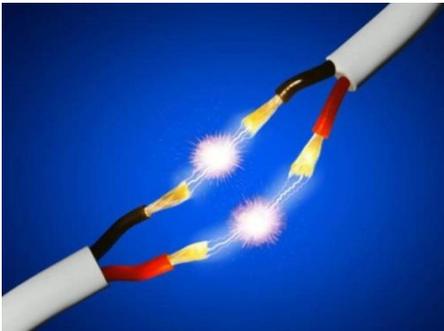


Общая Физика



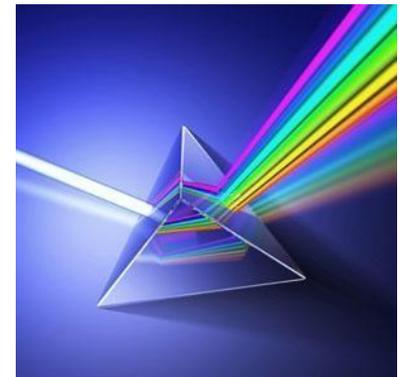
- Механика

- Молекулярная физика
и термодинамика



- Электричество
и магнетизм

- Оптика



Общая Физика



- Молекулярная физика
и термодинамика

http://genphys.phys.msu.ru/rus/sci/nanogroup/lectures_mol2024.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.

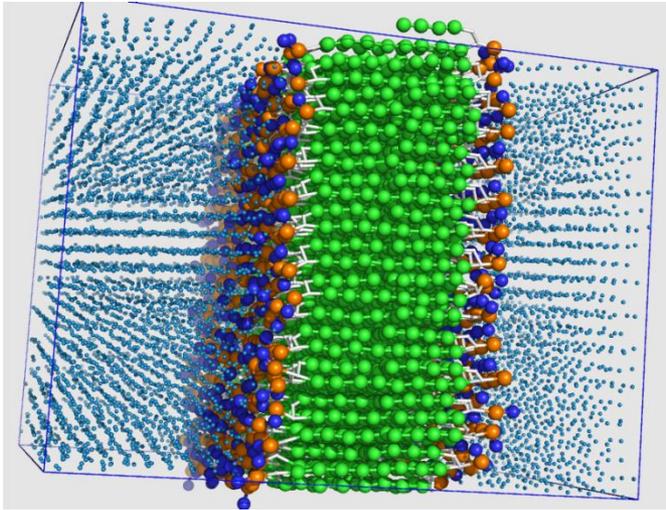
Границы применимости модели материальной точки и абсолютно твердого тела

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

Молекулярная динамика



$$\vec{F} = m \vec{a}$$

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

- **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

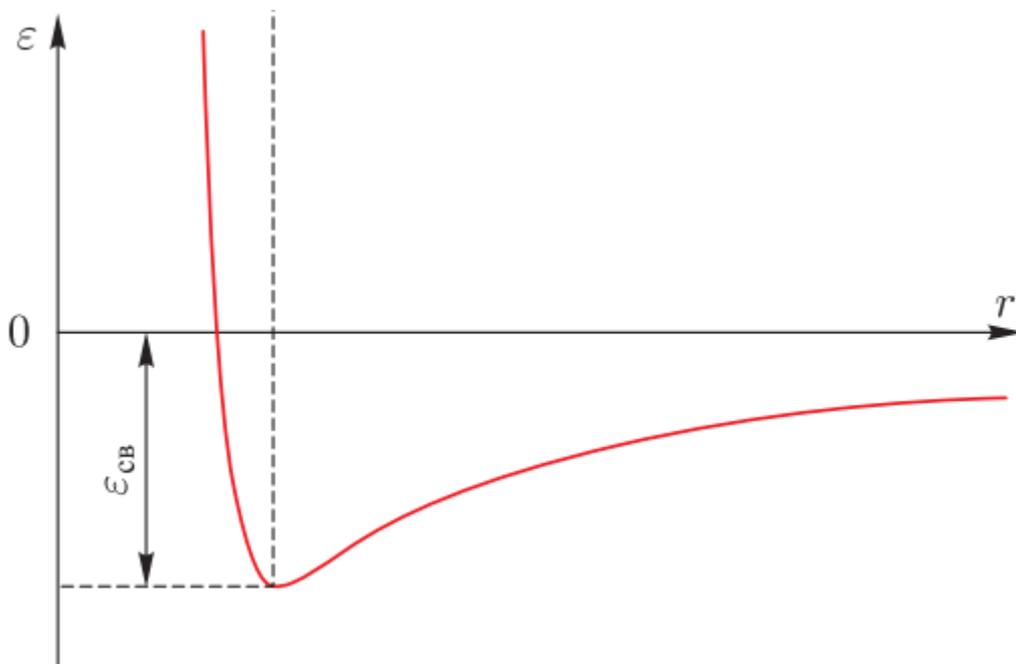
- На сколько большие системы?
- Сколько атомов?

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

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



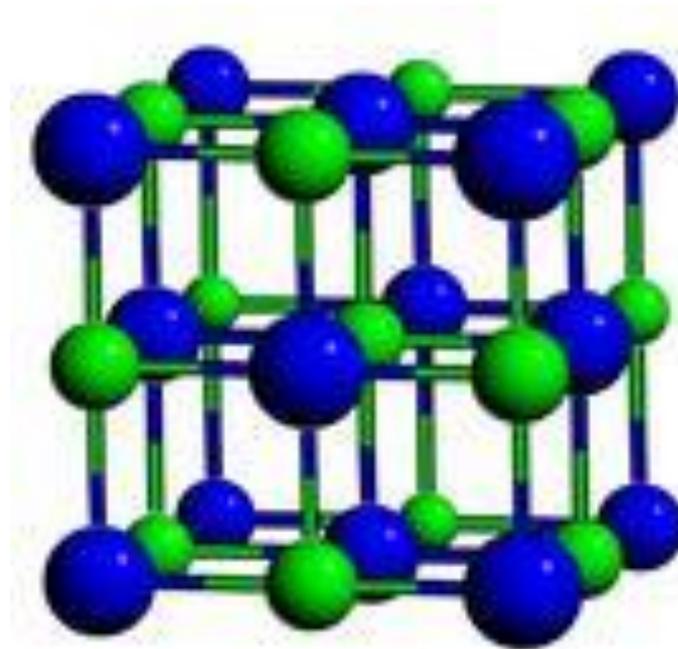
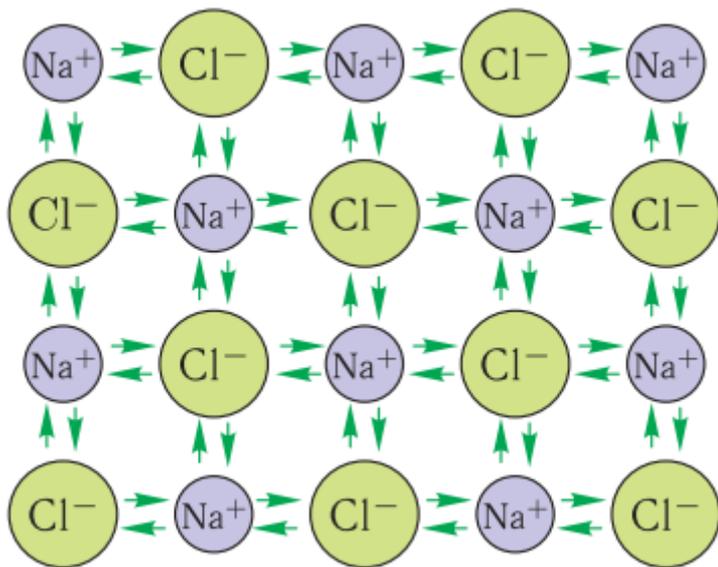
Энергия связи равна работе, которую необходимо затратить, чтобы развести атомы в молекуле на бесконечно большое расстояние друг от друга.

Типы химической связи

- Ионная
- Ковалентная
- Металлическая
- Молекулярная связь

Ионная связь

В узлах кристаллической решётки помещаются положительно и отрицательно заряженные ионы.

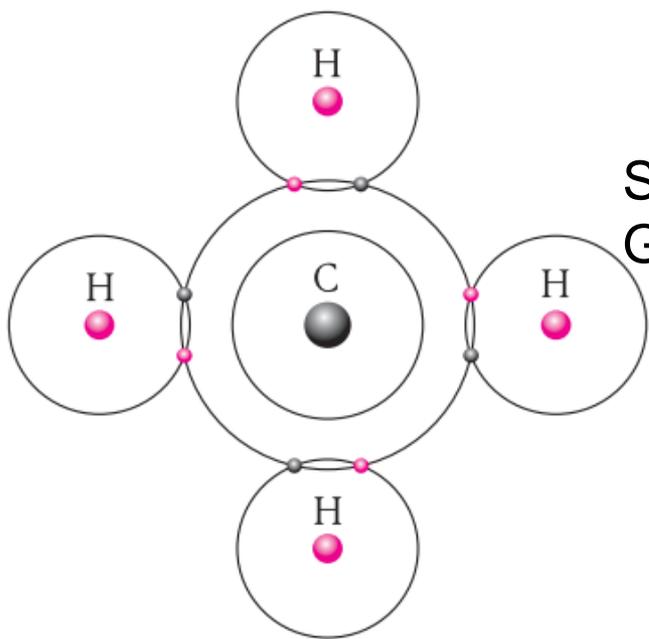


NaCl

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

Ковалентная связь

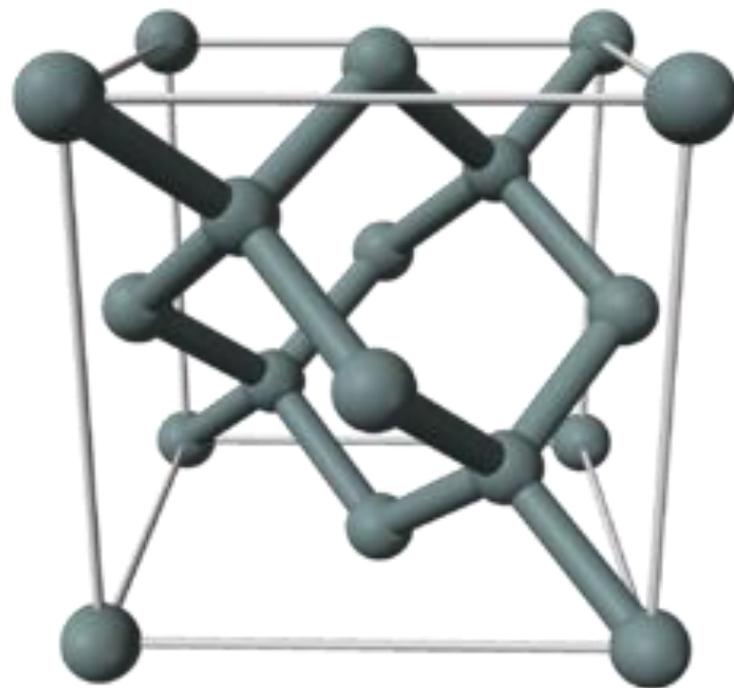
Нейтральные атомы размещены в узлах кристаллической решётки. Связь образуется направленными валентными электронными облаками. Связь, объединяющая в кристалле нейтральные атомы, называется ковалентной.



Si [Ne] 3s² 3p²

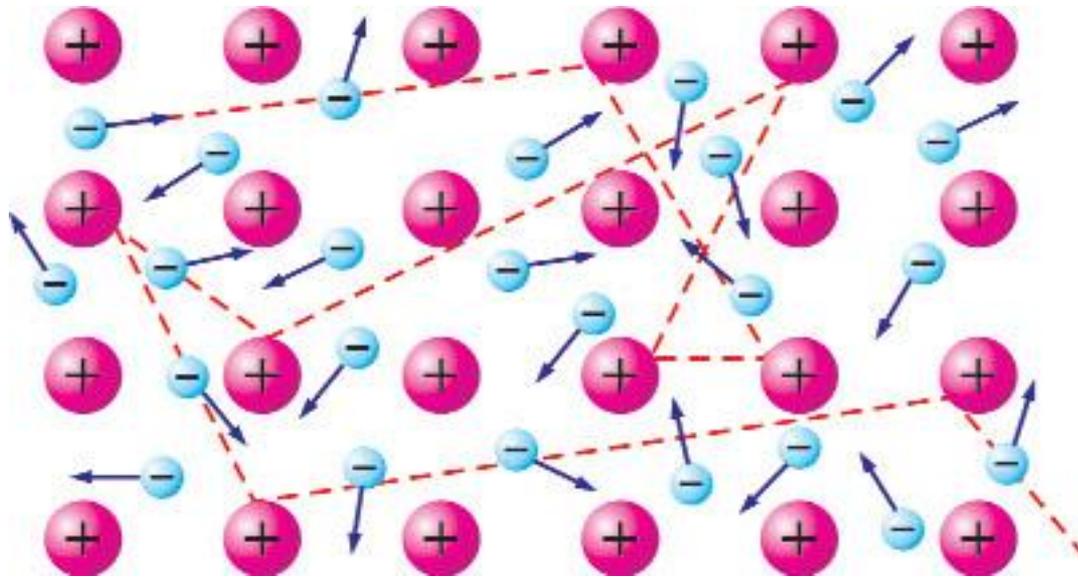
Ge [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p²

Si, Ge ...



Металлическая связь

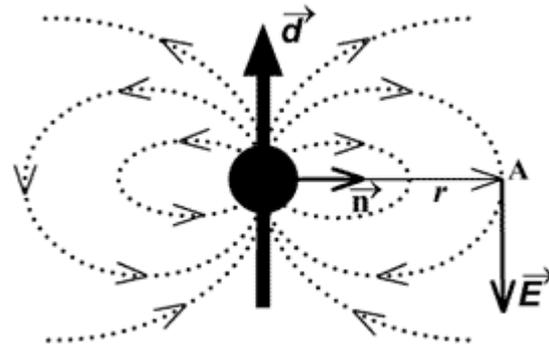
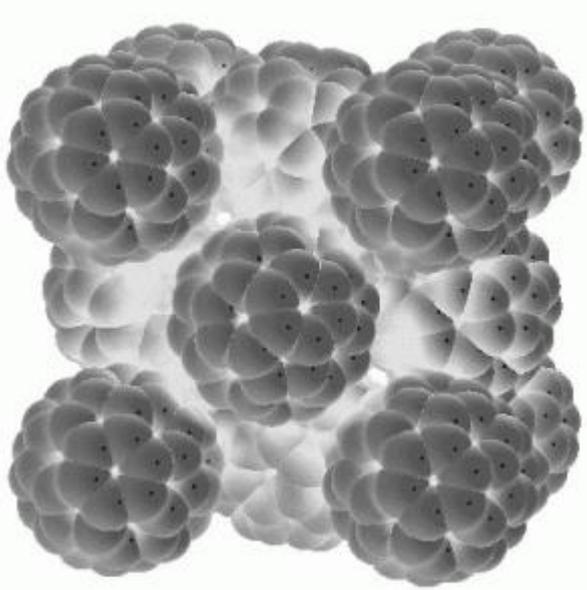
В узлах кристаллической решётки расположены положительные ионы металла. Между ними беспорядочно, подобно молекулам газа, движутся электроны проводимости.



Cu, Ag ...

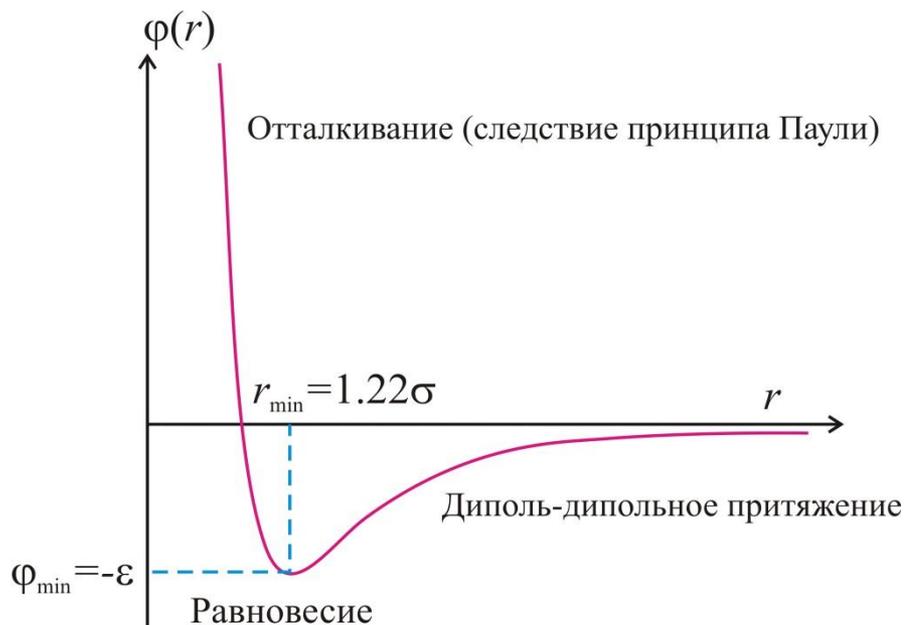
Молекулярная связь

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 (Ar , Kr , CH_4 , O_2 , H_2 , C_2H_4 и т.д.). Для металлов не подходит.

Агрегатные состояния вещества



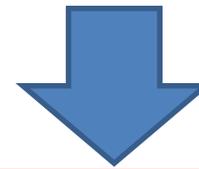
Методы описания молекулярной физики

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 , μ , которые определяют экспериментально.



Статистический

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

Динамический

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⁻¹

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

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 $k_B = 1,380\,648\,52(79) \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1}$).

(Универсальная газовая постоянная

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

$$R = k_B N_A$$