

The background features a 3D perspective of a molecular lattice. It consists of a grid of small, dark blue spheres (atoms) connected by thin, light blue lines (bonds). The grid recedes into the distance, creating a sense of depth. The overall color scheme is a gradient of dark blue.

ОСНОВЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ И ТЕРМОДИНАМИКИ

Молекулярной физикой

называется раздел физики, изучающий физические свойства веществ в различных агрегатных состояниях на основе их микроскопического строения.

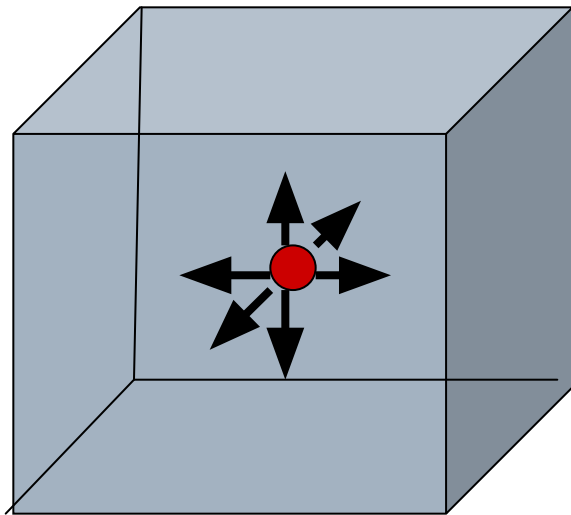


Два метода исследования:

1. молекулярно-кинетический или статистический;
 2. термодинамический.
-

ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ МКТ

Рассмотрим идеальный газ, содержащийся в объёме куба



со стороной Δl .

Масса одной молекулы — m_0 ,

её скорость v ,

количество молекул в объёме Δl^3 — n ;
 $n' = \frac{1}{3} n$.

$$(f' \delta t) = m_0 v_2 \quad m_0 v_1 = -m_0 v - m_0 v = -2 m_0 v.$$

$$f \delta t = 2 m_0 v; \quad f \delta t = F_0 \Delta t = F_0 \cdot 2 \Delta l / v.$$

$$F_0 = m_0 v^2 / \Delta l; \quad p_0 = F_0 / \Delta l^2$$

F_0 — сила, с которой действует одна молекула на стенку;

p_0 — давление со стороны одной молекулы на стенку.

Давление p молекул будет:

$$p = \left(\frac{1}{3}\right) n_0 m_0 \langle v^2 \rangle ,$$

где n_0 - концентрация молекул,
 m_0 - масса одной молекулы,
 $\langle v^2 \rangle$ - квадрат средней квадратичной скорости
молекулы $\langle v_{кв} \rangle$

$$\langle v_{кв} \rangle = \sqrt{\langle v^2 \rangle} .$$

□ Основное уравнение молекулярно-кинетической теории позволяет определить давление газа p на стенки сосуда

- Основное уравнение МКТ можно преобразовать к виду:
-

- $$p = \left(\frac{2}{3}\right)n_0(m_0\langle v^2 \rangle / 2)$$

или

- $$p = \left(\frac{2}{3}\right)n_0 \langle w_{\text{пост}} \rangle$$

где $\langle w_{\text{пост}} \rangle$ - средняя кинетическая энергия поступательного движения одной молекулы идеального газа

Уравнение состояния идеального газа (Уравнение Клапейрона-Менделеева)

$$pV = \frac{m}{\mu} RT$$

где $R = 8,31 \text{ Дж} / (\text{К} \cdot \text{моль})$ - универсальная
газовая постоянная;

m — масса газа;

μ — молярная масса газа

Закон Дальтона

□ Давление газовой смеси равно сумме парциальных давлений газов, составляющих смесь:

$$p = p_1 + p_2 + p_3 + \dots + p_n = \sum p_i$$

Парциальным давлением p_i называется давление, которое оказывал бы компонент смеси, если бы он один занимал весь объем предоставленный смеси.

Распределение Максвелла

- Вид функции распределения молекул идеального газа по скоростям был установлен теоретически Максвеллом в 1860 г.
- Закон Максвелла описывается некоторой функцией $f(v)$, называемой функцией распределения молекул по скоростям.
- Функция $f(v)$ определяет относительное число молекул, скорости которых лежат в единичном интервале скоростей из области от v до $v+dv$:

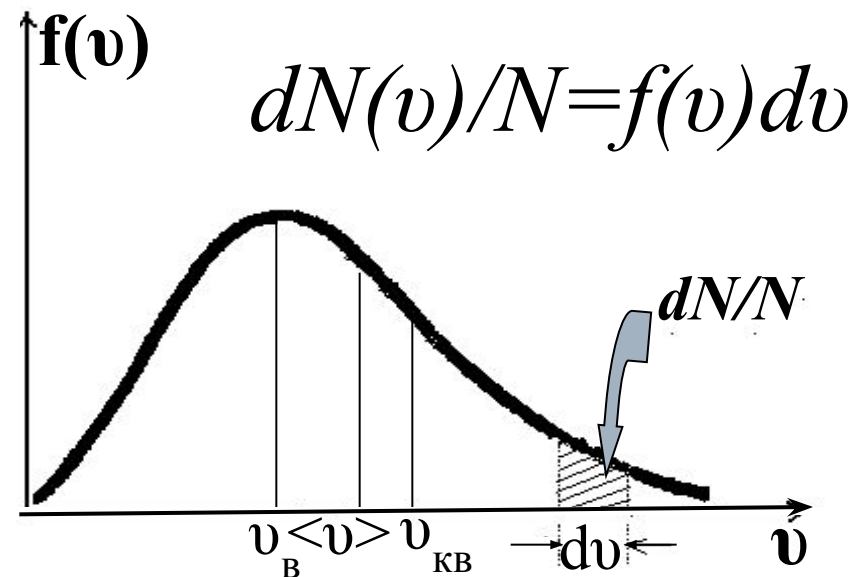
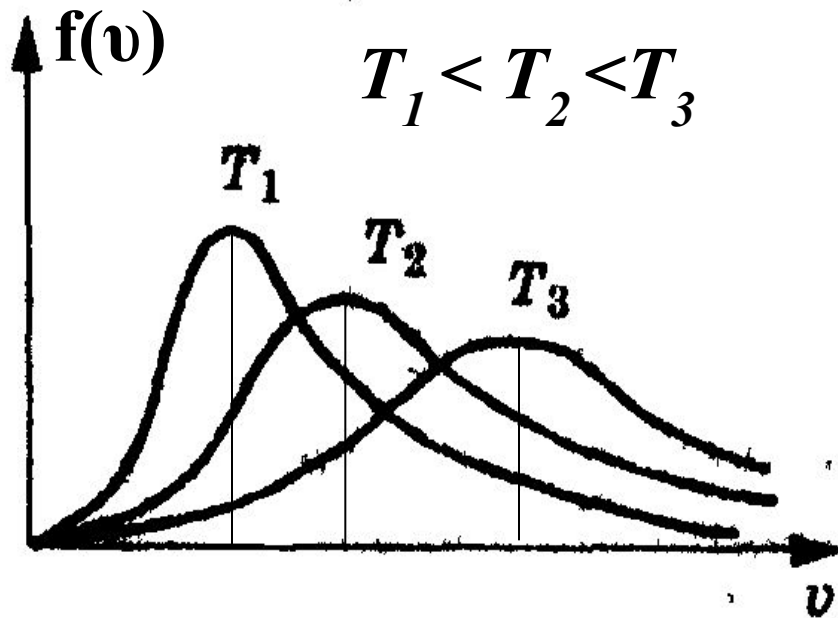
$$f(v) = \frac{dN(v)}{N dv}$$

Функция распределения
Максвелла имеет вид:

$$f(v) = \frac{dN(v)}{Ndv} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m_0}{2kT} \right)^{3/2} v^2 \cdot e^{-m_0 v^2 / (2kT)}$$

- где N - общее число молекул;
- $dN(v)$ - число молекул скорости которых лежат в интервале от v до $v + dv$,
- m_0 - масса молекулы;
- k - постоянная Больцмана;
- T - термодинамическая температура.

График функции распределения Максвелла



$$\int_0^{\infty} f(v) dv = \int_0^{\infty} \frac{dN}{N(v)} = 1$$

К графику функции распределения Максвелла

- Площадь, ограниченная кривой распределения и осью абсцисс, равна единице, так как она численно равна доле молекул, скорости которых имеют всевозможные значения от 0 до ∞ . Кривая несимметрична относительно v_B : правая часть кривой более пологая, чем левая.
-

Наиболее вероятная скорость

- Функция $f(v)$ начинаясь от нуля, достигает максимума при v_B (**наиболее вероятной скорости**)

$$v_B = \sqrt{\frac{2RT}{\mu}} = \sqrt{\frac{2kT}{m_0}}$$

Средняя квадратичная скорость

□ Средняя квадратичная скорость

характеризует среднюю энергию хаотического поступательного движения молекул

$$v_{кв} = \sqrt{\frac{3RT}{\mu}} = \sqrt{\frac{3kT}{m_0}}$$

Средняя арифметическая скорость

□ **Средняя арифметическая скорость**

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8RT}{\pi \mu}} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_0}}$$

Барометрическая формула

- Барометрическая формула определяет закон изменения давления идеального газа в зависимости от высоты над уровнем моря, при условии, что его температура постоянна и не изменяется с высотой, а ускорение свободного падения не зависит от высоты.

$$p = p_0 \exp\left(-\frac{m_0 g h}{kT}\right)$$

- m_0 - масса молекулы газа,
- p_0 - давление на уровне моря,
- k - постоянная Больцмана.

Закон Больцмана

- Подставляя $p = nkT$, $p_0 = n_0 kT$ в барометрическую формулу, получим распределение Больцмана (закон изменения концентрации с высотой в поле силы тяготения).

$$n = n_0 \exp\left(-\frac{m_0 gh}{kT}\right)$$

Распределение Больцмана справедливо

и для газа, находящегося в любом потенциальном поле. При этом величина m_0gh заменяется на W_n - потенциальную энергию молекулы в произвольном силовом поле:

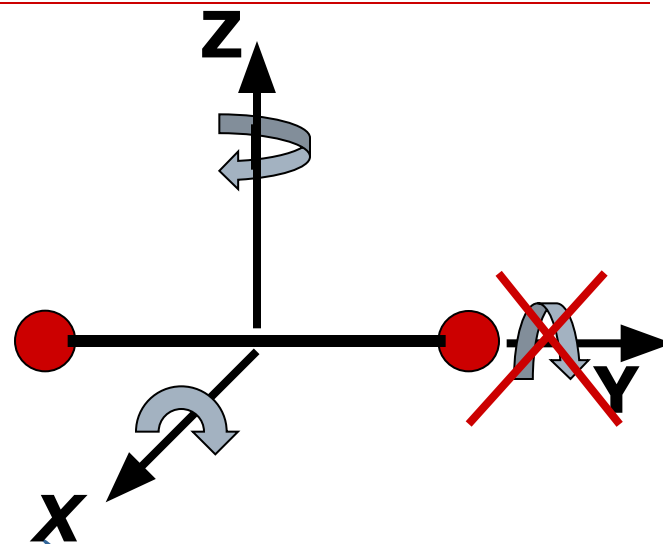
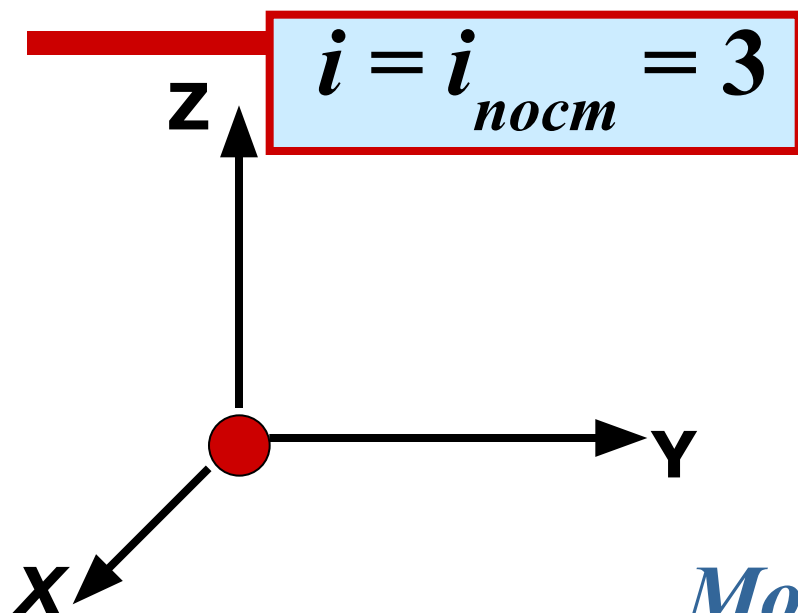
$$n = n_0 \exp\left(-\frac{W_n}{kT}\right)$$

Понятие о степенях свободы

□ *Числом степеней свободы* тела называется наименьшее число *независимых* координат, полностью определяющих положение тела в пространстве.

□ Молекула одноатомного газа

имеет **три** степени свободы
поступательного движения

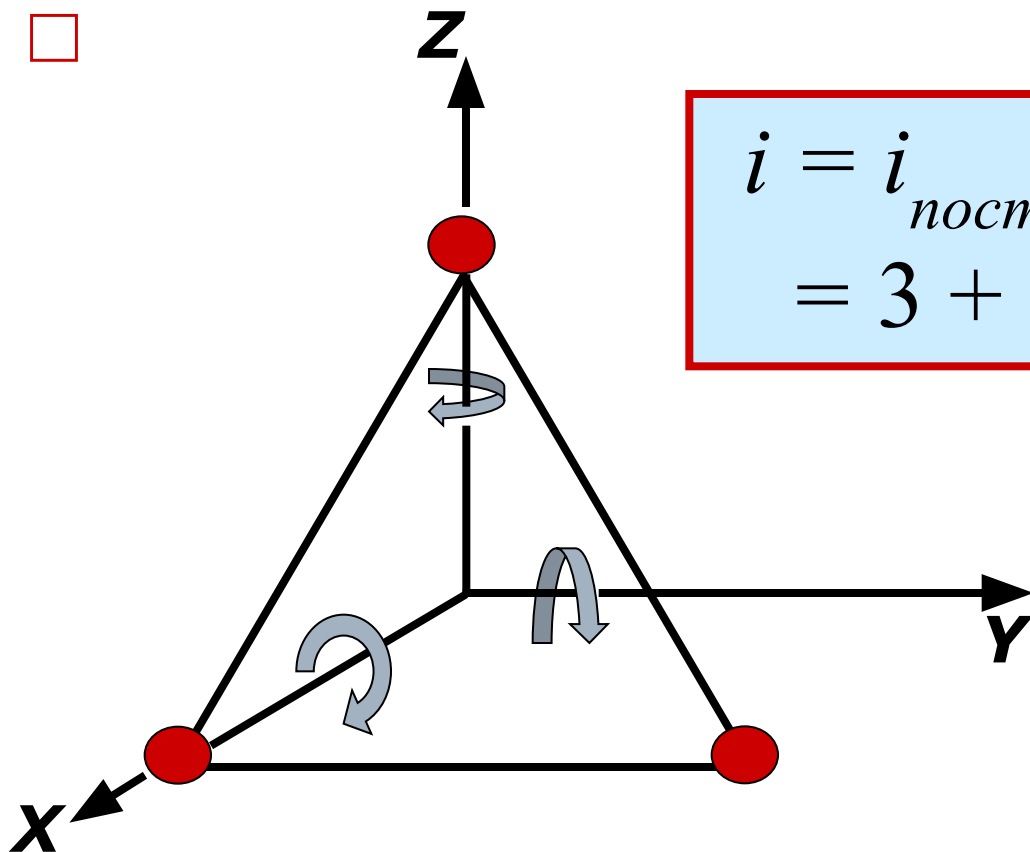


Молекула двухатомного газа

имеет **пять** степеней свобод:
3 – поступательного и 2 – вращательного движений

$$i = i_{\text{пост}} + i_{\text{вращ}} = 3 + 2 = 5$$

Трёх (и более) - атомная молекула



$$i = i_{\text{пост}} + i_{\text{вращ}} = 3 + 3 = 6$$

Закон равнораспределения энергии по степеням свободы (закон Больцмана)

- На каждую степень свободы поступательного и вращательного движений приходится в среднем одинаковая кинетическая энергия, равная $(1/2) kT$, а на каждую колебательную степень свободы - в среднем энергия kT .

$$\langle w_{0 \text{ пост}} \rangle = \langle w_{0 \text{ вращ}} \rangle = (1/2) kT ;$$

$$\langle w_{0 \text{ колебат}} \rangle = kT .$$

Энергия молекулы

- Для поступательного движения одноатомной молекулы:

$$\langle w_{\text{пост}} \rangle = 3/2 (kT)$$

$$\langle w_{0 \text{ пост}} \rangle = 1/2 (kT),$$

где $\langle w_{0 \text{ пост}} \rangle$ - энергия, приходящаяся на одну степень свободы.

- Если у молекулы i степеней свободы, то её средняя энергия:
-

$$\langle w \rangle = i (kT / 2)$$

В общем случае:

$$i = i_{\text{пост}} + i_{\text{вращ}} + i_{\text{колеб}}$$

$$\langle w \rangle = \langle w_{\text{пост}} \rangle + \langle w_{\text{вращ}} \rangle + \langle w_{\text{колеб}} \rangle$$

$$\langle w \rangle = i_{\text{пост}} (kT / 2) + i_{\text{вращ}} (kT / 2) + i_{\text{колеб}} kT$$
