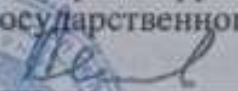


БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета

 А.Д.Король

29.09.2025

Регистрационный № 3856/н



СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальности:

7-07-0531-01 Фундаментальная химия

Профилизация: Современная теоретическая и прикладная химия

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 7-07-0531-01-2023; учебного плана БГУ № 7-5.5-68/01 от 15.05.2023.

СОСТАВИТЕЛИ:

Е.А.Стрельцов, заведующий кафедрой физической химии и электрохимии химического факультета Белорусского государственного университета, доктор химических наук, профессор;

А.В.Семёнов, старший преподаватель кафедры физической химии и электрохимии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

А.И.Кулак, директор ИОНХ НАН Беларуси, академик НАН Беларуси, д.х.н., профессор

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой физической химии и электрохимии БГУ
(протокол № 2 от 18.09.2025);

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 2 от 26.09.2025)

Заведующий кафедрой



Е.А.Стрельцов

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель и задачи учебной дисциплины

Цель учебной дисциплины – изучить теоретические основы статистической термодинамики и освоить методы расчета термодинамических свойств веществ на основании молекулярных данных.

Задачи учебной дисциплины –

1. Изучение теоретических основ статистической термодинамики.
2. Изучение взаимосвязи молекулярных параметров с термодинамическими свойствами вещества.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Учебная дисциплина относится к модулю «Современные направления химической науки» компонента учреждения образования.

Дисциплина «Статистическая термодинамика» непосредственно связана с разделом «Химическая термодинамика» общего курса «Физическая химия» и необходима студентам для качественного проведения научных исследований при выполнении курсовых и дипломных работ. Для изучения курса привлекаются знания и навыки, полученные студентами в ходе изучения дисциплин «Высшая математика» и «Физика».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Статистическая термодинамика» должно обеспечить формирование следующих универсальных и базовых профессиональных, специализированных компетенций.

Универсальные компетенции:

Применять методы научного познания в исследовательской деятельности, генерировать и реализовывать инновационные идеи;

Решать профессиональные, научно-исследовательские и инновационные задачи на основе применения информационно-коммуникационных технологий;

Базовые профессиональные компетенции:

Использовать фундаментальные разделы математики (математический анализ, аналитическую геометрию, дифференциальные уравнения, теорию вероятности и математическую статистику) для решения задач специального содержания;

Применять основные постулаты, положения и законы физической химии для планирования и проведения физико-химического и электрохимического эксперимента, определения физико-химических характеристик веществ, оптимальных условий протекания химических процессов;

Специализированные компетенции:

Применять методы математического анализа, дифференциального исчисления, теории вероятностей, теории статистического оценивания для решения задач химического содержания.

Разбираться в современных направлениях аналитической химии, физической химии, электрохимии, нанохимии, химии координационных

соединений, анализировать новейшие методы, основанные на применении микрочиповых, сенсорных и нанотехнологиях.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- основные постулаты статистической термодинамики;
- принципы описания состояния систем с позиций классической и квантовой механики;
- виды статистических ансамблей;
- принципы статистического описания макроскопических систем;
- понятие статистического интеграла, статистической суммы и их связь с термодинамическими функциями.

уметь:

- рассчитывать статистические суммы и термодинамические функции модельных систем: идеальных газов, жесткого ротатора, гармонического осциллятора;
- оценивать погрешность расчетов, выполненных с использованием методов статистической термодинамики.

иметь навык:

- применения теоретического аппарата статистической термодинамики для решения задач;
- расчета термодинамических свойств веществ по молекулярным и спектральным данным.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 6 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Статистическая термодинамика» отведено для **очной формы** получения высшего образования – 102 часа, в том числе 46 аудиторных часов, лекции – 32 часа, семинарские занятия – 14 часов.

Из них:

Лекции – 32 часа, семинарские занятия – 14 часов, управляемая самостоятельная работа – 4 часа.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1. Теоретический аппарат статистической термодинамики

Тема 1.1. Введение. Элементы теории вероятности и анализа. Некоторые сведения из классической механики.

Общая постановка задачи и предмета статистической термодинамики. Различие феноменологического и статистического подходов к описанию термодинамических систем. Понятие вероятности. Случайные величины. Сложение вероятностей. Условие нормировки вероятностей. Умножение вероятностей. Статистическая независимость. Средние значения случайных величин. Отклонения от средних, флуктуации, относительная флуктуация. Описание состояния механической системы с помощью обобщенных координат и импульсов. Уравнения движения в форме Гамильтона. Молекулярно-кинетическая теория. Фазовое пространство: одномерный гармонический осциллятор, идеальный газ. Квазиклассические соотношения.

Тема 1.2. Основные положения классической статистической термодинамики. Распределения Гиббса.

Метод ансамблей Гиббса. Теорема Лиувилля. Принцип равной вероятности. Функция распределения по энергии. Микроканоническое распределение Гиббса в классическом случае. Статистическое определение энтропии. Каноническое распределение. Статистический интеграл, свободная энергия и энтропия системы в термостате. Большое каноническое распределение.

Тема 1.3. Квантовомеханические представления в статистической термодинамике.

Особенности квантовомеханического описания состояния системы. Энергетический спектр макроскопических тел. Квантовомеханические статистические распределения. Статистическая сумма и ее связь со статистическим интегралом.

Тема 1.4. Классическая статистика идеального газа.

Модель идеального газа. Распределение молекул по импульсам и скоростям. Средние значения некоторых функций скорости поступательного движения частицы. Число ударов молекул о единицу поверхности. Средние значения энергии вращательного и колебательного движения молекул. Закон равномерного распределения энергии. Метод ячеек Больцмана.

Раздел 2. Связь термодинамических функций идеального газа со статистической суммой молекулы

Тема 2.1. Вклады различных видов движения в статистическую сумму молекулы. Вклад поступательного движения в термодинамические функции.

Получение формул расчета термодинамических функций через статистическую сумму молекулы. Выделение вкладов различных видов

движения в статистическую сумму молекулы и термодинамические функции. Задача о частице в трехмерном потенциальном ящике с бесконечно высокими стенками. Расчет вклада поступательного движения.

Тема 2.2. Вклад электронного движения в термодинамические функции.

Статистическая сумма по электронным состояниям атома или молекулы. Термодинамические функции идеальных одноатомных газов.

Тема 2.3. Вклад вращательного и колебательного движения в термодинамические функции.

Уровни энергии двухатомных молекул. Статистическая сумма жесткого ротатора. Вращательные составляющие термодинамических функций двухатомного газа. Вращательное движение многоатомных молекул. Симметрия молекул, числа симметрии. Тензор инерции. Произведение главных моментов инерции.

Статистическая сумма гармонического осциллятора и вклад колебательного движения в термодинамические функции. Термодинамические функции идеального двухатомного газа в приближении «жесткий ротатор-гармонический осциллятор». Учет ангармоничности колебаний.

Термодинамические функции газов в случае свободного вращения. Случай симметричных волчков. Вычисление термодинамических функций в случае заторможенного вращения. Потенциальный барьер внутреннего вращения.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная (дневная) форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Теоретический аппарат статистической термодинамики	18		12			2	
1.1	Введение. Элементы теории вероятности и анализа. Некоторые сведения из классической механики.	12		6			2	Устный опрос. Контрольная работа. Выполнение теста.
1.2	Основные положения классической статистической термодинамики. Распределения Гиббса.	4		2				Устный опрос. Контрольная работа. Выполнение теста.
1.3	Квантовомеханические представления в статистической термодинамике.	2		2				Устный опрос. Контрольная работа. Выполнение теста.
1.4	Классическая статистика идеального газа.			2				Устный опрос. Контрольная работа. Выполнение теста.
2	Связь термодинамических функций идеального газа со статистической суммой молекулы	14		2			2	

2.1	Вклады различных видов движения в статистическую сумму молекулы. Вклад поступательного движения в термодинамические функции.	6		2			2	Устный опрос. Решение задач. Контрольная работа.
2.2	Вклад электронного движения в термодинамические функции.	4						Устный опрос. Решение задач. Контрольная работа.
2.3	Вклад вращательного и колебательного движения в термодинамические функции.	4						Устный опрос. Решение задач. Контрольная работа.
	Итого	32		14			4	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Буданов, В. В. Химическая термодинамика : учебное пособие для студ. вузов, обуч. по направлению "Химическая технология и биотехнология" и химико-технологическим направлениям подготовки дипломированных специалистов / В. В. Буданов, А. И. Максимов ; под ред. О. И. Койфмана. - Изд. 3-е, стер. - Санкт-Петербург ; Москва ; Краснодар : Лань, 2024. – 317 с.
2. Ансельм, А. И. Основы статистической физики и термодинамики : учебное пособие для студ. высших учебных заведений, обуч. по физическим и техническим направлениям и специальностям / А. И. Ансельм. – Изд. 2-е, стер. – Санкт-Петербург ; Москва ; Краснодар : Лань, 2024. – 426 с. – URL: <https://e.lanbook.com/book/210215>
3. Бондарев, Б. В. Курс общей физики : [углубленный курс] : учебник для бакалавров : учебное пособие для студентов высших технических учебных заведений / Б. В. Бондарев, Н. П. Калашников, Г. Г. Спирин. – 2-е изд. – Москва : Юрайт, 2023. – Кн. 3 : Термодинамика. Статистическая физика. Строение вещества. – 2023. – 369 с.

Дополнительная литература

1. Годнев, И.Н. Вычисление термодинамических функций по молекулярным и спектральным данным / И.Н. Годнев. – М.: ГИТТЛ, 1956.
2. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. V. Статистическая физика. Ч. I. / Л. Д. Ландау, Л. М. Лифшиц. – М., 2002.
3. Борщевский, А.Я. Физическая химия : учебник для студ. вузов, обучающихся по направлениям подготовки 04.03.01 "Химия", 18.03.01 "Химическая технология", 03.03.01 "Прикладная математика и физика" (квалификация (степень) "бакалавр") : в 2 т. / А. Я. Борщевский. - Москва : ИНФРА-М, 2019–2023. - Т. 2 : Статистическая термодинамика. - 2023. - 382 с. - URL: <https://znanium.ru/read?id=420931>
4. Байков, В.И. Теплофизика. Термодинамика и статистическая физика / В.И. Байков, Н. В. Павлюкевич. – Минск : Вышэйшая школа, 2018.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Объектом диагностики компетенций студентов являются знания, умения, полученные ими в результате изучения учебной дисциплины. Выявление учебных достижений студентов осуществляется с помощью мероприятий текущего контроля и промежуточной аттестации.

Для диагностики компетенций могут использоваться следующие средства текущего контроля: устный опрос, контрольная работа, решение задач.

Формой промежуточной аттестации по дисциплине «Статистическая термодинамика» учебным планом предусмотрен экзамен.

Для формирования итоговой отметки по учебной дисциплине используется модульно-рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов для текущей и промежуточной аттестации студентов по учебной дисциплине.

Формирование итоговой отметки в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации (примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации):

- ответы на семинарских занятиях – 25 %;
- контрольные работы – 50 %;
- выполнение теста – 25 %.

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе итоговой отметки текущей аттестации (модульно-рейтинговой системы оценки знаний) 40 % и экзаменационной отметки 60 %.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы

Раздел 1: Теоретический аппарат статистической термодинамики (2 часа)

Задание 1. Запишите микроканоническое распределение Гиббса в классическом и квантовом случаях. Поясните различие микроканонического распределения, канонического распределения и большого канонического распределения.

Задание 2. Теорема Лиувилля, ее доказательство. Принцип равной вероятности в статистической термодинамике.

Задание 3. Квазиклассическое приближение. Статистическая сумма, статистический интеграл. Покажите взаимосвязь статистической суммы и статистического интеграла.

Форма контроля - Контрольная работа.

Раздел 2: Связь термодинамических функций идеального газа со статистической суммой молекулы (2 часа)

Задание 1. Рассчитайте стандартные молярные внутреннюю энергию, энтальпию, теплоемкость, энтропию и приведенную энергию Гиббса для аргона при $T = 298,15$ К. Аргон считать идеальным газом.

Задание 2. Определить главные моменты инерции для молекул, рассматриваемых как системы частиц, находящихся на неизменных расстояниях друг от друга в случае, если рассматривается четырехатомная молекула с атомами, расположенными в вершинах правильной четырехугольной пирамиды.

Задание 3. Рассчитать вклад вращательного движения в стандартную молярную энтропию NO_2 , если межъядерное расстояние равно 1,197 Å, а угол ONO составляет $134^\circ 15'$.

Форма контроля - Контрольная работа.

Примерная тематика семинарских занятий

Семинар № 1.

Основные положения теории вероятностей, статистики и анализа. Комбинаторика, функции распределения.

Семинар № 2.

Функции многих переменных. Поверхности. Фазовое пространство.

Семинар № 3.

Уравнения движения. Молекулярно-кинетическая теория.

Семинар № 4.

Основные положения классической статистической термодинамики. Распределения Гиббса.

Семинар № 5.

Квантовомеханические представления в статистической термодинамике.

Семинар № 6.

Модель идеального газа. Распределение молекул по импульсам и скоростям. Средние значения некоторых функций скорости поступательного движения частицы. Число ударов молекул о единицу поверхности. Средние значения энергии вращательного и колебательного движения молекул. Закон равнораспределения энергии. Метод ячеек Больцмана.

Семинар № 7.

Получение формул расчета термодинамических функций через статистическую сумму молекулы. Выделение вкладов различных видов движения в статистическую сумму молекулы и термодинамические функции. Задача о частице в трехмерном потенциальном ящике с бесконечно высокими стенками. Расчет вклада поступательного движения.

Семинар № 8.

Статистическая сумма по электронным состояниям атома или молекулы. Термодинамические функции идеальных одноатомных газов.

Семинар № 9.

Уровни энергии двухатомных молекул. Статистическая сумма жесткого ротатора. Вращательные составляющие термодинамических функций двухатомного газа. Вращательное движение многоатомных молекул. Симметрия молекул, числа симметрии.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используется **практико-ориентированный подход** с анализом конкретных исследовательских задач (ситуаций) который предполагает:

- освоение содержание образовательной программы через решение практических исследовательских задач с использованием информационно-коммуникационных технологий;

- анализ ситуации, используя профессиональные знания, дополнительную литературу и иные источники;

- приобретение студентом знаний и умений для решения практических задач, ориентацию на генерирование идей;

- использованию процедур, способов оценивания, исследовательских практик, фиксирующих сформированность профессиональных компетенций.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Для организации самостоятельной работы необходимо наличие методических указаний, электронных учебно-методических комплексов, в том числе представленных на образовательном портале, фондов оценочных средств, конкретных электронных информационных ресурсов, исходя из специфики организации самостоятельной работы по учебной дисциплине.

На освоение учебного материала в рамках УСР для специальностей общего высшего образования может отводиться до 20 % от аудиторных часов, выделенных на изучение соответствующей дисциплины (при необходимости до 40%); для углубленного высшего образования – до 50 % от аудиторных часов, выделенных на изучение соответствующей дисциплины; для заочной формы получения высшего образования и для образовательных программ дополнительного образования взрослых – обеспечить сопровождение ЭСО часов, выделенных на самостоятельную работу.

Управляемая самостоятельная работа проводится при использовании материалов и заданий, размещенных на электронном образовательном портале БГУ (LMS Moodle) и электронных ресурсов, разработанных авторами курса, размещенных в сети интернет. На управляемую аудиторную работу отводится 4 часа. Форма контроля – контрольная работа, опрос, задания на электронной образовательной платформе.

Примерный перечень вопросов к экзамену

1. Различие феноменологического и статистического подходов к описанию термодинамических систем. Понятие вероятности. Случайные величины. Статистическая независимость. Средние значения случайных величин. Отклонения от средних, флуктуации, относительная флуктуация.

2. Описание состояния механической системы с помощью обобщенных координат и импульсов. Уравнения движения в форме Гамильтона.
3. Фазовое пространство: одномерный гармонический осциллятор, идеальный газ. Квазиклассические соотношения.
4. Реализация термодинамической температурной шкалы, сравнение шкалы Кельвина и шкалы идеального газового термометра (шкалы Авогадро).
5. Метод ансамблей Гиббса. Теорема Лиувилля. Принцип равной вероятности.
6. Функция распределения по энергии. Микроканоническое распределение Гиббса в классическом случае.
7. Статистическое определение энтропии. Каноническое распределение.
8. Статистический интеграл, свободная энергия и энтропия системы в термостате. Большое каноническое распределение.
9. Особенности квантовомеханического описания состояния системы. Энергетический спектр макроскопических тел.
10. Квантовомеханические статистические распределения. Статистическая сумма и ее связь со статистическим интегралом.
11. Модель идеального газа. Распределение молекул по импульсам и скоростям. Средние значения некоторых функций скорости поступательного движения частицы. Число ударов молекул о единицу поверхности.
12. Средние значения энергии вращательного и колебательного движения молекул. Закон равнораспределения энергии. Метод ячеек Больцмана.
13. Вклады различных видов движения в статистическую сумму молекулы. Вклад поступательного движения в термодинамические функции.
14. Задача о частице в трехмерном потенциальном ящике с бесконечно высокими стенками. Расчет вклада поступательного движения.
15. Статистическая сумма по электронным состояниям атома или молекулы. Термодинамические функции идеальных одноатомных газов.
16. Статистическая сумма жесткого ротатора. Вращательные составляющие термодинамических функций двухатомного газа.
17. Вращательное движение многоатомных молекул. Симметрия молекул, числа симметрии.
18. Тензор инерции. Произведение главных моментов инерции.
19. Статистическая сумма гармонического осциллятора и вклад колебательного движения в термодинамические функции.
20. Термодинамические функции идеального двухатомного газа в приближении «жесткий ротатор-гармонический осциллятор». Учет ангармоничности колебаний.
21. Термодинамические функции газов в случае свободного вращения. Случай симметричных волчков.
22. Вычисление термодинамических функций в случае заторможенного вращения. Потенциальный барьер внутреннего вращения. Уровни энергии волчка с заторможенным вращением.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Учебная дисциплина не требует согласования			

Заведующий кафедрой физической химии
и электрохимии
д-р хим. наук, профессор



Е.А.Стрельцов

18.09.2025

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УО

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
____ (протокол № ____ от ____ 202_ г.)
(название кафедры)

Заведующий кафедрой

(ученая степень, ученое звание)

(И.О.Фамилия)

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета

(ученая степень, ученое звание)

(И.О.Фамилия)