

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра фізичної хімії**

«ЗАТВЕРДЖУЮ»



Заступник декана
навчальної роботи

Наталія Усенко
Наталія УСЕНКО

30 » 06 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
СТАТИСТИЧНА ТЕРМОДИНАМІКА**

для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	бакалавр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова, з блоку вибору «Фізична хімія»

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	6
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: доцент Усенко Наталія Ігорівна

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

КИЇВ – 2022

Розробник: Усенко Наталія Ігорівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри фізичної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії


Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № 6 від « 02 » травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від « 29 » червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« _____ » _____ 2022 року

1. Мета дисципліни – засвоєння студентами системи теоретичних уявлень стосовно принципів розрахунку термодинамічних властивостей хімічних речовин методами статистичної термодинаміки та отримання практичних умінь проводити такі розрахунки.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни – володіти базовими знаннями університетських курсів вищої математики (інтегрування, диференціювання), статистичних методів в хімії (теорія ймовірностей), 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. Викладаються основні методи статистичної термодинаміки – метод Больцмана, метод Гіббса, квантові статистики Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака, а також застосування цих методів до різних 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.

4. Завдання (навчальні цілі): Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на формування здатності до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК1); здатності вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК2); здатності до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел (ЗК10); здатності застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії (СК1), здатності до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії (СК4) та здатності здійснювати кількісні вимірювання (обчислення) фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані (СК8).

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – уміти)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1. Знати основні методи статистичної термодинаміки (Больцмана, Гіббса, квантові статистики) та принципи інтерпретації та обчислення термодинамічних функцій на основі статистики Гіббса.	лекції, практичні заняття самостійна робота	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	15
1.2. Знати принципи обчислення молекулярних статистичних сум та термодинамічних властивостей ідеальних газів,	лекції, практичні заняття самостійна робота	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	10

обумовлених різними видами руху.			
1.3. Знати принципи врахування міжмолекулярної взаємодії при обчисленні статистичних сум реальних газів.	лекції, практичні заняття самостійна робота	контрольна робота (тестові питання), іспит	10
1.4. Знати принципи статистичного розрахунку термодинамічних функцій рідин і твердих тіл	лекції, самостійна робота	усні опитування, іспит	10
2.1. Уміти проводити розрахунки заселеності енергетичних рівнів, середніх значень енергії молекул та аналізувати зміну цих величин з температурою	лекції, практичні заняття самостійна робота	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (розв'язання задач), іспит	10
2.2. Уміти вирішувати практично важливі для фізичної хімії задачі з використанням розподілів Максвелла	лекції, практичні заняття самостійна робота	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (розв'язання задач)	10
2.3. Уміти обчислювати статистичні суми, зумовлені різними видами руху, та відповідні їм внески в термодинамічні властивості ідеальних газів, а також константи рівноваги газових реакцій.	лекції, практичні заняття самостійна робота	захист самостійних розрахункових завдань, контрольна робота (розв'язання задач), іспит	25
2.4. Уміти виводити та аналізувати вирази для парних потенціалів міжмолекулярної взаємодії в реальних газах.	лекції, практичні заняття самостійна робота	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання)	5
2.5. Уміти виводити рівняння стану та термодинамічні властивості реальних газів, базуючись на вигляді парних потенціалів взаємодії.	лекції, практичні заняття самостійна робота	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання)	10

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання \ Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5
P05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин		+	+	+	+		+	+	+
P10. Застосовувати основні принципи термодинаміки та хімічної кінетики для вирішення професійних завдань	+	+	+	+		+	+		
P15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних					+	+	+	+	+
P18. Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії	+	+	+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів /32 бали**, а саме:

1. Контрольна робота №1: **РН 1.1, РН 2.1, РН 2.2 – 12/7 балів.**
2. Контрольна робота №2: **РН 1.2, РН 2.3 – 12/7 балів.**
3. Виконання розрахункових самостійних задач: **РН 1.2, РН 2.3 – 12/8 балів**
4. Контрольна робота №3: **РН 1.3, РН 2.4, РН 2.5 – 12/7 балів**
5. Усні опитування: **РН 1.1, РН 1.2, РН 1.4 – 4/2 бали**
6. Оцінювання самостійної роботи: **РН 1.2, РН 1.3, РН 2.1, РН 2.2 – 8/5 балів.**

Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **40 балів /24 бали.**

Результати навчання, які оцінюються: **РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 2.1, РН 2.3, РН 2.5**

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: тестові питання (на 28 балів) і задачі (на 12 балів).

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою, ніж **24 бали.**

Студент допускається до іспиту, якщо протягом семестру він:
набрав не менше, ніж **36 балів**;
виконав і здав розрахункові самостійні завдання

7.2. Організація оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше 4 тижня семестру;
контрольна робота №2: не раніше 9 тижня семестру;
контрольна робота №3: передостанній тиждень семестру;
персональні завдання для виконання розрахункової самостійної роботи студенти отримують не пізніше, як за 5 тижнів до закінчення семестру;
оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

Студенти мають право на одне перескладання кожної контрольної роботи у визначений викладачем термін.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
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 ймовірностей – математичний апарат статистичної термодинаміки	2	1	5
2	Основні поняття і постулати статистичної термодинаміки.	2		5
3	Статистичний метод Больцмана	2	2	4
4	Розподіл Максвелла за швидкостями, імпульсами, енергіями для молекул ідеального газу	2	2	7
5	Метод Гіббса	3		4
6	Квантові статистики ідеального газу Бозе-Ейнштейна і Фермі-Дірака. Властивості газів Бозе та Фермі.	2	1	4
7	Інтерпретація термодинаміки на основі статистичної фізики	2		3
	Модульна контрольна робота 1	1	1	
Усього за модулем		16	7	32
Змістовий модуль 2. СТАТИСТИЧНА ТЕРМОДИНАМІКА ГАЗІВ, РІДИН І ТВЕРДИХ ТІЛ				
8	Термодинамічні функції ідеального газу. Молекулярна статистична сума і її зв'язок із сумою станів системи.	2		4
9	Молекулярні статистичні суми ідеального газу для різних видів руху.	8	2	4
10	Статистичний розрахунок констант рівноваги, що перебігають в газовій фазі. Статистико-термодинамічні аспекти теорії активного комплексу.	2		4
11	Контрольна робота 2		2	
12	Реальний газ, модельні потенціали взаємодії	2	2	4
13	Конфігураційний інтеграл реального газу, врахування міжмолекулярної взаємодії. Метод Майєра для обчислення конфігураційного інтегралу. Поняття про групові інтеграли, їх зв'язок з рівняннями стану.	2		4
14	Статистичне обчислення термодинамічних функцій реальних газів з використанням різних модельних потенціалів	2		4
15	Суми станів коливального руху і термодинамічні властивості ідеальних кристалічних тіл	2		4
16	Статистична термодинаміка рідин. Корелятивні функції розподілу, методи їх знаходження. Статистичні теорії реальних розчинів неелектролітів	3		6
	Контрольна робота 3	1	1	
Усього за модулем		24	7	34
Іспит				
Усього за дисципліною		40	14	66

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:
Лекції – **40 год.**

Практичні заняття - 14 год

Консультації – за вимогою студентів, але не менше ніж 1 раз на 4 тижні

Самостійна робота - 66 год.

Література

Основна

1. Єрмолаєв О.М., Рашба Г.І. Вступ до статистичної фізики і термодинаміки. – Харків: ХНУ, 2004. – 516 с.
2. Ковальчук Є.П., Решетняк О.В. Фізична хімія. – Львів: ВЦ ЛНУ імені Івана Франка, 2007. – 800 с.
3. Усенко Н.І. Основні поняття і методи статистичної термодинаміки. – К.: ВПЦ „Київський університет”, 2005. – 55 с.
4. Усенко Н.І., Роїк О.С. Статистична термодинаміка ідеального газу. Теорія і задачі. – К.:Логос, 2007. – 52 с.
5. Усенко Н.І. Статистичний розрахунок властивостей реальних газів. – К.:Логос, 2007. – 24 с.
6. Дацюк В.В., Ледней М.Ф., Пінкевич І.П. Термодинаміка і статистична фізика. Збірник задач. – Київ: ВПЦ „Київський університет”, 2012. – 79 с.

Додаткова

7. Hill T.L. Introduction to Statistical Thermodynamics. – Addison-Wesley Publishing Company, 1960. – 508 p.
8. Atkins P., de Paula J. Atkins' Physical Chemistry. 8th Edition. – New-York: W. H. Freeman and Company, 2006. – 1072 p.
9. Daily J.W. Statistical Thermodynamics. – Cambridge University Press, 2019. – 286 p.
10. Ben-Naim A.Y. Statistical Thermodynamics for Chemists and Biochemists. – Springer, 1992. – 697 p.