, работы и количества тепла в статистической физике.

Энтропия в статистической физике. Второе начало термодинамике точки зрения статистической физики.

Энтропия в квазиклассической статистической физике. Число состояний в квазиклассическом случае.

Статистическая сумма. Квантовый и классический случаи. Связь свободной энергии Гельмгольца и статической суммы.

Применение канонического распределения к идеальному газу. Распределение молекул по скоростям и по координатам.

Распределение Максвелла. Две формы распределения Максвелла. Молекулы в поле силы тяжести. Барометрическая формула.

Выражение статистической суммы идеального газа через статистическую сумму молекул. Уровни энергии молекул.

Теорема о распределении энергии по степеням свободы. Классическая теория теплоёмкости идеального газа. Её недостатки.

Задачи расчета поступательной, вращательной и колебательной составляющих статистических сумм молекул.

Расчет колебательной составляющей статистической суммы гармонического осциллятора и его средней энергии.

Выражение констант равновесия химических реакций в идеальном газе через статистические суммы.

Проблема учёта взаимодействий при расчете термодинамических функций неидеального газа. Метод Майера. Связь вириальных коэффициентов с групповыми интегралами.

Статистическая физика открытых систем. Большое каноническое распределение и большая статистическая сумма.

Применение большого канонического распределения для определения среднего числа частиц в открытой системе. Выражение для давления через большую статистическую сумму.

Основные положения квантовой статистической физики. Квантовое каноническое распределение. Квантовая статистика систем тождественных частиц.

Квантовые распределения Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна для идеального газа. Распределение Больцмана.

Типы кристаллических решёток. Закон Дюлонга и Пти. Область применения этого закона.

Понятие о функции распределения частот в твёрдом теле. Расчёт распределения в одномерном, двумерном и трёхмерном кристаллах в приближении Дебая.

Основы теории Дебая теплоёмкости твёрдых тел. Определение дебаевской температуры. Связь дебаевской температуры и скорости распространения волн в кристаллах.

Основы теории Борна-Кармана расчёта в кристаллической решётке на примере одномерного кристалла.

Электроны в металле. Приближение свободных электронов как Ферми-частиц, движущихся внутри потенциального ящика в теории металлов. Импульс Ферми и энергии Ферми.

Основы зонной теории проводимости твёрдых тел. Зависимость сопротивления полупроводников от температуры.

Бозе-конденсация.

Понятие о n -частичных функциях распределения и об их применении в теории жидкого состояния. Цепочка уравнений Боголюбова.

Флуктуации. Мера величины флуктуации. Теорема о зависимости относительной величины от числа частиц в системе.

Флуктуации в изолированной системе. Распределение Гаусса. Флуктуации энергии в каноническом ансамбле. Флуктуации числа частиц в открытой системе.

Модель Изинга. Решение проблемы Изинга для одномерного случая. Модель решёточного газа.

Теорема Лиувилля. Кинетическое уравнение Больцмана. H -теорема Больцмана.

Уравнение Смолуховского.

Уравнение Фоккера–Планка.

Броуновское движение.

7. Данные для учёта успеваемости студентов в БАРС

Табл. 1.1. Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Семестр	Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация	Итого
7	20	30	0	10	0	0	40	100

Программа оценивания учебной деятельности студента

7 семестр

Лекции 0-20 баллов

За 100% посещаемость — 10 баллов, за меньшую — пропорционально.

За проявляемую активность — 1–5 баллов.

За добротный конспект — 1–5 баллов. В итоге не более 20 баллов.

Лабораторные занятия 0-30 баллов

За каждое из 10 правильно выполненных заданий — по 2 балла. Если допущены ошибки и потребовалось обратиться к преподавателю, то, в зависимости от серьёзности ошибки, 0.5–1.5 балла.

За самостоятельность при выполнении лабораторной работы — 1–5 баллов.

За активность работы в лаборатории — 1–5 баллов. В итоге не более 30 баллов.

Практические занятия – не предусмотрены

Самостоятельная работа 0-10 баллов

За поиск в Интернете альтернативных вариантов — 3 балла.

За нахождение ошибки в программе, пропущенной на занятиях — 3 балла.

За оригинальную формулировку или полезное дополнение к заданию — 4 балла. В итоге не более 10 баллов.

Автоматизированное тестирование – не предусмотрено

Другие виды учебной деятельности – не предусмотрены

Промежуточная аттестация (зачёт) 0-40 баллов

Оценивается сдача зачёта: письменный конспект ответа на бумаге и устный ответ. Применяется следующее ранжирование:

- ответ на «отлично» / «зачтено» оценивается от **31 до 40 баллов**
- ответ на «хорошо» / «зачтено» оценивается от **21 до 30 баллов**
- ответ на «удовлетворительно» / «зачтено» от **16 до 20 баллов**

- ответ на «неудовлетворительно» / «не зачтено» от 0 до 15 баллов.

Максимальное количество баллов за сдачу зачёта – 40.

«отлично»: студент выполнил все задания, дал все числовые ответы, они верные (с учётом возможных отличий в округлении), может ответить на дополнительные вопросы.

«хорошо»: студент выполнил все задания, дал все числовые ответы, в подавляющем большинстве верные (может ошибиться в одном-двух), на один-два дополнительных вопроса затрудняется ответить.

«удовлетворительно»: студент, возможно, выполнил не все задания или дал неверные ответы не более чем в половине случаев, объяснить результат затрудняется, нуждается в наводящих вопросах или напоминаниях.

«неудовлетворительно»: студент выполнил менее половины заданий, грубо ошибался в расчётах, не понимал физический смысл действий, наводящие вопросы не помогают.

Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за 7 семестр по дисциплине «Алгоритмические подходы в статистической термодинамике» составляет 100 баллов.

Таблица 2.1. Таблица пересчёта полученной студентом суммы баллов по дисциплине «Алгоритмические подходы в статистической термодинамике» в оценку (зачёт)

55 баллов и более	«зачтено»
меньше 55 баллов	«не зачтено»

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) литература

1. Ягодовский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии : учеб. пособие / В. Д. Ягодовский. - 2-е изд., испр. и доп. - Москва : БИНОМ. Лаб. знаний, 2009. - 495, [1] с. : ISBN 978-5-94774-084-4 (30 экз)

2. Кондратьев А.С. Задачи по термодинамике, статистической физике и кинетической теории : учеб. пособие / А. С. Кондратьев, П. А. Райгородский. - Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2007. - 253, [3] с. - ISBN 978-5-9221-0876-8 (27 экз)

3. Щеголев И.Ф. Элементы статистической механики, термодинамики и кинетики : учеб. пособие для углубл. изучения основ стат. физики и термодинамики / И. Ф. Щеголев. - 2-е изд., испр. . - Долгопрудный : Интеллект, 2008. - 207, [1] с. ISBN 978-5-91559-006-8 (38 экз)

4. Основы статистической физики для химиков [Электронный ресурс] / Федор Карлович Шмидт. - [Б. м. : б. и.]. - 265 с. - Б. ц. (ЭБС «РУКОНТ»).



Обучающиеся инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья обеспечиваются печатными и электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

- Microsoft Windows Pro 7 (Номер лицензии: Open License № 46312747 (№ контракта 048К/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от 06.07.07.) (70 шт.); Microsoft Windows Vista Business Номер лицензии: № 42226296, от 21.12.2009. (21 шт.);
- Microsoft Office Standard 2003 SP3 (№ контракта 048К/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от 06.07.07.) (2 шт.);
- Microsoft Office Professional 2003 (№ контракта 048К/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от 06.07.07.); Office 2007 Suites (№ ИОП 47/08 от 07.07.2008) (10 шт.).
- Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный Russian Edition. 1500-2499
- МАХИМА (лицензия GNU, свободно распространяемое программное обеспечение).
- <http://higeom.math.msu.su>
- <http://www.ibch.ru>
- <http://www.ibmh.msk.su>
- <http://lmd.impb.psn.ru>
- <http://biology.krc.karelia.ru>

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Учебная аудитория для чтения лекций.
2. Проектор для демонстрации иллюстрационного материала.
3. Кафедральная библиотека с научной литературой.

Лабораторные работы проводятся в Дисплейном классе Института химии СГУ, оснащённом 12-ю персональными компьютерами IBM, соединёнными в локальную сеть с выходом в глобальную.

Использование технических средств является доступным для широкого круга пользователей с ограниченными возможностями здоровья и позволяет осуществлять прием-передачу информации в доступных формах.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 — «Химия» и профилю подготовки «Физическая химия».

Автор
доцент кафедры полимеров
на базе ООО «АКРИПОЛ».

Шмаков С.Л.

Программа одобрена на заседании кафедры полимеров на базе ООО «АКРИПОЛ» от 6 июня 2019 г., протокол № 15.