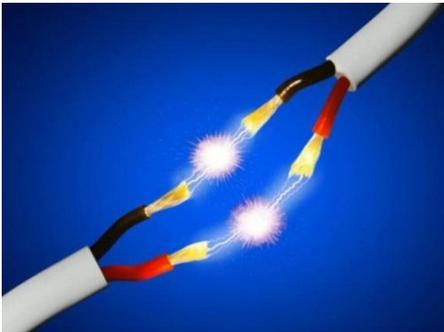


Общая Физика



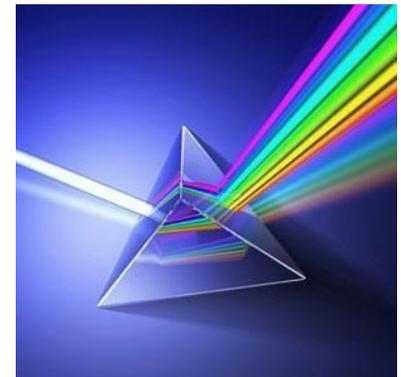
- Механика

- Молекулярная физика
и термодинамика

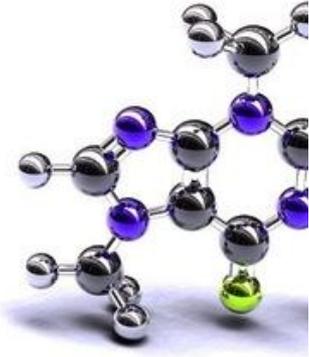


- Электричество
и магнетизм

- Оптика



Общая Физика



- **Молекулярная физика
и термодинамика**

http://genphys.phys.msu.ru/rus/sci/nanogroup/lectures_mol2026.html

План

- Введение
- Основные положения молекулярно-кинетической теории
- Типы химической связи
- Агрегатные состояния вещества. Характерные размеры и массы атомов и молекул
- Моль как единица измерения количества вещества. Постоянная Авогадро
- Статистический и термодинамический подходы к описанию молекулярных явлений в макроскопических системах
- Понятия «равновесное состояние» и «температура»
- Модель идеального газа в МКТ и в термодинамике.

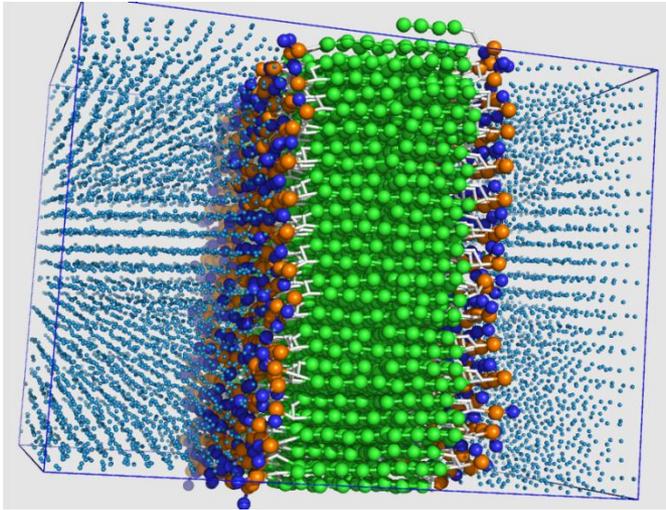
Границы применимости модели материальной точки и абсолютно твердого тела

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.

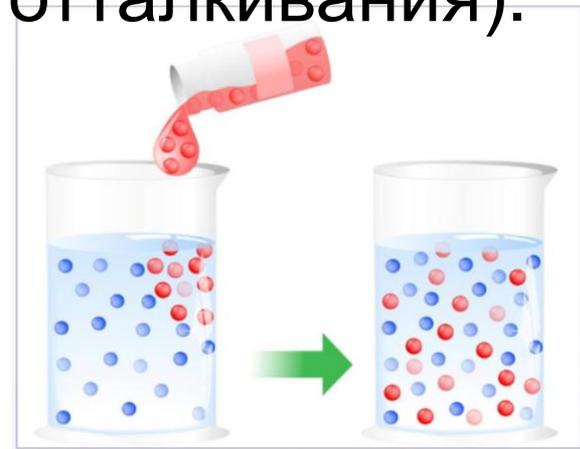
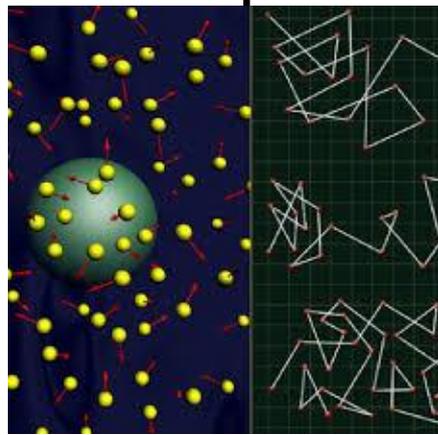
Предмет молекулярной физики

- **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).

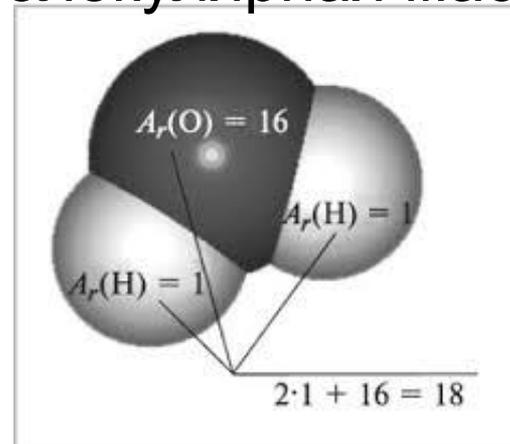


Масса атомов и молекул

Относительная
атомная
масса



Относительная
молекулярная масса



Количество вещества

H_2O	NaCl	H_2SO_4	сахар
$6 \cdot 10^{23}$ молекул воды	$6 \cdot 10^{23}$ молекул соли	$6 \cdot 10^{23}$ молекул кислоты	$6 \cdot 10^{23}$ молекул сахара

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

Размеры атомов и молекул

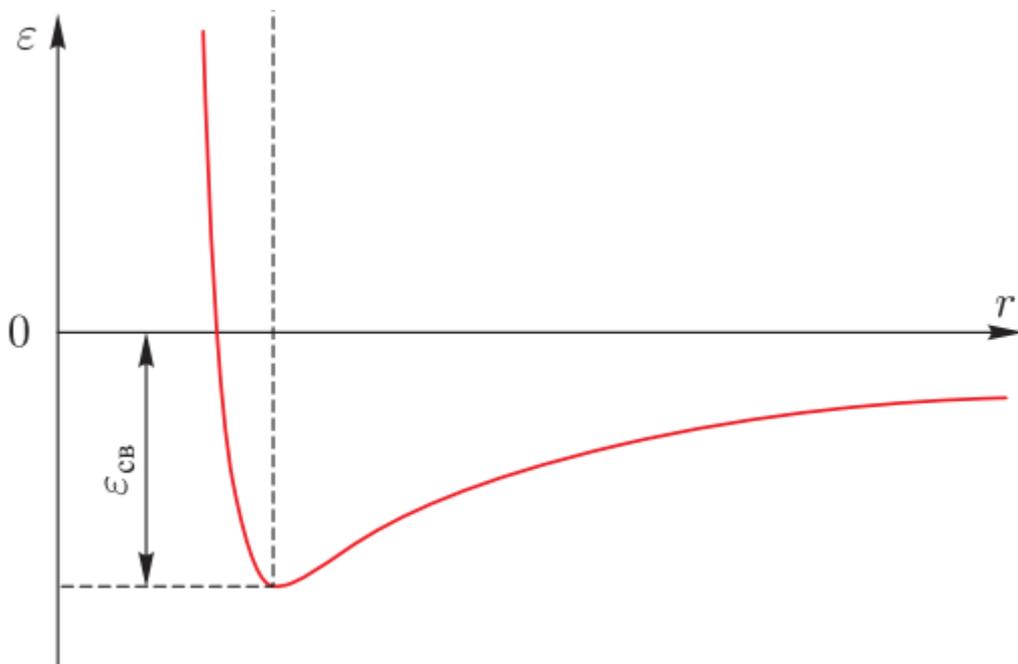
- На сколько большие системы?
- Сколько атомов?

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



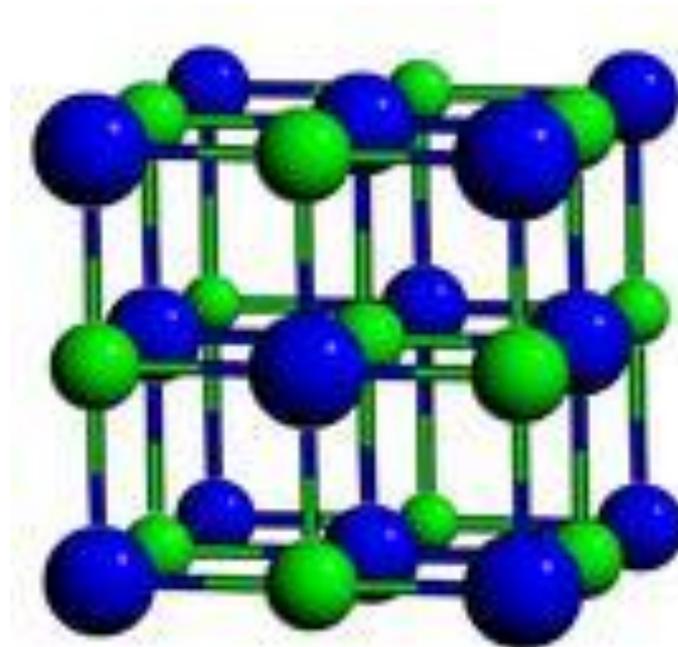
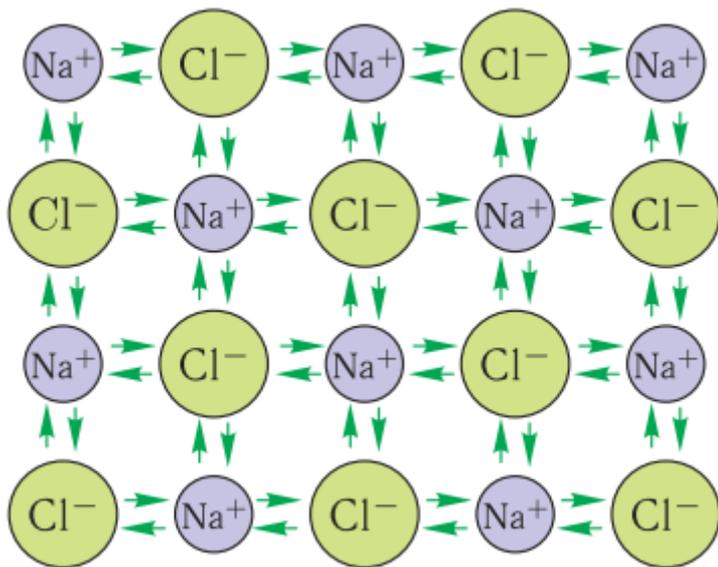
Энергия связи равна работе, которую необходимо затратить, чтобы развести атомы в молекуле на бесконечно большое расстояние друг от друга.

Типы химической связи

- Ионная
- Ковалентная
- Металлическая
- Молекулярная связь

Ионная связь

В узлах кристаллической решётки помещаются положительно и отрицательно заряженные ионы.

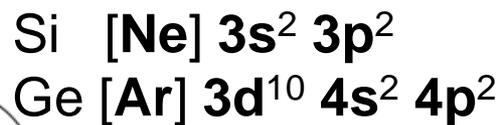
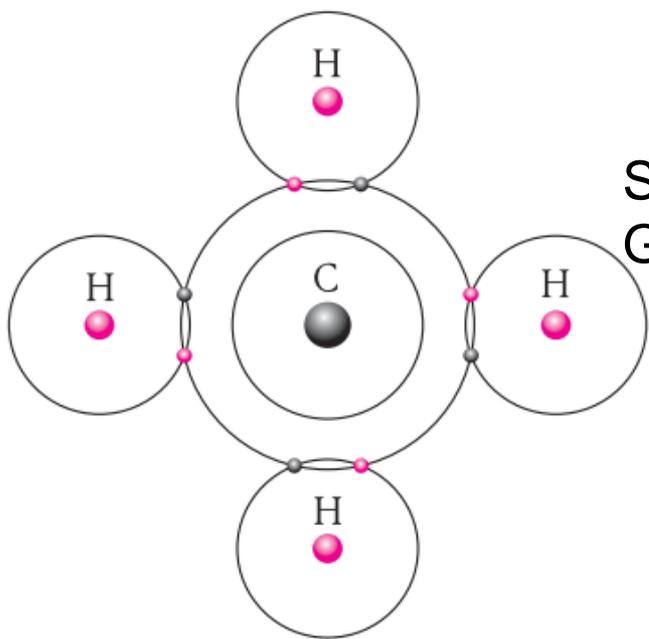


NaCl

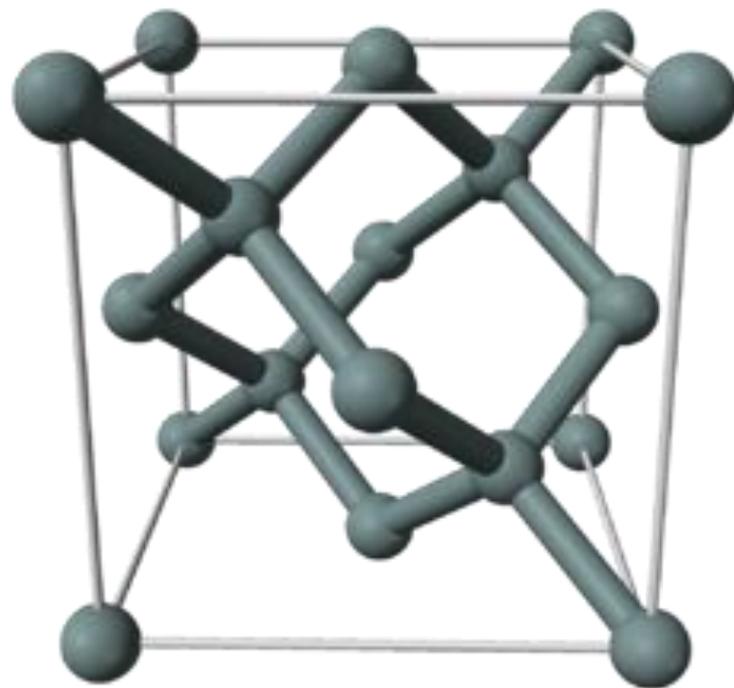
(Плотность $2,165 \text{ г/см}^3$, Температура плавления $+800,8 \text{ }^\circ\text{C}$)

Ковалентная связь

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

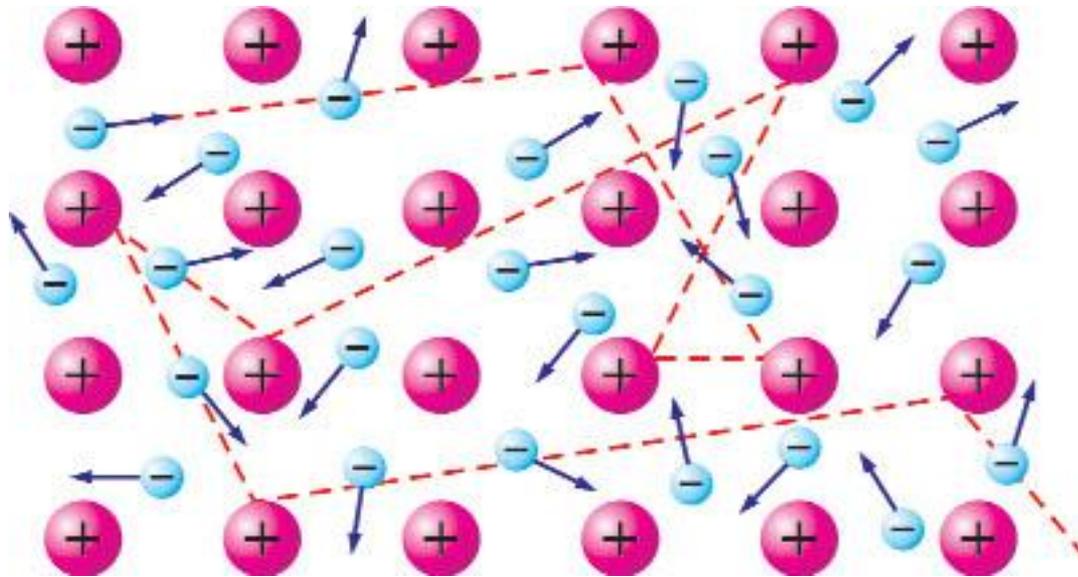


Si, Ge ...



Металлическая связь

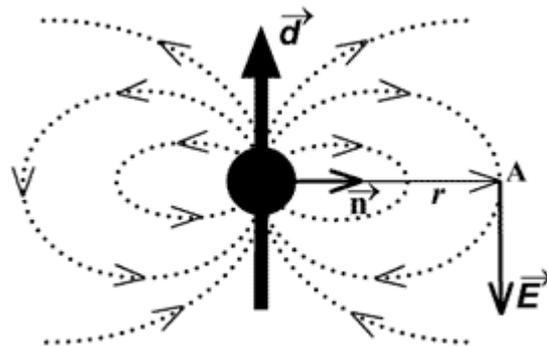
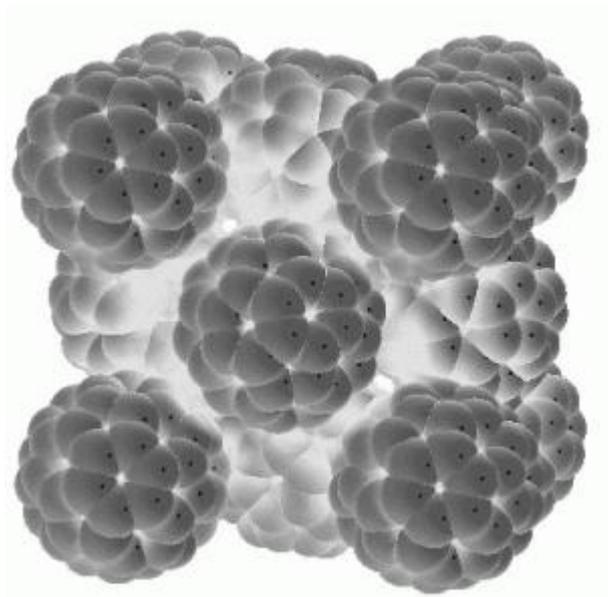
В узлах кристаллической решётки расположены положительные ионы металла. Между ними беспорядочно, подобно молекулам газа, движутся электроны проводимости.



Cu, Ag ...

Молекулярная связь

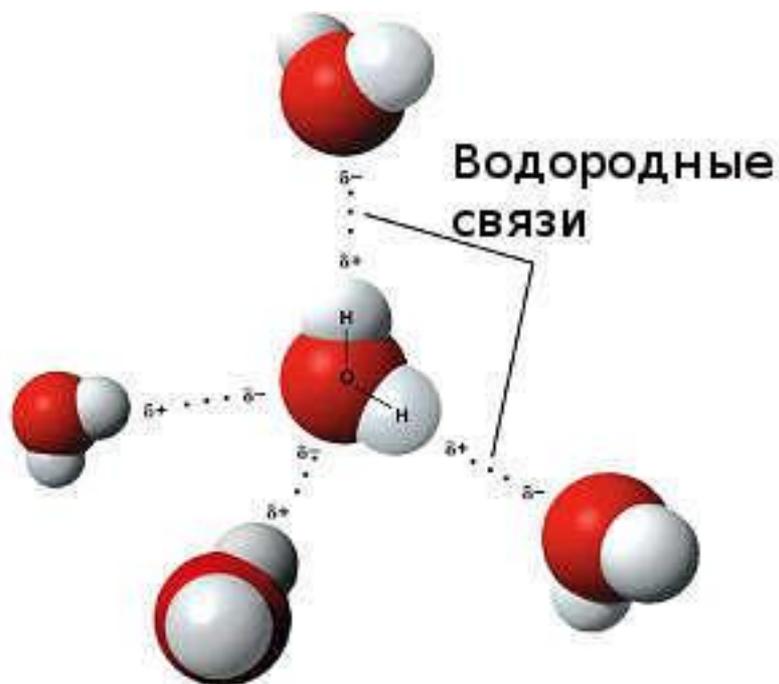
Молекулярный кристалл — кристалл, образованный из молекул. Молекулы связаны между собой слабыми ван-дер-ваальсовыми силами.



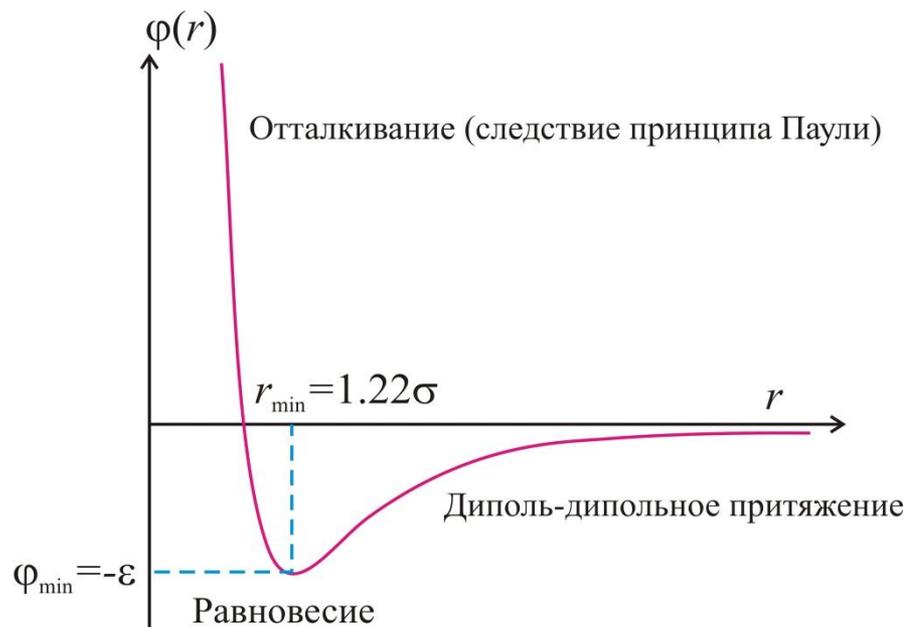
$$E_{\text{дип}} = -\frac{P}{R^3} + \frac{3(P R)R}{R^5}$$

Водородная связь

Водородная связь — особая разновидность молекулярной связи



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



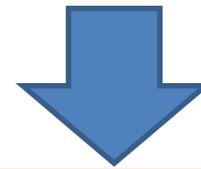
Методы описания молекулярной физики

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

Нулевое начало термодинамики

- **Термодинамическое равновесие** – состояние системы, не изменяющееся во времени и не сопровождающееся переносом через систему энергии, вещества, заряда, импульса и т.п.

Нулевое начало термодинамики

- При термодинамическом равновесии все части системы будут иметь одинаковую температуру.
- Изолированная термодинамическая система с течением времени самопроизвольно переходит в состояние термодинамического равновесия и остаётся в нём сколь угодно долго, если внешние условия сохраняются неизменными.

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

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

$$R = k_B N_A$$