

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М. В. Ломоносова
Протокол № 4 от 29 мая 2014 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): ИЗБРАННЫЕ РАЗДЕЛЫ ТЕРМОДИНАМИКИ

Краткая аннотация: В результате изучения дисциплины "Избранные разделы термодинамики" аспиранты должны ознакомиться с теми разделами термодинамики, которые не были включены в общий студенческий курс физической химии, глубже понять общий термодинамический метод. Главная цель курса – более углублённое изложение тех аспектов общей и химической термодинамики, которые недостаточно полно рассмотрены в общем курсе физической химии для студентов химического факультета МГУ. К таким вопросам относятся, например, термодинамическое описание многокомпонентных систем, термодинамика систем во внешних полях, неравновесная термодинамика и её приложения к различным явлениям, классификация и сущность статистических распределений, особенно в квантовой статистике, термохимические величины, важные для реакционной способности химических соединений. Весь этот материал будет весьма полезен при подготовке к сдаче экзамена кандидатского минимума по физической химии. Проработка указанных и других вопросов не усложняет, а упрощает понимание всех разделов общей и химической термодинамики. В основу положен метод Гиббса как универсальный инструмент решения термодинамических задач.

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 02.00.04 Химические науки, направленность: физическая химия

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)»

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-1 способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях

УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности
	В2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
ПК-4 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	31 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии
	У3 (ПК-4) Уметь строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий
	У4 (ПК-4) Уметь использовать законы термодинамики для решения практических задач, в том числе, при разработке новых материалов и технологий
	У5 (ПК-4) Уметь получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 46 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (36 часов - занятия лекционного типа, 6 часов – индивидуальные консультации, 4 часа – текущая аттестация), 62 часа составляет самостоятельная работа учащегося.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия

В специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Аналитическая геометрия», «Линейная алгебра», «Физика», «Теория вероятности и математическая статистика», «Физическая химия», а также спецкурсы, посвященные строению молекул.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе							
		Контактная работа, часы из них					Самостоятельная работа, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.
<p>Тема 1. Энергия, работа и теплота, термохимические величины. Энергия как аддитивный интеграл движения. Аддитивность в термодинамике и ее нарушение. Учет энергии поля. Термодинамический смысл теплоты и работы. Первое начало термодинамики для открытых систем. Термохимическая теплота. Стандартные состояния. Энергия химической связи. Энергия ионизации. Средство к электрону. Энергия кристаллической решетки. Термодинамические циклы, их использование в теоретической химии и для анализа химических превращений.</p>	10	4				4	6		6
<p>Тема 2. Термодинамическое описание многокомпонентных систем. Энтропия. Термодинамическая температура. Необратимые процессы. Оценка абсолютной стандартной энтропии веществ. Термодинамическое</p>	14	6				6	8		8

<p>тождество в различных переменных. Замена переменных. Теорема о малых добавках. Применения термодинамических преобразований. Максимальная работа. Термодинамическая устойчивость. Принцип Ле-Шателье. Большой термодинамический потенциал. Термодинамические неравенства. Компоненты и составляющие вещества. Фундаментальные уравнения. Теорема Эйлера. Обобщенные термодинамические потенциалы. Термодинамические соотношения для объемных плотностей экстенсивных величин. Термодинамические величины неравновесных систем. Парциальные мольные величины. Влияние химического состава на термодинамические свойства. Стабильность химических соединений. Гетерогенные системы. Правило фаз. Фазовые реакции. Обобщенное уравнение Ван-дер-Ваальса. Связь кривых энергии Гиббса с фазовыми диаграммами. Парциальные теплоты испарения. Общие свойства равновесий раствор – пар в двойных системах.</p>											
<p>Тема 3. Термодинамические функции ионов в растворе. Электролитическая диссоциация. Химические потенциалы и активности. Средние ионные активности. Корреляционные поправки к термодинамическим функциям. Радиус Дебая. Новая шкала отсчета термодинамических величин ионов в растворе. Термодинамические составляющие процесса растворения. Энергия Гиббса кристаллической решётки. Энергия Гиббса гидратации ионов. Модель Борна. Электрон в полуреакциях. Сольватированный электрон.</p>	10	4				4	6			6	
<p>Тема 4. Термодинамика систем во внешних полях. Основные сведения из электростатики. Поляризация диэлектриков. Диэлектрическая проницаемость. Поле, создаваемое поляризованным веществом. Термодинамические соотношения для поляризованных диэлектриков. Электрострикционный и электрокалорический эффекты. Влияние электрического поля на химические реакции. Основные сведения из магнитостатики. Магнитное поле в намагничивающихся средах. Магнитное поле, создаваемое веществом. Механизмы намагничивания обычных магнетиков. Термодинамические соотношения для магнетиков. Магнитные свойства сверхпроводников. Критическая температура и критическое поле. Эффект Мейсснера – Оксенфельда. Сверхпроводники 1-го и 2-го рода.</p>	16	6		2		6	10			10	

Сверхпроводящий ток. Промежуточное состояние. Термодинамика перехода обычный проводник – сверхпроводник.									
Тема 5. Диссипативные процессы в жидкостях, газах и твердых телах. Локальное равновесие. Термодинамические потоки и силы. Локальное производство энтропии. Стационарные состояния. Теорема о минимуме производства энтропии. Устойчивость стационарных состояний. Уравнения баланса и законы сохранения. Баланс массы. Уравнение движения идеальной жидкости. Баланс энергии. Баланс импульса. Вязкость. Теплопроводность. Диффузия. Термодиффузия. Постоянный ток. Термоэлектрические явления. Эффект Томсона. Эффект Пельтье. Диффузионно-электрические явления.	18	6			2		6	12	12
Тема 6. Статистические распределения в классическом и квантовом случаях. Основные положения классической механики. Общие свойства механического движения со многими степенями свободы. Законы сохранения и эргодическая гипотеза. Теорема Лиувилля и микроканоническое распределение. Особенности энергетического спектра макроскопических тел. Плотность состояний. Статистическая энтропия. Статистическая температура. Распределение Гиббса. Большое каноническое распределение. Статистическая интерпретация работы и теплоты. Статистика и фундаментальные термодинамические уравнения. Распределение Максвелла –Больцмана. Идеальный газ элементарных частиц. Закон равномерного распределения. Молекулярная статистическая сумма. Классификация состояний атомов и молекул. Двухатомный газ. Орто- и параводород. Многоатомный газ. Распределения Ферми и Бозе. Квантовые газы элементарных частиц. Слабо вырожденные квантовые газы. Сильно вырожденный Ферми-газ. Сильно вырожденный Бозе-газ. Бозе – Эйнштейновская конденсация.	22	10			2		10	12	12
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>							4		8
Итого	108	36			6		46	62	62

8. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием (там, где это нужно) мультимедийных презентаций.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

10. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. А. Я. Борщевский. Физическая химия. Том 1. Общая и химическая термодинамика. М.: ИНФРА-М, 2017 – 606 с. + доп. материалы
2. А. Я. Борщевский. Физическая химия. Том 2. Статистическая термодинамика. М.: ИНФРА-М, 2017 – 383 с. + доп. материалы
3. В. В. Еремин, А. Я. Борщевский. Основы общей и физической химии. – Долгопрудный, Издательский Дом «Интеллект», 2012
4. И. Пригожин, Д. Кондепуди. Современная термодинамика. – М.: Мир, 2002
5. Ч. Киттель. Статистическая термодинамика – М.: Наука, 1977
6. И. П. Базаров. Термодинамика. – М.: Высшая школа, 1983

Дополнительная литература

1. А. Баблюянец. Молекулы, динамика, жизнь. – М.: Мир, 1990
2. Е. П. Агеев. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. – М.: Издательство МЦМВО, 2005
3. В. В. Буданов, А. И. Максимов. Химическая термодинамика. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2007
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. – М.: Наука, 1995
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. – М.: Наука, 1992
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Гидродинамика. – М.: Наука, 1986
7. Г. Ф. Воронин. Термодинамика. – Издательство Московского университета, 1980

Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы:

- Национальный институт стандартов и технологий (NIST), банк термодинамических данных: www.nist.gov
- Объединенный институт высоких температур РАН, термодинамические свойства индивидуальных соединений: <http://jiht.ru/>

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватель: БОРЩЕВСКИЙ АНДРЕЙ ЯКОВЛЕВИЧ, д.х.н., профессор, borsch@phys.chem.msu.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1
2. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета

Образцы контрольных вопросов для текущего контроля усвоения материала:

1. Изотермическая сжимаемость однородного тела

- A. Всегда положительна
- B. Может быть как положительной, так и отрицательной
- C. Оба ответа неверны

2. $\Delta H = Q$

- A. Всегда
- B. При постоянном давлении
- C. Оба ответа неверны

3. Газ в баллоне при атмосферном давлении находится в стандартном состоянии

- A. При температуре 298.15°C
- B. При любой температуре
- C. Не может находиться

4. Энтропия тела

- A. Всегда возрастает или остается без изменения
- B. Может возрасти или убывать
- C. Оба ответа неверны

5. Распределение Гиббса показывает

- A. Долю частиц, обладающих определенной энергией
- B. Вероятность нахождения системы в определенном микросостоянии
- C. Оба ответа неверны

6. При переходе сверхпроводящего кольца с током в нормальное состояние сохраняется

- A. Энергия тока
- B. Магнитный поток через отверстие кольца
- C. Оба ответа неверны

7. Необратимые процессы всегда связаны
А. С увеличением энтропии любой части системы
В. С переходом энергии в беспорядочную форму
С. Оба ответа неверны

8. Распределение Максвелла справедливо
А. Только для газов
В. Для любого агрегатного состояния вещества
С. Оба ответа неверны

9. В ортоводороде
А. Ориентация спина обоих электронов одинакова
В. Ориентация спина обеих ядер одинакова
С. Оба ответа неверны

10. Квантовые газы отличаются тем, что в них
А. Поступательное движение частиц должно описываться квантовым образом
В. На заполнение квантовых состояний частицами влияет спин частиц
С. Оба ответа неверны

Образцы заданий и вопросов для промежуточной аттестации – **зачета**:

1. Дайте определения идеального газа с точки зрения феноменологической и статистической термодинамики
2. Выведите соотношение между химическими потенциалами компонентов в двойной системе, рассчитанными на 1 моль, единицу объема вещества и на единицу массы вещества
3. Выведите термическое и калорическое уравнение состояния для газа Ван дер Ваальса
4. Объясните, почему аддитивность энергии может не соблюдаться для макроскопических тел
5. Как интерпретировать различие между внутренней энергией и энтальпией гомогенной системы
6. Выведите наиболее коротким путем уравнение политропного процесса для произвольной гомогенной системы
7. Объясните, почему термодинамическая теплота реакции может не совпадать с фактической теплотой, выделяемой или поглощаемой системой
8. В чем состоит различие между адиабатическим и вертикальным сродством к электрону?
9. Свяжите энергию и энергию Гиббса кристаллической решетки
10. Оцените абсолютную энтропию жидкой воды при 10°C
11. Сформулируйте закон возрастания энтропии в самой общей форме
12. Чем отличается энергия разрыва химической связи от энергии химической связи?
13. Покажите, как из внутренней энергии, записанной в виде характеристической функции, вычислить величину $C_p - C_v$

14. Запишите фундаментальное уравнение для открытой многокомпонентной системы, которое получено из термодинамического тождества для энергии путем полного набора преобразований Лежандра
15. Дайте интерпретацию минимальной работы с помощью диаграммы в переменных U и S
16. Выведите термодинамическое неравенство $C_V > 0$ из условий устойчивости равновесия однородного тела
17. Объясните главные отличия фазового перехода 2-го рода от перехода 1-го род
18. Получите уравнение Клапейрона – Клаузиуса из обобщенного уравнения Ван дер Ваальса
19. Охарактеризуйте область применимости теории Дебая – Хюккеля и объясните, почему различия между термодинамическими величинами раствора электролита и такого же раствора, идеального по Генри, называют корреляционными поправками
20. Почему при записи полуреакций в электрохимии термодинамическое состояние электрона не указывают?
21. В чем состоит отличие энергии нейтрального проводника от энергии уединенного заряженного проводника и проводника, помещенного в однородное электростатическое поле?
22. Запишите член, который надо добавить в фундаментальное уравнение для диэлектрика, записанное в дифференциальной форме. Что учитывает это дополнительное слагаемое?
23. Объясните температурную зависимость магнитной восприимчивости диа- и парамагнетиков
24. Запишите в дифференциальной и интегральной форме уравнение сохранения массы жидкости, в которой имеется макроскопическое движение
25. Как можно примирить законы классической механики с эргодической гипотезой?
26. Объясните суть различий между микроканоническим, каноническим и большим каноническим распределениями
27. Почему статистический интеграл может привести к неверному вычислению термодинамических величин, и что надо предпринять, чтобы избежать этого
28. Оцените число микросостояний тела, состоящего из 10^{18} частиц, и порядок интервалов между соседними уровнями его энергии
29. Расскажите, в чем состоит закон равномерного распределения, и обозначьте границы его применимости
30. Объясните причину, по которой существуют различия между газом в классическом режиме и квантовыми газами
31. Выведите распределения Максвелла – Больцмана, Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна, используя большое каноническое распределение
32. Объясните причину различного поведения орто- и параводорода

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проходит в форме устного ответа на вопросы, включенные в перечень заданий и вопросов для промежуточной аттестации. На каждого аспиранта заполняется ведомость, которая подписывается преподавателем, принимающим зачет.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Избранные разделы термодинамики» на основе карт компетенций выпускников

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА ОЦЕНИВАНИЯ					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
<p>В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p>	Отсутствие владения	Неполное владение отдельными приемами термодинамического анализа	Владение шаблонными приемами термодинамического анализа, достаточное только в рутинных случаях	Довольно полное, но содержащее отдельные пробелы владения приемами термодинамического анализа	Сформированное систематическое владение приемами термодинамического анализа	Устный опрос в ходе зачета
<p>31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности</p>	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о методах определения термодинамических свойств веществ	Несистематические знания о методах определения термодинамических свойств веществ	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о методах определения термодинамических свойств веществ	Сформированные и систематические знания о методах определения термодинамических свойств веществ	Устный опрос в ходе зачета
<p>В2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований</p>	Отсутствие владения	Владение планированием только отдельных этапов термодинамического исследования	Владение построением шаблонных планов термодинамического исследования	Довольно успешное, но недостаточно гибкое владение приемами планирования термодинамического исследования	Полное владение технологиями гибкого планирования термодинамического исследования	Устный опрос в ходе зачета

<p>У1(ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования</p>	Отсутствие умений	Умение использовать расчетные программы только на отдельных этапах термодинамического анализа	Шаблонное умение использовать расчетные программы на всех этапах термодинамического анализа	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать расчетные программы	Сформированное умение гибко использовать возможности расчетных программ на всех стадиях термодинамического анализа	Устный опрос в ходе зачета
<p>31 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии</p>	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о роли термодинамики в физической химии	Ограниченные представления о роли термодинамики в физической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о роли и возможностях термодинамики в физической химии	Сформированные и систематические знания о роли термодинамики в физической химии	Устный опрос в ходе зачета
<p>У3 (ПК-4) Уметь строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий</p>	Отсутствие умений	Фрагментарное умение моделировать и рассчитывать фазовые и химические равновесия	Шаблонное умение моделировать и рассчитывать фазовые и химические равновесия	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение моделировать и рассчитывать фазовые и химические равновесия	Сформированное умение гибко моделировать и рассчитывать фазовые и химические равновесия	Устный опрос в ходе зачета
<p>У4 (ПК-4) Уметь использовать законы термодинамики для решения практических задач, в том числе, при разработке новых материалов и технологий</p>	Отсутствие умений	Фрагментарное умение использовать законы термодинамики для решения практических задач	Шаблонное умение использовать законы термодинамики для решения практических задач	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать законы термодинамики для решения практических задач	Сформированное умение использовать законы термодинамики для решения практических задач	Устный опрос в ходе зачета

<p>У5 (ПК-4) Уметь получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>Отсутствие умений</p>	<p>Фрагментарное умение получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>Шаблонное умение получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>Сформированное умение получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>Устный опрос в ходе зачета</p>
---	--------------------------	--	--	---	---	-----------------------------------