

Молекулярная физика






Лекция 1



Слайды лекций по механике



Материалы лекций

	Лекции по механике Лектор Сыромятников А. Г.	2023
	Лекции по молекулярной физике Лектор Клавсюк А. Л.	2023
	力學講座 Лектор Клавсюк А. Л.	2023
	Лекции по молекулярной физике Лектор Клавсюк А. Л.	2022
	Лекции по механике	2020

<http://genphys.phys.msu.ru/rus/sci/nanogroup/lectures.html>

Слайды лекций по механике



Лекции по механике

1. Вопросы к коллоквиуму

2. Предмет механики.
Кинематика точки

 [Скачать](#)

3. Динамика материальной точки. Индивидуальные свойства сил

 [Скачать](#)

4. Закон сохранения импульса.
Реактивная сила

 [Скачать](#)

5. Работа. Закон сохранения энергии

 [Скачать](#)

6. Неинерциальные системы отсчета

 [Скачать](#)

7. Релятивистская механика

 [Скачать](#)

8. Кинематика твёрдого тела

 [Скачать](#)

9. Динамика твёрдого тела.
Закон сохранения момента импульса

 [Скачать](#)

10. Динамика твёрдого тела

11. Динамика твёрдого тела

12. Свободные незатухающие и затухающие колебания

 [Скачать](#)

<http://genphys.phys.msu.ru/rus/sci/nanogroup/lectures.html>

Дела текущие

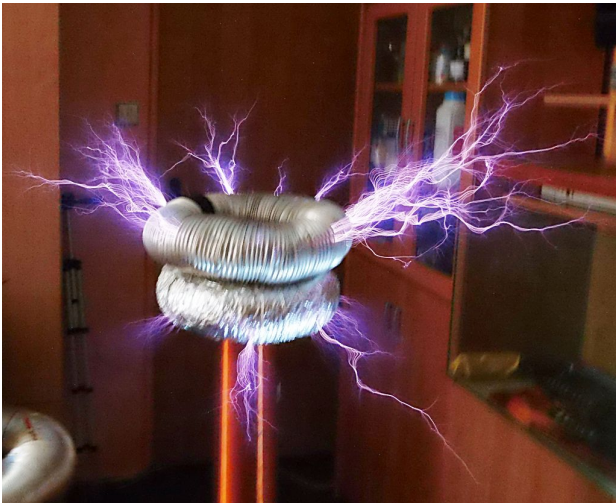
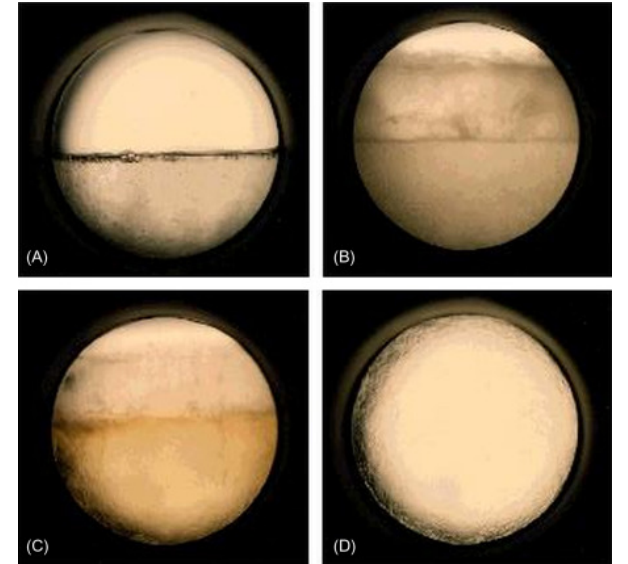
Если кто-либо не был на первой паре –
была контрольная работа!

В среду 10 апреля – коллоквиум!



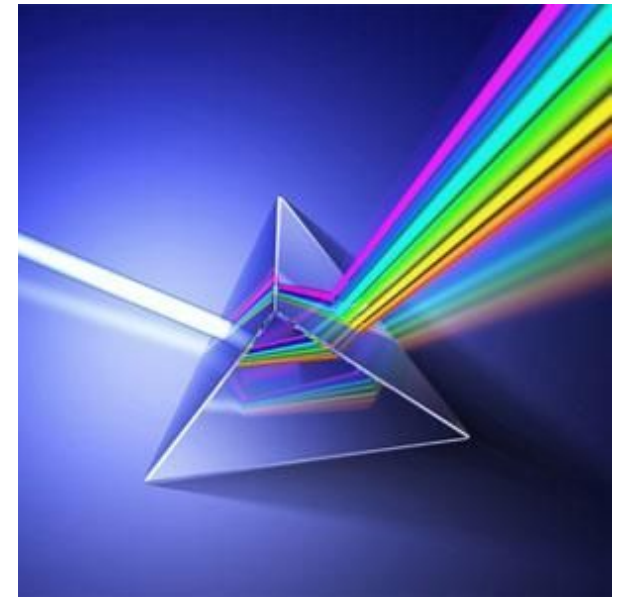
Механика

**Молекулярная физика и
термодинамика**



Электричество и магнетизм

Оптика



Содержание курса Молекулярная физика

- Термодинамические системы и их основные характеристики
- Статистическое описание. Пространственное распределение частиц
- Статистические распределения по скоростям и энергиям
- Термодинамическое описание. нулевое и первое начала термодинамики. Теплоемкость
- Второе и третье начала термодинамики. Термодинамические потенциалы
- Реальные газы, жидкости и твердые тела
- Фазовые превращения
- Явления переноса

Литература

1. В.А. Алешкевич. **Молекулярная физика**. 2016. (Университетский курс общей физики).
2. В.А. Караваев, А.И. Осипов, А.В. Уваров.
Молекулярная физика и термодинамика. Лекции. М.:МГУ 2022.
3. А.К. Кикоин, И.К. Кикоин. **Молекулярная физика**. М.: Наука, 1976.
4. Д.В. Сивухин. **Общий курс физики. Т. 2. Термодинамика и молекулярная физика**. М.: Наука, 1990.
5. А.Н. Матвеев. **Молекулярная физика**. М.: Высшая школа, 1987.
6. Г.А. Миронова, Н.Н. Брандт, О.Н. Васильева, А.М. Салецкий.
Молекулярная физика и термодинамика. Методика решения задач. М.:МГУ 2016.
7. О.Н. Васильева, А.М. Салецкий.
Молекулярная физика и термодинамика. Сборник задач. М.:МГУ 2018.
8. И.Е. Иродов. **Задачи по общей физике**. 2006.
9. **Общий физический практикум. Механика**. Под ред. А.Н. Матвеева, Д.Ф. Киселева. 1983.
10. Р. Фейнман и др. **Фейнмановские лекции по физике**. 1977.
11. <http://genphys.phys.msu.ru/>
12. <https://teach-in.ru/>

План лекции

- Предмет молекулярной физики.
- Основные положения молекулярно-кинетической теории.
- Понятия равновесного состояния и температуры.
- Статистический подход к описанию молекулярных явлений. Статистические закономерности.
- Основные понятия теории вероятностей.
- Микро- и макросостояния атомно-молекулярной системы. Биномиальное распределение.
- Предельные случаи биномиального распределения. Примеры их применения.

Границы применимости моделей МТ и АТТ

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 моделей МТ и АТТ

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.

- Предметом **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.

Молекулярно-кинетическая теория

Основные положения:

- Все тела состоят из большого числа обособленных частиц: атомов и молекул.
- Эти частицы находятся в непрерывном хаотическом движении, интенсивность которого зависит от температуры.
- Эти частицы взаимодействуют друг с другом: есть силы притяжения и отталкивания.

Размеры атомов и молекул

Насколько большие системы мы будем рассматривать?

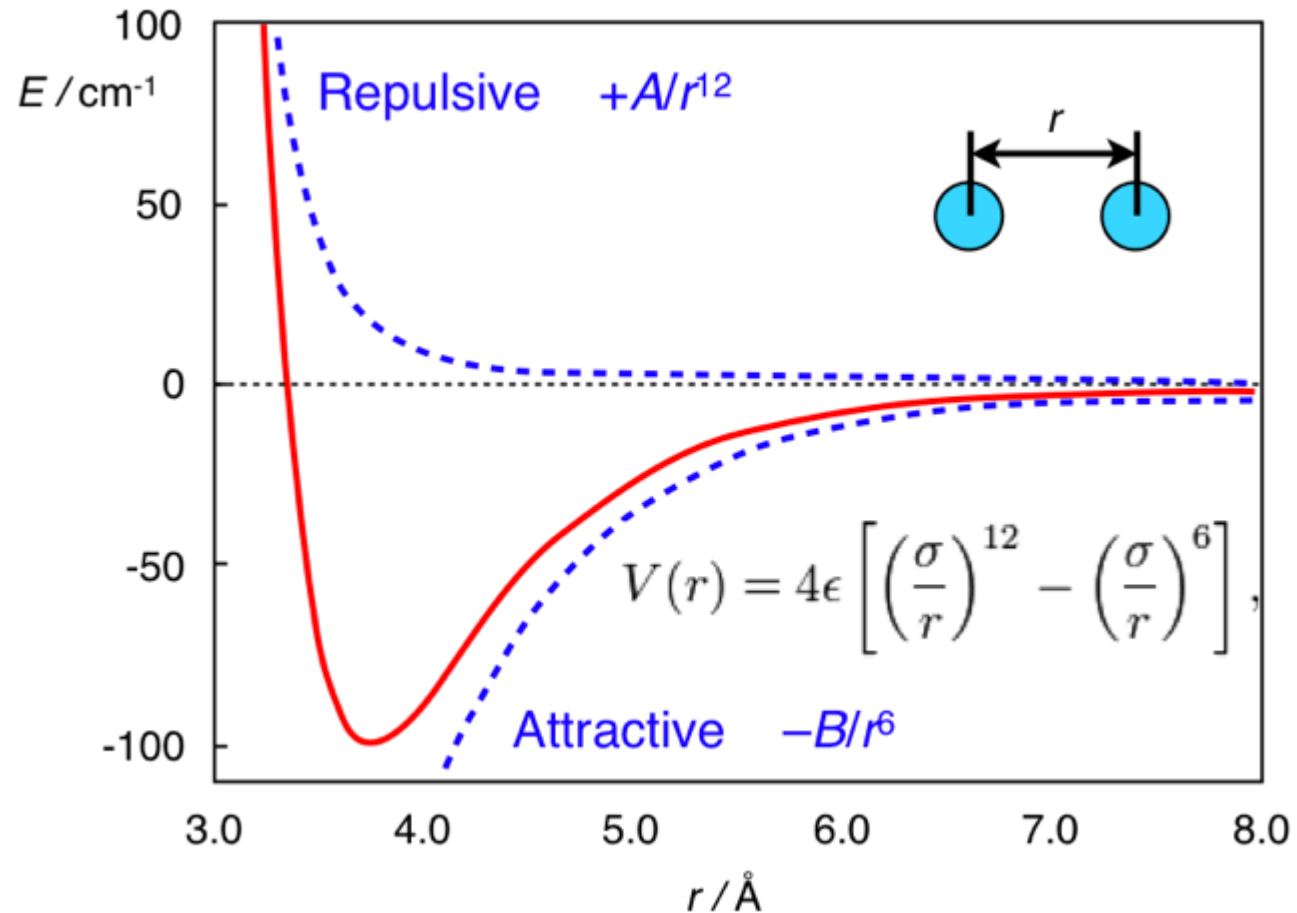
Типичный размер – 1 моль, то есть N_A частиц.

Постоянная Авогадро $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹.

Для определения строения молекул вещества используются различные 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

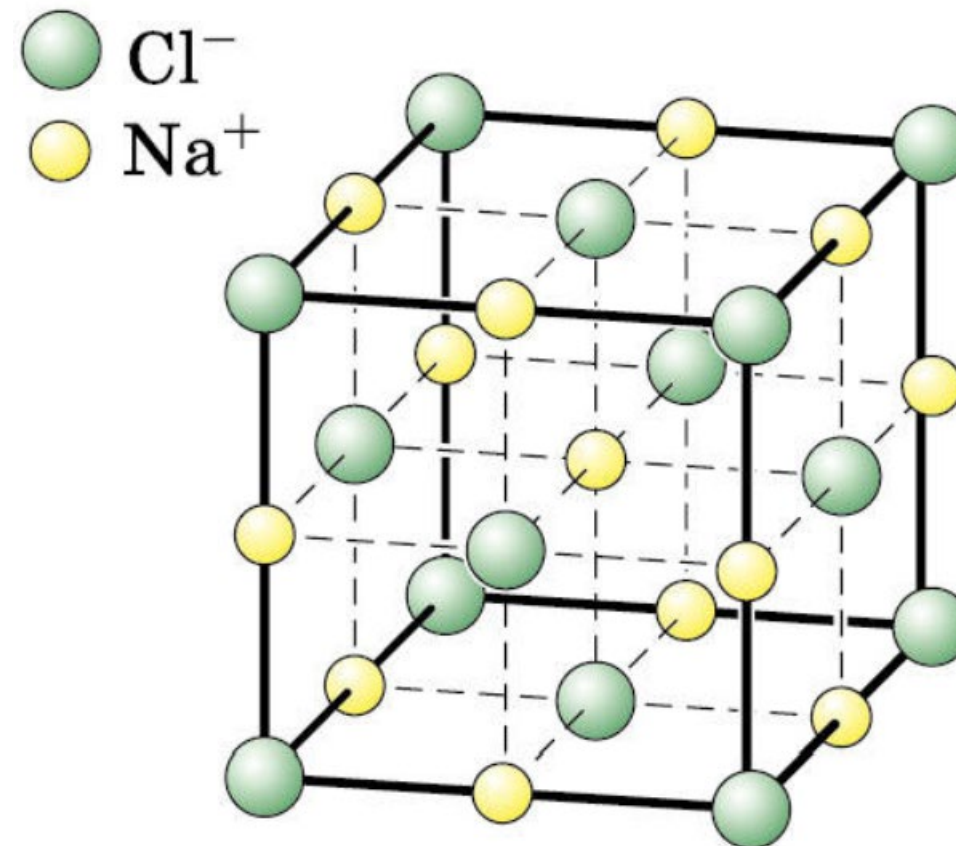
- Металлическая связь
- Ковалентная связь
- Ионная связь
- Ван-дер-ваальсова (межмолекулярная) связь

Ионная связь

Ионная связь — сильная химическая связь, возникающая в результате электростатического притяжения катионов и анионов.

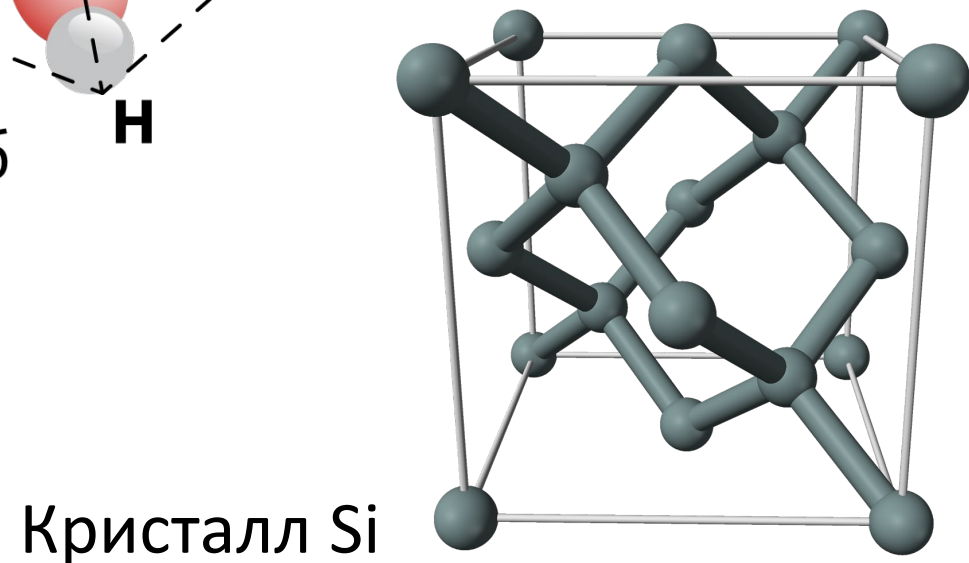
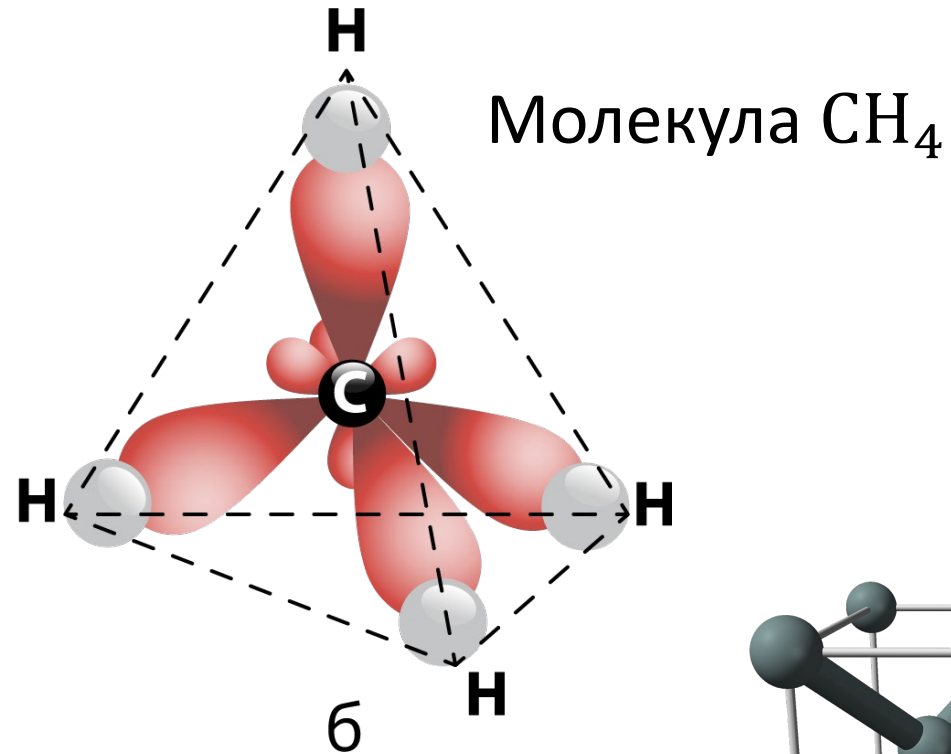
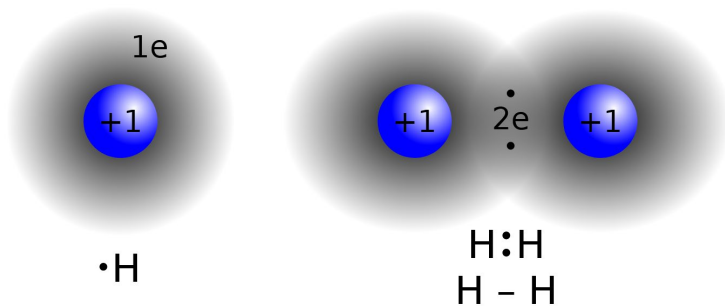
В узлах решетки оказываются противоположно заряженные атомы.

Пример — поваренная соль NaCl.



Ковалентная связь

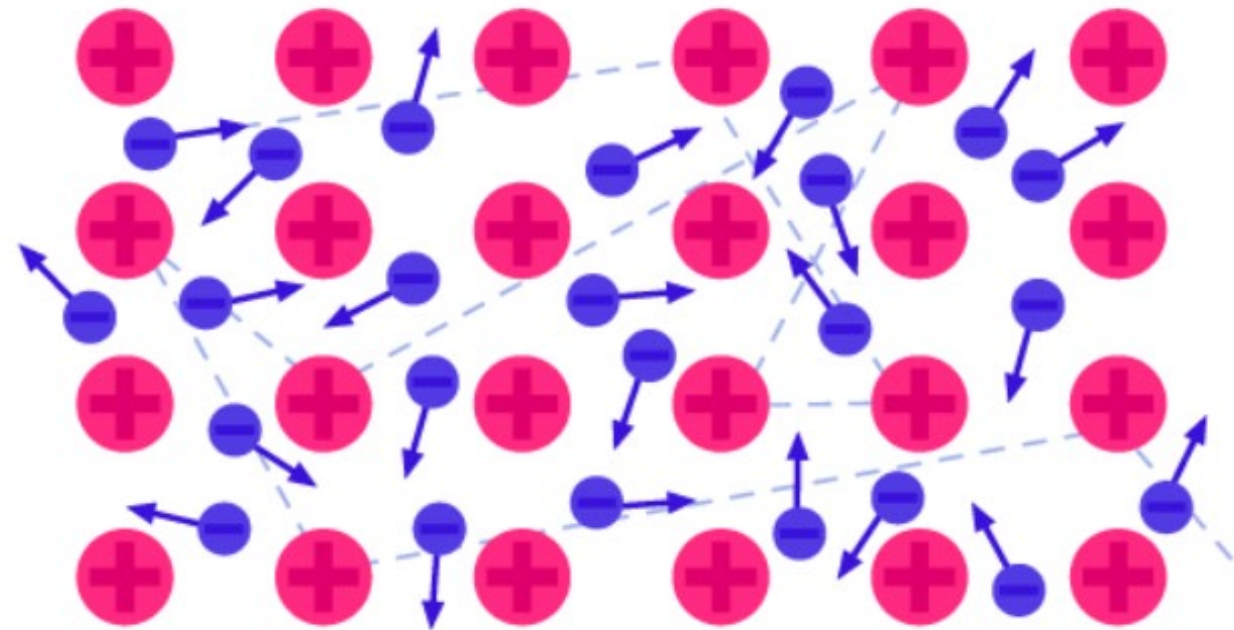
Нейтральные атомы размещены в узлах кристаллической решётки. Связь образуется направленными валентными электронными облаками. Связь, объединяющая в кристалле нейтральные атомы, называется **ковалентной**.



Металлическая связь

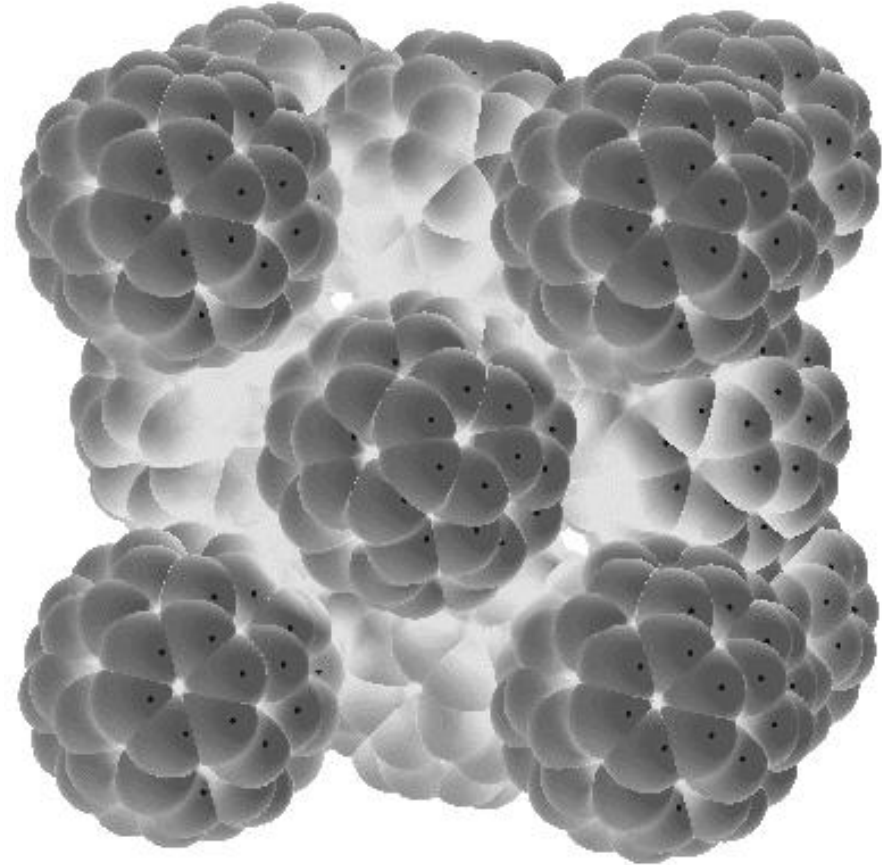
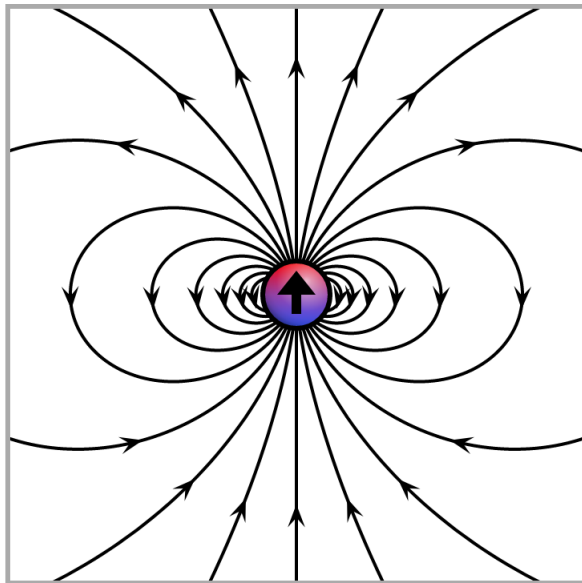
В узлах кристаллической решётки расположены положительные ионы металла. Между ними беспорядочно, подобно молекулам газа, движутся электроны проводимости.

Пример: Cu, Ag, Au, ...



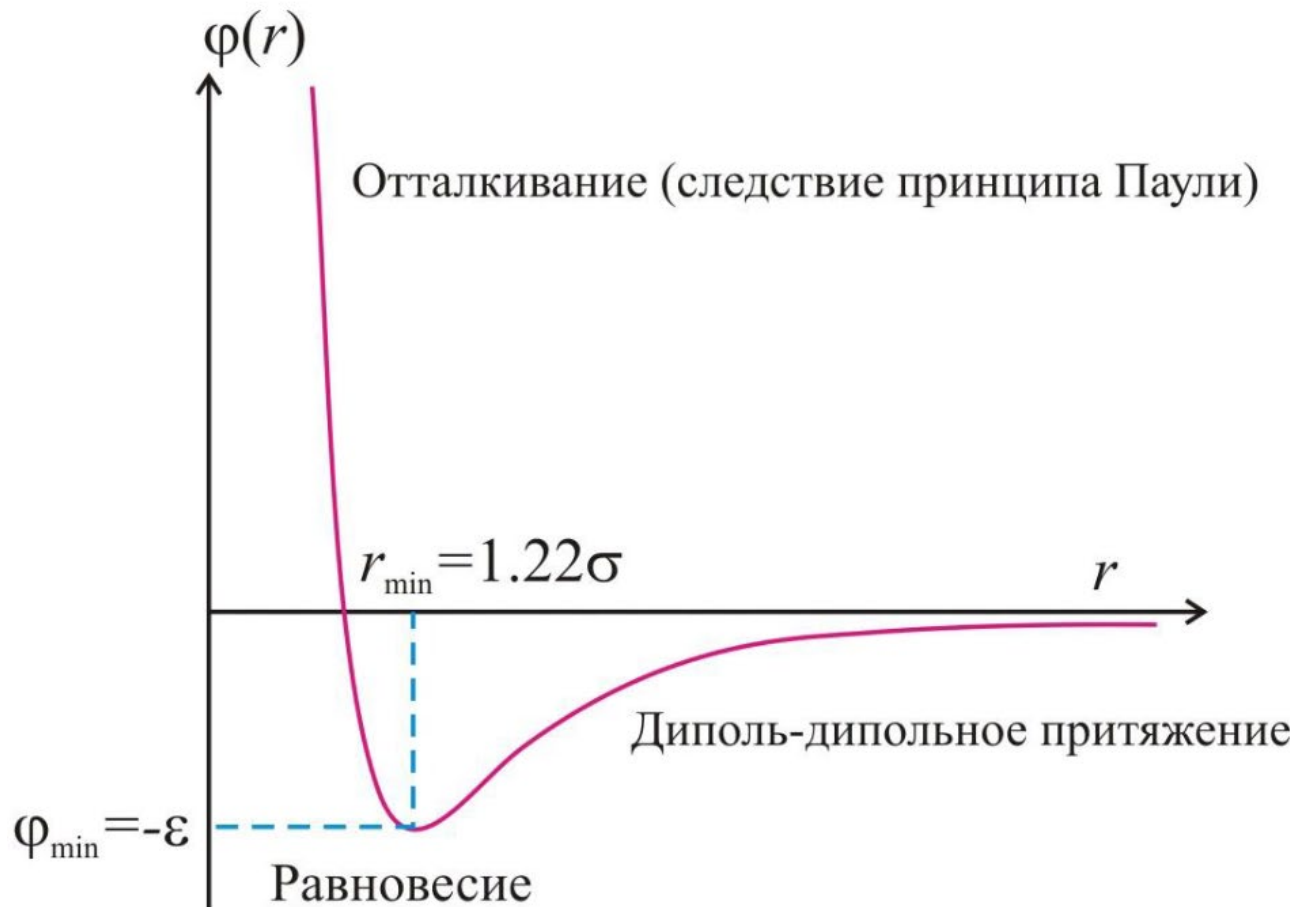
Молекулярная связь

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



Кристалл фуллерита

Потенциал Леннарда-Джонса

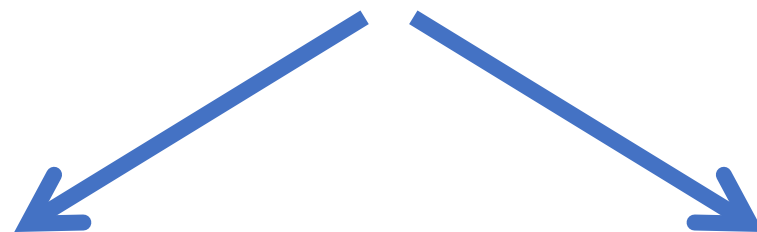


Потенциал Леннарда-Джонса дает хорошее описание ван-дер-ваальсовских взаимодействий между атомами инертных газов и молекулами (Ar , Kr , CH_4 , O_2 , H_2 , C_2H_4 и т.д.). Для металлов **не подходит**.

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

Два подхода

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



$$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$$

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.

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

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 **уравнением Клапейрона-Менделеева**.

$$pV = \nu RT$$
$$pV = Nk_B T$$

$$R = k_B N_A$$

$$k_B = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$$

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

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

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 $N = 6,02 \cdot 10^{23}$ частиц характеризуется его координатами и скоростями. Все эти $6N$ чисел следует рассматривать как случайные величины, они будут характеризовать микросостояние системы.

Макросостояние статистической системы

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.

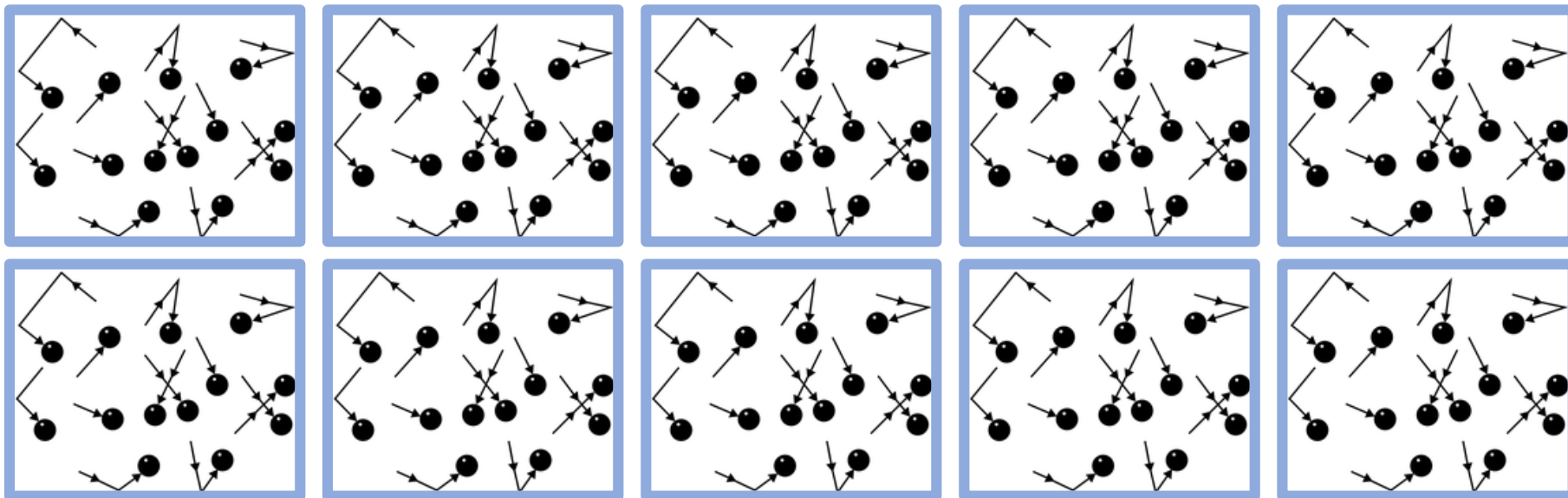
Микроскопическое описание		t (число «решек»)	$\Gamma(n, t)$	$P(n, t)$
№ микро-состояния s	Доступные микросостояния			
1	<i>o o o o</i>	0	$\Gamma(4, 0) = C_4^0 = 1$	$1/16 = 0,0625$
2	<i>r o o o</i>	1	$\Gamma(4, 1) = C_4^1 = 4$	$4/16 = 0,25$
3	<i>o r o o</i>			
4	<i>o o r o</i>			
5	<i>o o o r</i>			
6	<i>r r o o</i>	2	$\Gamma(4, 2) = C_4^2 = 6$	$6/16 = 0,375$
7	<i>r o r o</i>			
8	<i>r o o r</i>			
9	<i>o r r o</i>			
10	<i>o r o r</i>			
11	<i>o o r r</i>			
12	<i>r r r o</i>	3	$\Gamma(4, 3) = C_4^3 = 4$	$4/16 = 0,25$
13	<i>r r o r</i>			
14	<i>r o r r</i>			
15	<i>o r r r</i>			
16	<i>r r r r</i>	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 Γ_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 Γ_0 доступных микросостояний системы:

$$P(n, m) = \Gamma(n, m)/\Gamma_0.$$

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



Основные понятия теории вероятностей

Условие нормировки

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

Математическое ожидание или среднее значение



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

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 исключающие**

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

Умножение вероятностей

Рассмотрим теперь, как рассчитывается вероятность $P(AB)$ одновременного наступления событий **как A так и B** . 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

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 .

Условие нормировки для функции плотности вероятности

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

Непрерывная случайная величина

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**

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

Дисперсия

Дисперсия σ^2 характеризует разброс случайной величины около среднего значения. Она определяется как среднее значение квадрата отклонения величины от ее среднего значения.

$$\sigma^2 = \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle = \langle \xi^2 - 2\xi \langle \xi \rangle + \langle \xi \rangle^2 \rangle = \langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2$$

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

Для дисперсии дискретной случайной величины

$$\sigma^2 = \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle = \sum_i^n (\xi_i - \langle \xi \rangle)^2 P_i$$

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.

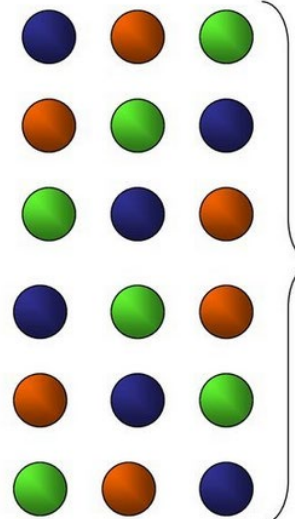
$$A_n^m = \frac{P_n}{P_{n-m}} = \frac{n!}{(n-m)!}$$

Элементы комбинаторики

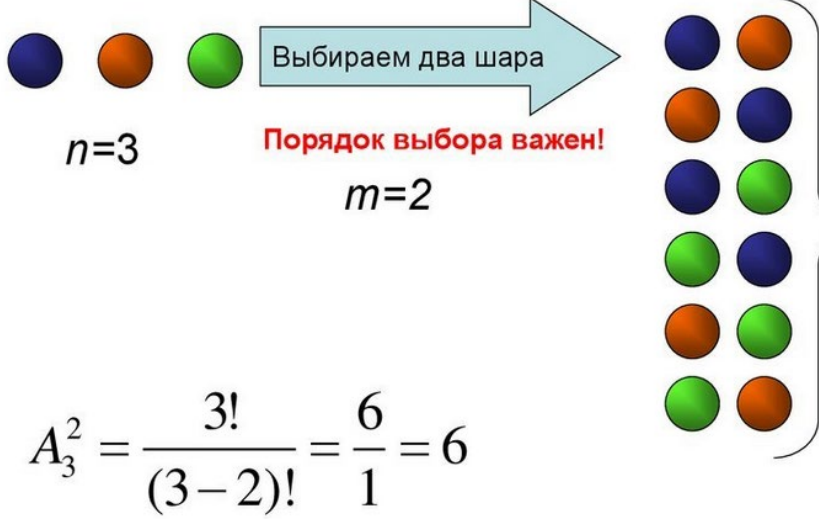
Число сочетаний из n элементов по m C_n^m – число способов, которыми можно выбрать m элементов из данного множества, содержащего n одинаковых (неразличимых) элементов.

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

Примеры




6 различных перестановок

$$n = 3$$
$$P_3 = 1 \cdot 2 \cdot 3 = 6$$


Выбираем два шара
Порядок выбора важен!

$$n=3$$
$$m=2$$
$$A_3^2 = \frac{3!}{(3-2)!} = \frac{6}{1} = 6$$

6 различных размещений



Выбираем два шара
Порядок выбора не важен!

$$n=3$$
$$m=2$$
$$C_3^2 = \frac{3!}{2!(3-2)!} = \frac{6}{2} = 3$$

3 сочетания

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 одна частица находится в благоприятном состоянии.

$q = 1 - p$ – вероятность, с которой каждая одна частица находится в неблагоприятном состоянии (то есть 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 1 раз вероятность выпадения решки $p = 1/2$. Тогда при бросании $n = 10$ раз вероятность того, что выпадут две решки ($m = 2$), равна

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

Предельные формы биномиального распределения

При выполнении некоторых условий биномиальное распределение переходит в одну из своих предельных форм:

- Распределение Пуассона
- Распределение Гаусса (нормальное распределение)

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. $np = \text{const.}$ ($\langle m \rangle = np$)

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

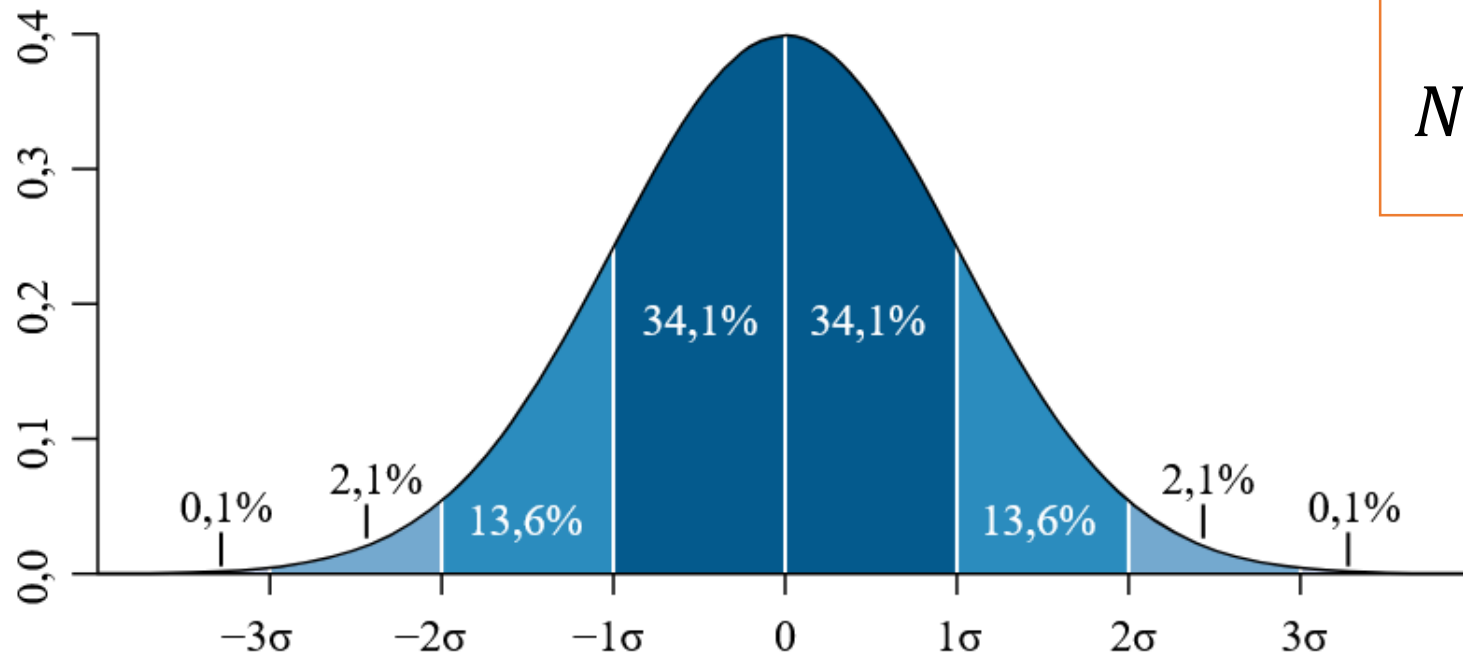
$$(p + q)^n = \sum_m^n C_n(m) p^m q^{n-m}$$

Например, представим себе, что на 100 монет приходится одна юбилейная. Какова вероятность того, что если взять 200 монет, то две из них окажутся юбилейными?

$$P(2) = \frac{\langle 2 \rangle^2}{2!} e^{-\langle 2 \rangle} = 0,27$$

Нормальное распределение

1. Число частиц (случайных величин) $n \gg 1$. В пределе $n \rightarrow \infty$.
2. t близко к $\langle t \rangle$ (на величину порядка стандартного отклонения).



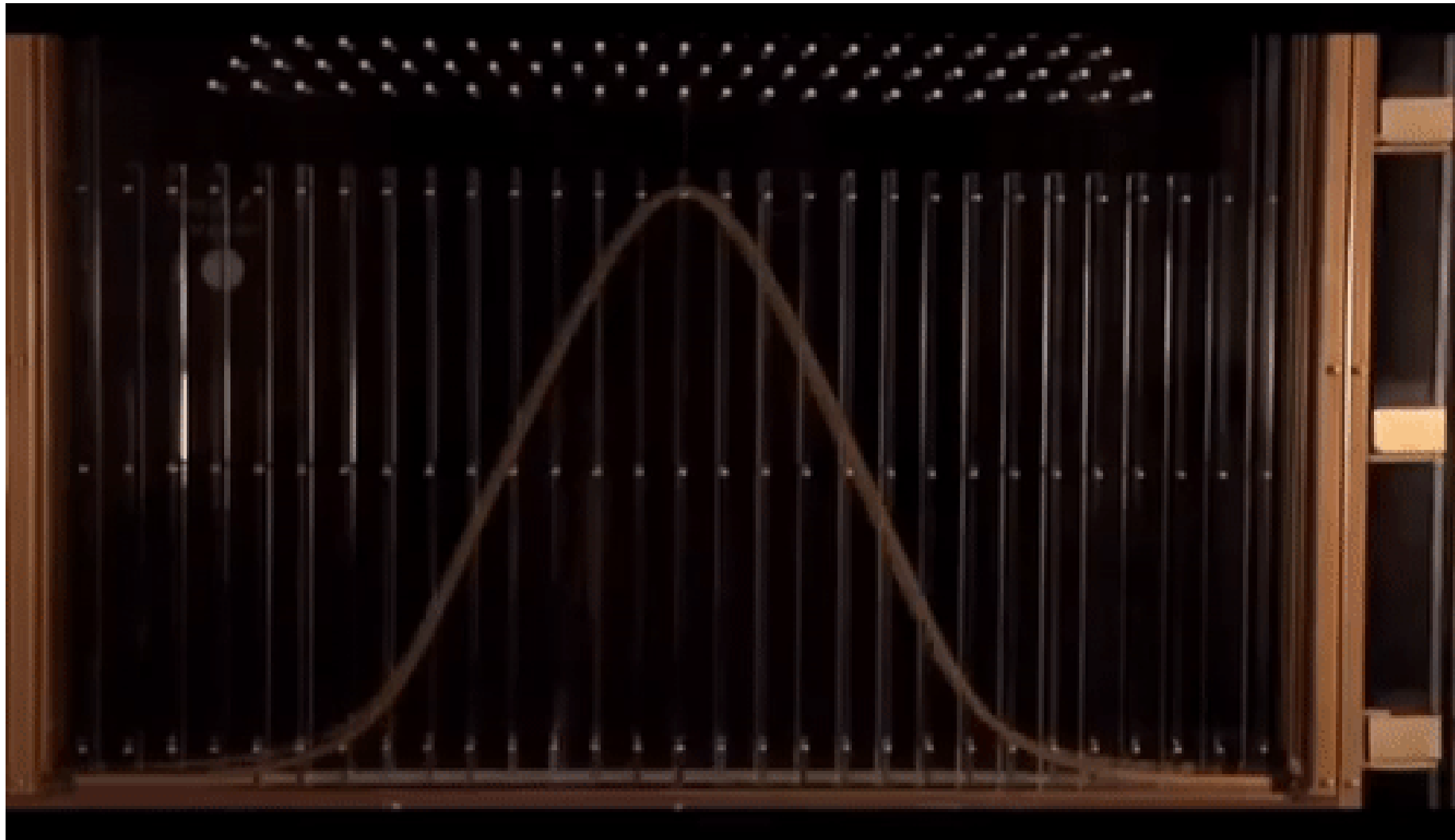
$$N(m, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(m-\langle m \rangle)^2}{2\sigma^2}}$$

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

Доска Гальтона



Доска Гальтона



Постулат равновероятности. Эргодическая гипотеза

Постулат равновероятности. Ни одному из микросостояний, реализующему данное макросостояние нельзя отдать предпочтение: они все «одинаково хороши».

Эргодическая гипотеза. «Среднее по статистическому ансамблю равно среднему по времени.»

Любая из систем ансамбля, эволюционируя достаточно долго, пройдет через все доступные ей микросостояния.

При этом относительное число систем в ансамбле, находящихся в каждом микросостоянии, будет равно относительному времени пребывания любой системы в данном микросостоянии.

$$\langle P \rangle_a = \langle P \rangle_t$$

Распределение Гаусса

