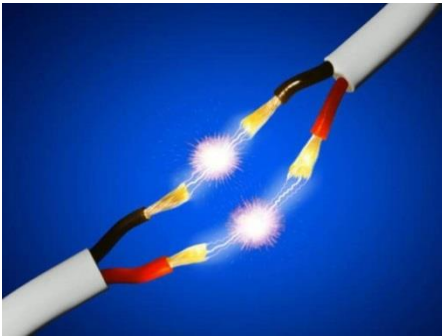


# Общая Физика



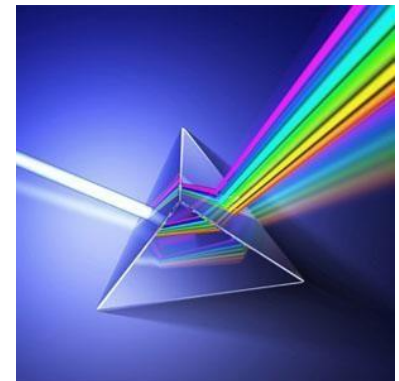
- Механика

- Молекулярная физика  
и термодинамика



- Электричество  
и магнетизм

- Оптика



# Общая Физика



- **Молекулярная физика  
и термодинамика**

[http://genphys.phys.msu.ru/rus/sci/nanogroup/lectures\\_mol2022.html](http://genphys.phys.msu.ru/rus/sci/nanogroup/lectures_mol2022.html)



# План

- Введение
- Типы химической связи
- Температурные шкалы
- Модель идеального газа
- Основные положения молекулярно-кинетической теории. Статистический подход к описанию молекулярных явлений. Понятие о статистических закономерностях.

# Границы применимости модели материальной точки и абсолютно твердого тела

В механике рассматривается движение материальных тел, свойства которых могут быть смоделированы в виде понятий материальной точки и абсолютно твердого тела.

- В первом случае не принимались во внимание внутренняя структура и пространственная протяженность материального тела
- Во втором — их учет сводился лишь к распределению свойства инертности (плотности) в объеме, занимаемом материальным телом, для частного случая, когда это распределение неизменно во времени.
- Кроме того в механике мы изучали движение и взаимодействие одного, двух или в простейшем случае трех тел.

# Границы применимости модели материальной точки и абсолютно твердого тела

Модели материальной точки и абсолютно твердого тела неприменимы для изучения внутренних свойств материальных тел, когда существенны их структура и движение частей тела относительно друг друга.

- **Предмет молекулярной физики** является изучение молекулярной формы движения, т.е. движения больших совокупностей молекул.
- **Молекула** – это наименьшая частица вещества, сохраняющая все его химические свойства.

Молекула состоит из атомов, которые, в свою очередь, состоят из атомных ядер, окруженных определенным числом внутренних и внешних валентных электронов.

# Основные положения молекулярно-кинетической теории.

- Все тела состоят из большого числа обособленных частиц: атомов и молекул.
- Эти частицы находятся в состоянии непрерывного хаотического движения, интенсивность которого зависит от температуры.
- Эти частицы взаимодействуют друг с другом (имеются силы притяжения и отталкивания).

# Размеры атомов и молекул

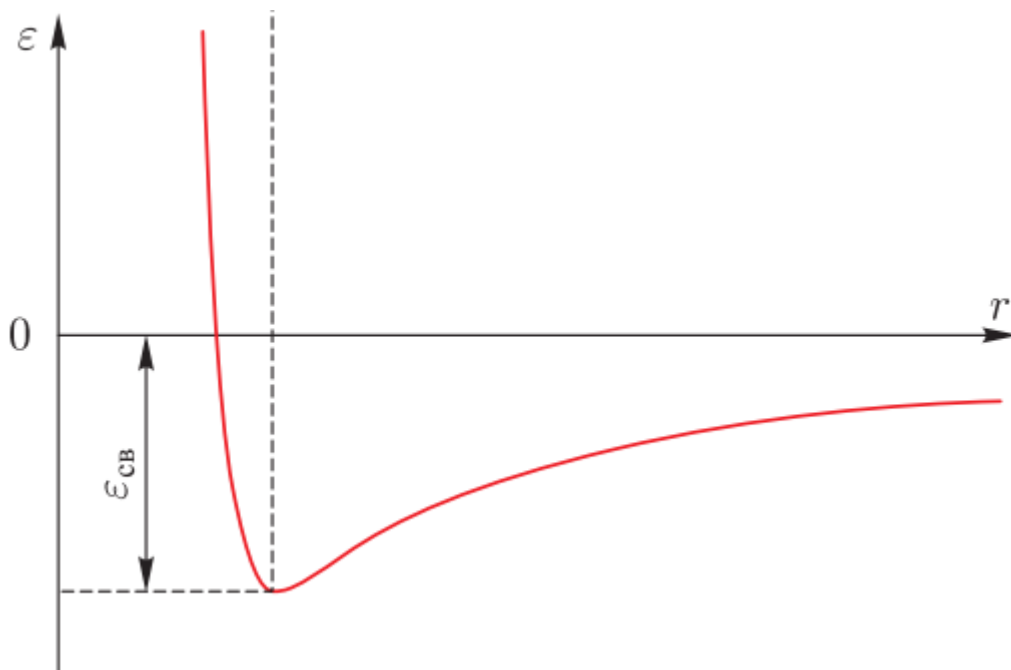
- На сколько большие системы?
- Сколько атомов?

Это количество в молекулярной физике определяется постоянной Авогадро  $N_A = 6,022\ 141\ 29(27) \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>

Для определения строения молекул веществ используются разнообразные методы:

- электронная и колебательная спектроскопия
- ядерный магнитный резонанс
- электронный парамагнитный резонанс
- дифракция рентгеновского излучения, нейтронов, электронов и другие методы

# Взаимодействие атомов и молекул



**Энергия связи** равна энергии, которую необходимо затратить, чтобы развести атомы в молекуле на бесконечно большое расстояние друг от друга.

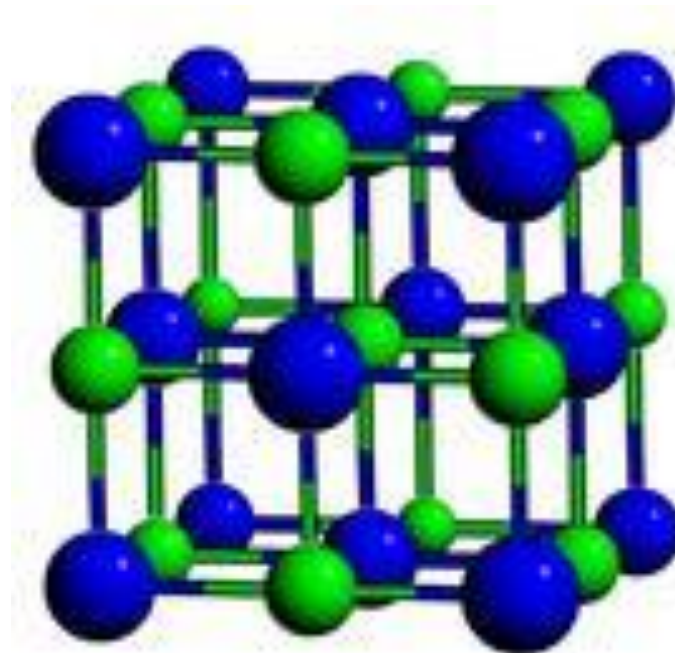
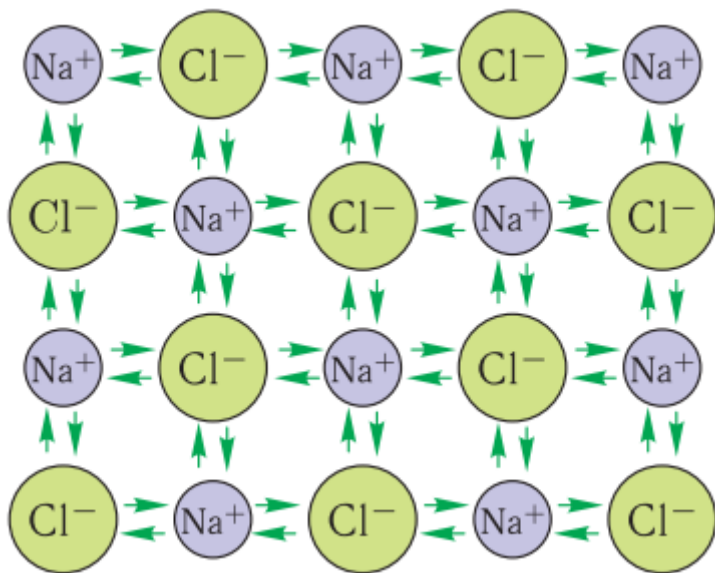


# Типы химической связи

- Ионная
- Ковалентная
- Металлическая
- Молекулярная связь

# Ионная связь

В узлах кристаллической решётки помещаются положительно и отрицательно заряженные ионы.

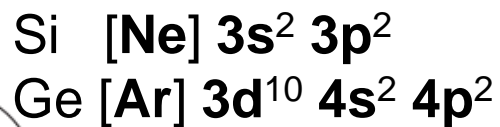
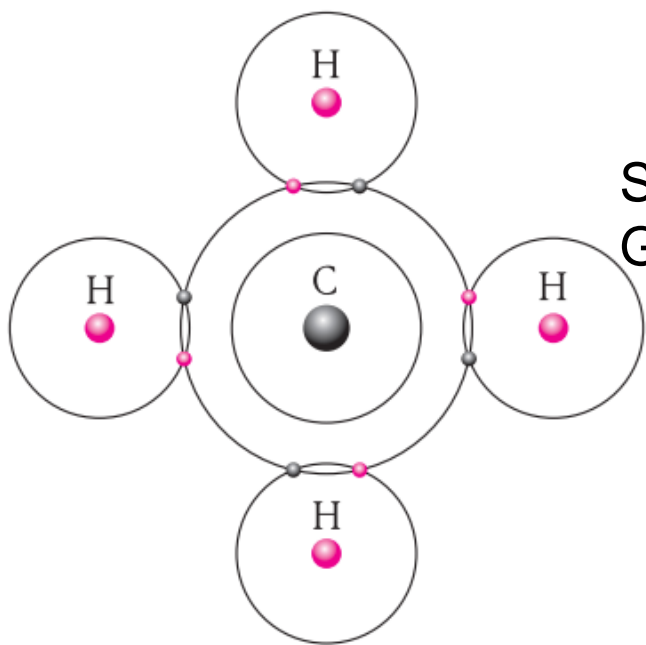


NaCl

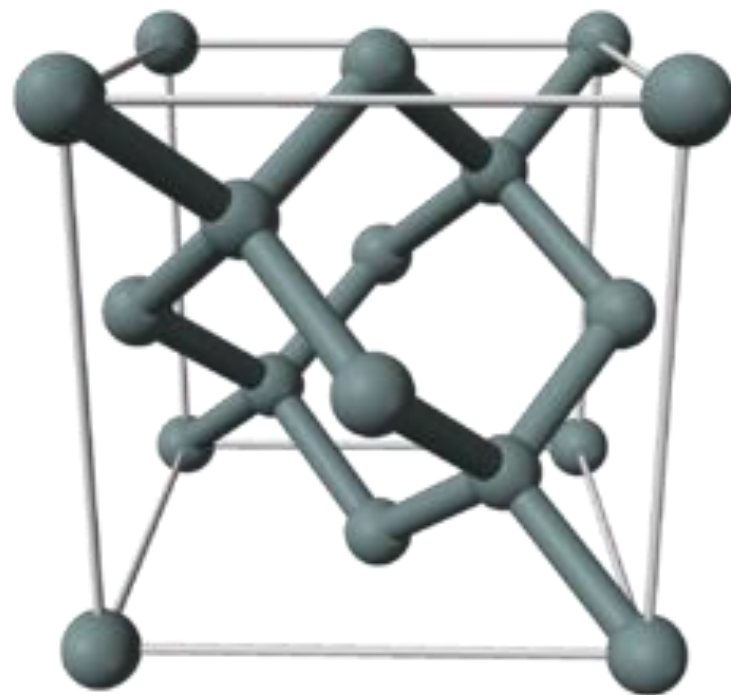
(Плотность  $2,165 \text{ г/см}^3$ , Температура плавления  $+800,8 \text{ }^\circ\text{C}$ )

# Ковалентная связь

Нейтральные атомы размещены в узлах кристаллической решётки. Связь образуется направленными валентными электронными облаками. Связь, объединяющая в кристалле нейтральные атомы, называется ковалентной.

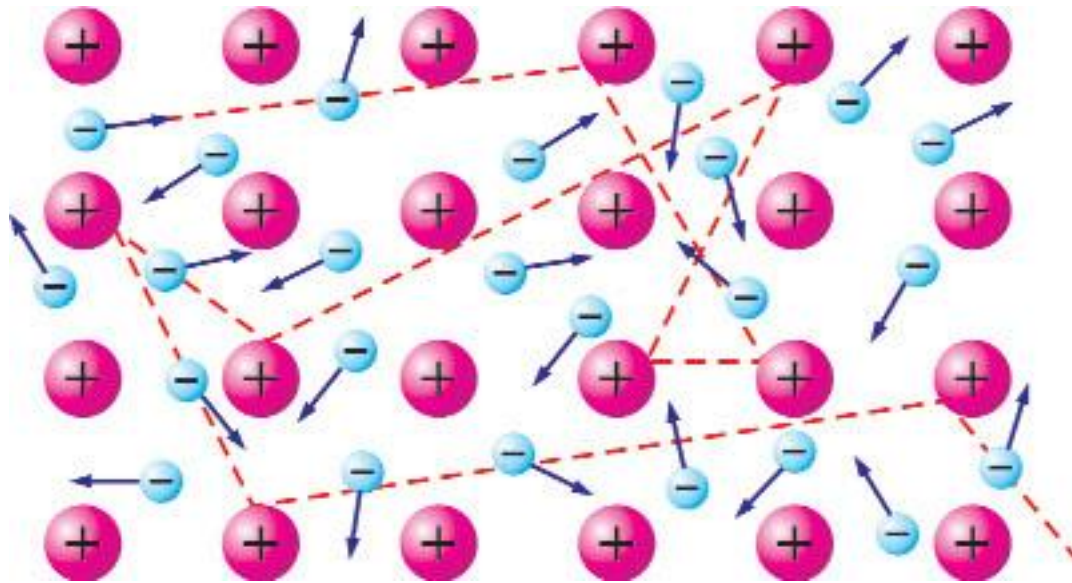


Si, Ge ...



# Металлическая связь

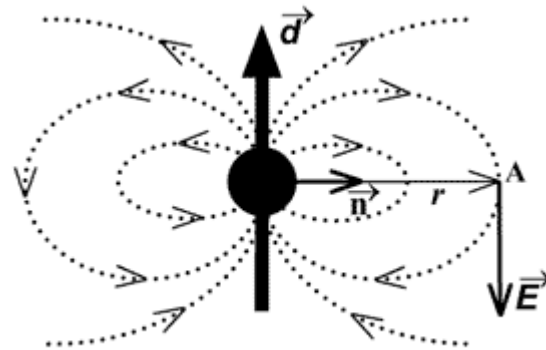
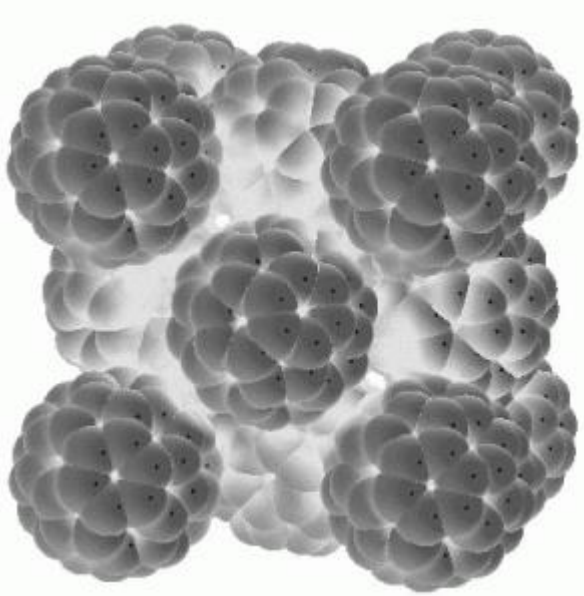
В узлах кристаллической решётки расположены положительные ионы металла. Между ними беспорядочно, подобно молекулам газа, движутся электроны проводимости.



Cu, Ag ...

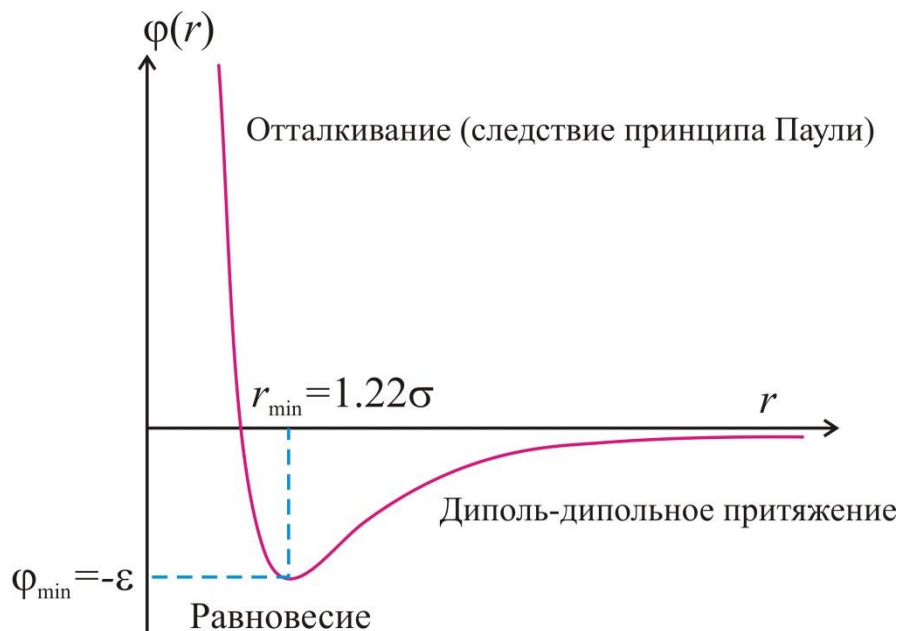
# Молекулярная связь

**Молекулярный кристалл** — кристалл, образованный из молекул. Молекулы связаны между собой слабыми ван-дер-ваальсовыми силами.



$$E_{\text{дип}} = -\frac{P}{R^3} + \frac{3(P R)R}{R^5}$$

# Потенциал Леннард-Джонса

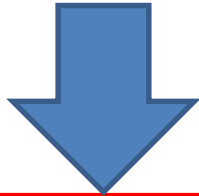


$$\varphi(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

Потенциал ЛД дает хорошее описание ван-дер-ваальсовских взаимодействий между атомами инертных газов и молекулами ( $\text{Ar}$ ,  $\text{Kr}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$  и т.д.). Для металлов не подходит.

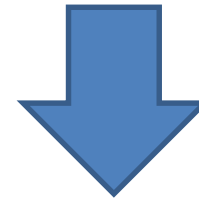
# Два подхода

**Предмет молекулярной физики** является изучение молекулярной формы движения, т.е. движения больших совокупностей молекул.



## **Термодинамический**

Не интересуются движением отдельных частиц, а для описания используются усредненными свойствами и характеристиками:  $V$ ,  $P$ ,  $T$ ,  $m$ ,  $\mu$ , которые определяют экспериментально.



## **Статистический**

Подход основан на применении статистических законов, дает возможность получить предсказания, которые носят не достоверный, а лишь вероятностный характер.

# На сколько большие системы?

- На сколько большие системы?

Это количество в молекулярной физике определяется постоянной Авогадро  $N_A = 6,022\ 141\ 29(27) \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>



# Модель идеального газа

**Модель идеального газа** предполагает, что:

1. потенциальной энергией взаимодействия частиц, составляющих газ, можно пренебречь по сравнению с их кинетической энергией;
2. суммарный объем частиц газа пренебрежимо мал по сравнению с объемом сосуда, в котором они находятся;
3. между частицами нет далекодействующих сил притяжения или отталкивания; соударения частиц между собой и со стенками сосуда абсолютно упруги;
4. время взаимодействия между частицами пренебрежимо мало по сравнению со средним временем между столкновениями.

# Модель идеального газа

## Уравнение Клапейрона–Менделеева

- 1. Идеальный газ** – абстрактная модель, описывающая газ как совокупность материальных точек, не взаимодействующих друг с другом (за исключением абсолютно упругих соударений молекул, необходимых для установления равновесия в системе).
- 2. Возможно** и другое определение: **идеальным** называется газ, уравнение состояния которого описывается соотношением (**Уравнение Клапейрона–Менделеева**)

$$pV = \nu RT \text{ или } pV = Nk_B T$$

(Постоянная Бóльцмана  $k_B = 1,380\,648\,52(79) \cdot 10^{-23}$  Дж·К<sup>-1</sup>).

(Универсальная газовая постоянная

$$R \approx 8,314\,4598(48) \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$$

$$R = k_B N_A$$

# Статистический подход

- Микросостояние статистической системы
- Задача статистической физики
- Статистический ансамбль систем
- Основные понятия теории вероятностей
  - Функция плотности вероятности
  - Вероятность
  - Условие нормировки
  - Среднее значение
  - Дисперсия
- Биномиальное распределение
- Предельные формы биномиального распределения
  - Распределение Пуассона
  - Распределение Гаусса

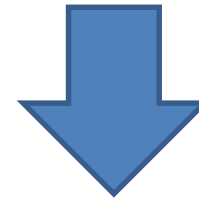
# Два подхода

**Предмет молекулярной физики** является изучение молекулярной формы движения, т.е. движения больших совокупностей молекул.



## **Термодинамический**

Не интересуются движением отдельных частиц, а для описания используются усредненными свойствами и характеристиками:  $V$ ,  $P$ ,  $T$ ,  $m$ ,  $\mu$ , которые определяют экспериментально.



## **Статистический**

Подход основан на применении статистических законов, дает возможность получить предсказания, которые носят не достоверный, а лишь вероятностный характер.

# Микросостояние статистической системы

Статистический метод описания базируется на знании «микроскопического строения» системы. Поэтому статистическая теория является микроскопической.

- **Микросостояние статистической системы** – это состояние системы, охарактеризованное настолько подробно, что заданы состояния всех образующих систему частиц.
- **Микропараметры**– характеристики одной частицы статистической системы, определяющие ее состояние в этой системе.

Если рассмотреть 1 моль газа, то микросостояние  $N=6,02214129(27) \cdot 10^{23}$  частиц характеризуется его координатами и скоростями. Все эти  $6N$  чисел следует рассматривать как случайные величины, они будут характеризовать микросостояние системы.

# Макросостояние

- **Макросостояние** – состояние системы, описанное с помощью макроскопически измеряемых параметров – макропараметров.
- **Макропараметр** – величина, которая может быть определена с помощью макроскопических измерений, ее значение зависит от суммарного действия всех частиц системы.

Если рассмотреть 1 моль газа, то состояние характеризуется тремя макропараметрами:  $p$ ,  $V$ ,  $T$ , которые в стационарном состоянии постоянны.

# Задача статистической физики

- Однако частицы газа в стационарном состоянии движутся и, следовательно, его микроскопические состояния непрерывно изменяются. Таким образом, одному и тому же макроскопическому состоянию соответствует **очень большое** множество микроскопических состояний.
- Иначе можно сказать, что данное макроскопическое состояние осуществляется посредством **очень большого** числа микроскопических состояний.

**Задача статистической физики** состоит в исследовании связи между микро- и макроскопическими состояниями систем.

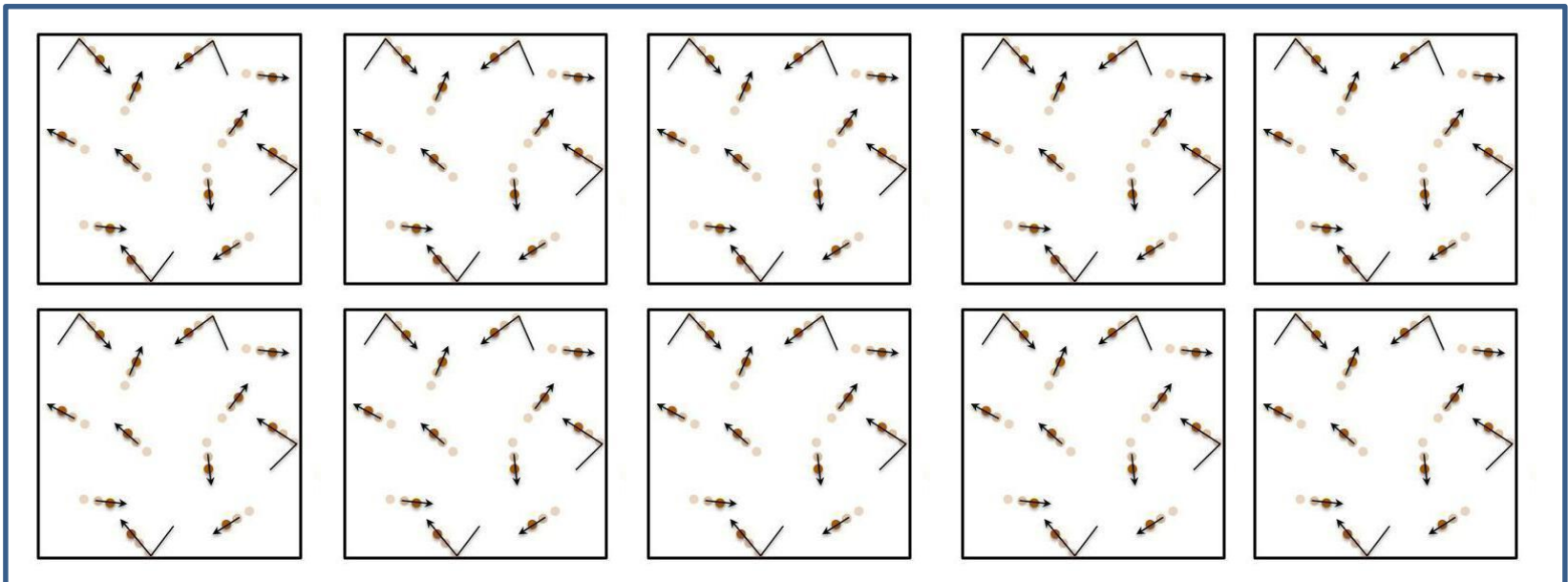
Микроскопическое описание		$m$ (число «решек»)	$\Gamma(n, m)$	$P(n, m)$
№ микросостояния $s$	Доступные микросостояния			
1	0 0 0 0	0	$\Gamma(4, 0) = C_4^0 = 1$	$1/16 = 0,0625$
2	$r$ 0 0 0	1	$\Gamma(4, 1) = C_4^1 = 4$	$4/16 = 0,25$
3	0 $r$ 0 0			
4	0 0 $r$ 0			
5	0 0 0 $r$			
6	$r$ $r$ 0 0	2	$\Gamma(4, 2) = C_4^2 = 6$	$6/16 = 0,375$
7	$r$ 0 $r$ 0			
8	$r$ 0 0 $r$			
9	0 $r$ $r$ 0			
10	0 $r$ 0 $r$			
11	0 0 $r$ $r$			
12	$r$ $r$ $r$ 0	3	$\Gamma(4, 3) = C_4^3 = 4$	$4/16 = 0,25$
13	$r$ $r$ 0 $r$			
14	$r$ 0 $r$ $r$			
15	0 $r$ $r$ $r$			
16	$r$ $r$ $r$ $r$	4	$\Gamma(4, 4) = C_4^4 = 1$	$1/16 = 0,0625$





# Статистический ансамбль систем

- Возьмем очень большое число  $M$  совершенно одинаковых сосудов, каждый из которых имеет объем  $V$ . В каждом из сосудов находится одинаковое число  $N$  одинаковых частиц. Сосуд с заключенными в нем частицами называется **статистической системой**
- Совокупность одинаковых статистических систем называется **статистическим ансамблем**.



# Основные понятия теории вероятностей

- **Случайное событие** – это такое событие, которое в результате испытаний может произойти.
- **Случайная величина** – это величина, значение которой не может быть заранее предсказано. Существует вероятность, с которой случайная величина принимает одно из возможных значений.
- **Статистическое описание микроскопической случайной величины** включает в себя определение всех возможных (доступных) состояний этой величины и вероятностей, с которыми она их принимает, т. е. определение закона распределения случайной величины.
- **Вероятность** – количественная характеристика наступления события.

# Основные понятия теории вероятностей

- **Основной постулат статистической физики** – если изолированная система находится в равновесии, то ее можно обнаружить с равной вероятностью  $P_s = 1/\Gamma_0$ , где  $\Gamma_0$  – полное число доступных микросостояний.
- **Термодинамическая вероятность**  $\Gamma(n,m)$  макросостояния системы, состоящей из  $n$  частиц и имеющей значение макропараметра  $m$ , – число микросостояний, которыми осуществляется данное макросостояние.
- **Математическая вероятность** макросостояния  $P(n,m)$  равна отношению термодинамической вероятности  $\Gamma(n,m)$  к полному числу  $\Gamma_0$  доступных микросостояний системы:  $P(n,m) = \Gamma(n,m) / \Gamma_0$ .

# Основные понятия теории вероятностей

- Условие нормировки

$$\sum_{i=1}^n P_i = 1$$

- Математическое ожидание или среднее значение

$$\langle \xi \rangle = \sum_{i=1}^n \xi_i P_i$$



# Простейшие математические операции с вероятностями. Сложение вероятностей.

Пусть происходят два события  $A$  и  $B$  с вероятностями  $P(A)$  и  $P(B)$  соответственно. Определим событие  $C=A+B$  как событие, наступающее при появлении **либо** события  $A$ , **либо** события  $B$ .

- **Если события  $A$  и  $B$  взаимоисключающие**

$$P(C) = P(A + B) = P(A) + P(B)$$

- **Если события  $A$  и  $B$  не взаимно исключают**

$$P(A + B) = P(A) + P(B) - P(AB)$$

# Простейшие математические операции с вероятностями. Умножение вероятностей.

Рассмотрим теперь, как рассчитывается вероятность  $P(AB)$  одновременного наступления событий. Если есть два события  $A$  и  $B$ , то можно ввести условную вероятность  $P(A/B)$  наступления события  $A$  при условии, что событие  $B$  наступило.

$$P(AB) = P(A/B) \cdot P(B)$$

Если условная вероятность события  $A$  не зависит от события  $B$ , то  $P(A/B) = P(A)$ , а события называются **статистически независимыми**. В этом случае формула умножения вероятностей приобретает наиболее простой вид:

$$P(AB) = P(A) \cdot P(B)$$

# Непрерывная случайная величина

## Функция плотности вероятности

Вероятность того, что значение случайной величины  $x$ , принимающей непрерывный ряд значений, находится в бесконечно малом интервале значений  $(x, x+dx)$  пропорциональна ширине  $dx$  этого интервала:

$$dP(x, x + dx) = f(x)dx$$

Функция  $f(x)$  описывает распределение случайной величины и называется **функцией плотности вероятности**. Она равна отношению вероятности  $dP(x, x+dx)$  к величине  $dx$  :

$$f(x) = \frac{P(x, x + dx)}{dx}$$

Условие нормировки для функции плотности вероятности

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1$$

# Непрерывная случайная величина

## Функция плотности вероятности

Вероятность  $P(x_1, x_2)$  того, что значение случайной величины  $x$  находится в интервале от  $x_1$  до  $x_2$ , равна

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx$$

Вычисление средних значений:

$$\langle \varphi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) f(x) dx$$



# Дисперсия

**Дисперсия** характеризует разброс случайной величины около среднего значения. Она определяется как среднее значение квадрата отклонения величины от ее среднего значения:

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle = \\ &= \langle \xi^2 - 2\xi \langle \xi \rangle + \langle \xi \rangle^2 \rangle = \langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2\end{aligned}$$

Корень квадратный из дисперсии называется **стандартным**, или **среднеквадратичным отклонением**.

Для дисперсии дискретной случайной величины:

$$\sigma^2 = \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle = \sum_{i=1}^n (\xi_i - \langle \xi \rangle)^2 P_i$$

# Элементы комбинаторики

- **Число перестановок** из  $n$  элементов ( $P_n$ ) – число способов, которыми можно расположить в ряд  $n$  элементов:

$$P_n = n!$$

- **Число размещений** из  $n$  элементов по  $m$  ( $A_n^m$ ) – число способов, которыми можно выбрать и расположить в ряд  $m$  элементов из данного множества, содержащего  $n$  различных элементов

$$A_n^m = \frac{P_n}{P_{n-m}} = \frac{n!}{(n-m)!}.$$

# Элементы комбинаторики

- **Число сочетаний** из  $n$  элементов по  $m$  ( $C_n^m$ ) – число способов, которыми можно выбрать  $m$  элементов из данного множества, содержащего  $n$  одинаковых (неразличимых) элементов.

$$C_n^m = \frac{A_n^m}{P_m} = \frac{n!}{m!(n-m)!}.$$

# Биномиальное распределение

$$P_n(m) = \frac{n!}{m!(n-m)!} p^m q^{n-m}$$

- **$P_n(m)$**  – вероятность состояния, в котором из  $n$  частиц системы  $m$  частиц находятся в благоприятных микросостояниях;
- **$p$**  – вероятность, с которой каждая частица находится в благоприятном состоянии;
- **$q=1-p$**  – вероятность, с которой каждая частица находится в неблагоприятном состоянии (с которой частица не находится в благоприятном состоянии);
- **Среднее значение**  $\langle m \rangle = np$
- **Дисперсия**  $\sigma_m = \sqrt{npq}$

# Биномиальное распределение

$$P_n(m) = \frac{n!}{m!(n-m)!} p^m q^{n-m}$$

Например, при бросании монеты вероятность выпадения решки  $p=1/2$ , а при бросании  $n=10$  раз вероятность того, что выпадут две решки ( $m=2$ ), равна

$$P_{10}(2) = \frac{10!}{2!(10-2)!} \left(\frac{1}{2}\right)^2 \left(\frac{1}{2}\right)^{10-2} = 0,043$$

Микроскопическое описание		$m$ (число «решек»)	$\Gamma(n, m)$	$P(n, m)$
№ микросостояния $s$	Доступные микросостояния			
1	0 0 0 0	0	$\Gamma(4, 0) = C_4^0 = 1$	$1/16 = 0,0625$
2	$r$ 0 0 0	1	$\Gamma(4, 1) = C_4^1 = 4$	$4/16 = 0,25$
3	0 $r$ 0 0			
4	0 0 $r$ 0			
5	0 0 0 $r$			
6	$r$ $r$ 0 0	2	$\Gamma(4, 2) = C_4^2 = 6$	$6/16 = 0,375$
7	$r$ 0 $r$ 0			
8	$r$ 0 0 $r$			
9	0 $r$ $r$ 0			
10	0 $r$ 0 $r$			
11	0 0 $r$ $r$			
12	$r$ $r$ $r$ 0	3	$\Gamma(4, 3) = C_4^3 = 4$	$4/16 = 0,25$
13	$r$ $r$ 0 $r$			
14	$r$ 0 $r$ $r$			
15	0 $r$ $r$ $r$			
16	$r$ $r$ $r$ $r$	4	$\Gamma(4, 4) = C_4^4 = 1$	$1/16 = 0,0625$



# Предельные формы биномиального распределения

## Распределение Пуассона

- 1) число частиц (случайных величин)  $n \gg 1$  (в пределе  $n \rightarrow \infty$ );
- 2) вероятность  $p$  реализации благоприятного события для одной случайной величины очень мала:  $p \ll 1$ ;
- 3)  $np = \text{const}$  ( $\langle m \rangle = np$ )

$$(p + q)^n = \sum_{m=0}^n C_n(m) p^m q^{n-m}$$

$$P(m) = \frac{\langle m \rangle^m}{m!} e^{-\langle m \rangle}$$

Пример 1. Представим себе, что на 100 монет приходится одна юбилейными. Какова вероятность того, что если взять 200 монет две из них окажутся юбилейными?

$$P(2) = \left( \langle 2 \rangle^2 / 2! \right) e^{-\langle 2 \rangle} = 0,27.$$

# Предельные формы биномиального распределения Распределение Гаусса

- 1) число частиц (случайных величин)  $n \gg 1$  (в пределе  $n \rightarrow \infty$ );
- 2) для значений  $m$ , близких к  $\langle m \rangle$ , т.е. при отклонении от среднего значения на величину порядка стандартного отклонения.

$$P_G(m) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(m-\langle m \rangle)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\frac{d \ln m!}{dm} \approx \ln m$$

