

# Тепловые состояния

Окончание лекции 4

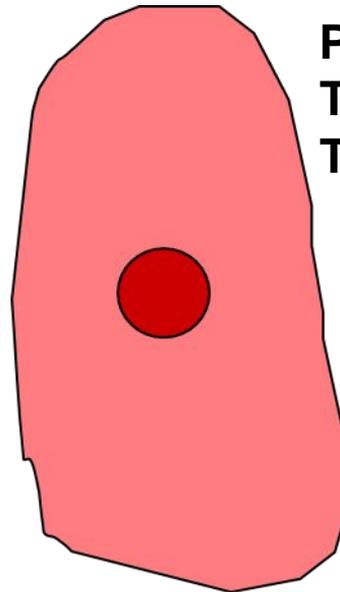
# План темы **Тепловые**

## **СОСТОЯНИЯ**

- Условия применимости модели
  - Макроскопическое тело
  - Термостат
- **Макро-** и **микроскопическое** описание теплового состояния
- Температура
  - Тепло и теплота
  - Состояние теплового равновесия. Нулевое начало термодинамики
  - Термометр
  - Мера средней кинетической энергии движения частиц, из которых состоит тело
- Внутренняя энергия
  - Определение
  - Способы изменения. Первое начало термодинамики
  - Сходства и различия между внутренней энергией, теплотой и работой
- Энтропия
  - Детерминированное и стохастическое движение
  - Мера беспорядочности системы. Формула Больцмана
  - Статистическая формулировка второго начала термодинамики

# Условия применимости модели

Для описания **макроскопических** тел, помещенных в макроскопическое окружение (термостат).



Реальная ситуация  
Теплое окружение ( $T > 0$ )  
Тепловое воздействие

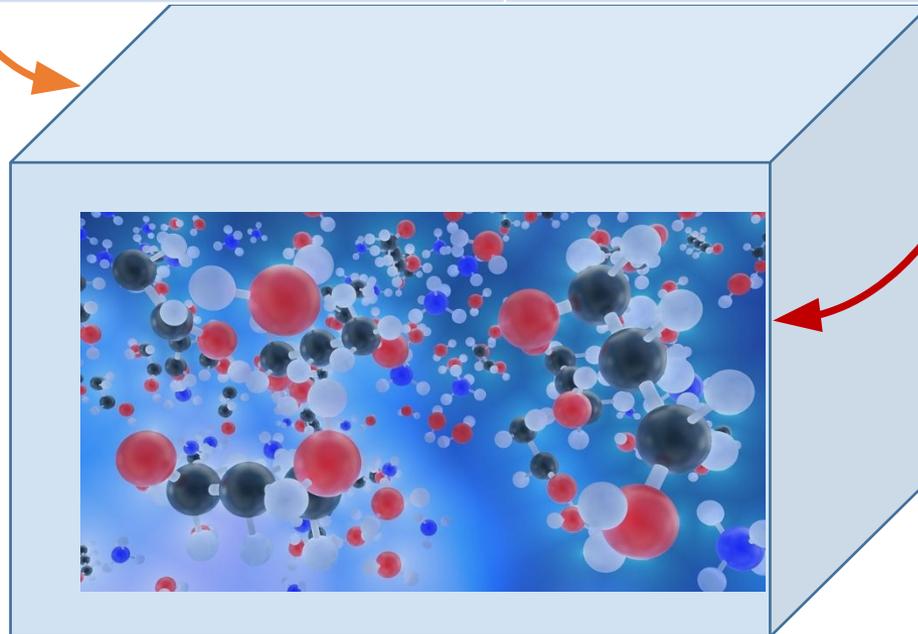
# Макро и микропараметры

**Макропараметры –**  
характеристики состояния без  
учета внутреннего строения тел

Масса тела, объем, плотность,  
температура, внутренняя энергия,  
энтропия и др.

**Микропараметры –**  
характеристики каждой из  
частиц, составляющих тела в  
тепловом состоянии

Молекулярная масса, импульс и  
кинетическая энергия отдельных  
молекул и др.



# Тепловое равновесие (Т.Р.) – фундаментальная модель



- ❑ Только состоянию Т.Р. можно приписать определённую температуру.
- ❑ В состоянии Т.Р. температуры объекта и его окружения равны.

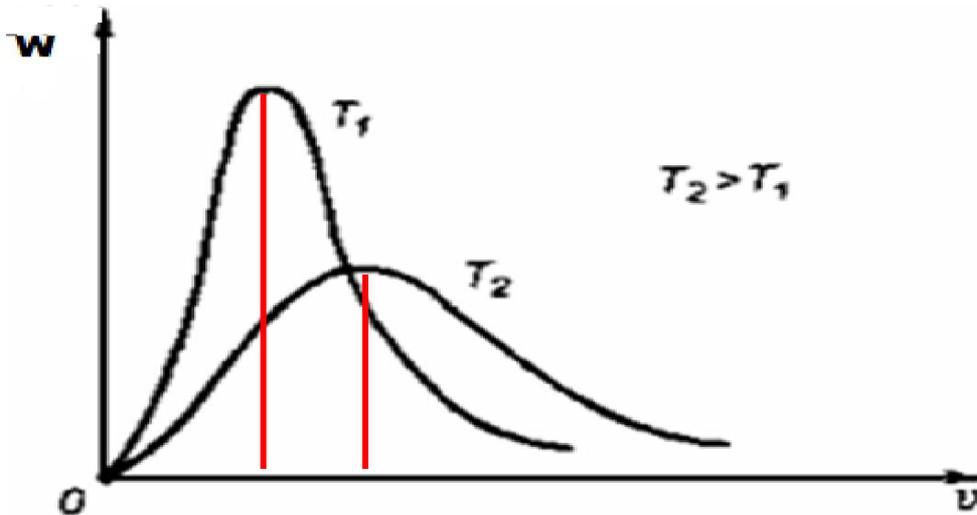
- Это состояние объекта и окружения (термостата), которое система приобретает через определённое время  $t$  после установления теплового контакта
- При прочих неизменных внешних условиях состояние Т.Р. продолжается бесконечно долго.
- Достигнув состояния Т.Р. с окружением (термостатом), объект «забывает» свою предыдущую историю

# Температура (Т)

1. Макроскопический параметр состояния:  
□ **Метка теплового равновесия**
2. Операциональное определение:  
□ **То, что измеряют термометром**

А чем на микроуровне обусловлена та или иная температура?

В Т.Р. скорость и энергия молекул газа может принимать **любые значения**, но с **разной вероятностью** в зависимости от величины  $T$ , а также испытывать **флуктуации относительно своего среднего значения**.



$$T \sim \langle E_{\text{кин}} \rangle$$

Распределение молекул по скоростям при разных температурах. При более высокой температуре наиболее вероятно большее значение скорости.

**Лорд Кельвин (Уильям Томсон) - создатель абсолютной шкалы - 1848г.**



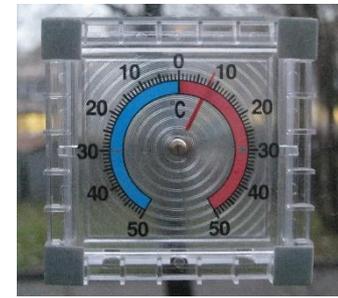
**(1824-1907)**



# Термометр

**Термометрическое тело должно однозначно реагировать на изменение температуры;**

- Термометрические жидкости: ртуть, спирт, вода и т.д. - их объем  $V$  однозначно связан с  $T$ . Для воды вблизи  $-4^{\circ}\text{C}$  функция  $T(V)$  двузначна, поэтому вода не используется как термометрическое тело в этой температурной области.
- На изменение температуры могут однозначно реагировать механические, электрические, магнитные, оптические и другие свойства тел.

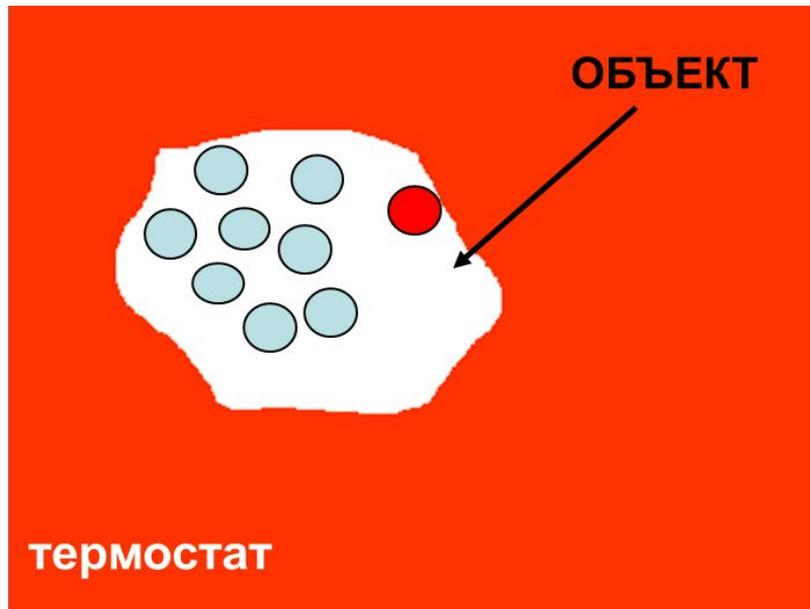


# Итак, температура

- Это метка состояния теплового равновесия, которая, будучи неаддитивной величиной имеет адекватное выражение лишь с помощью порядковых числительных.
- Правильнее было бы (вопреки традиции) говорить: *десятый*, а не десять градусов; *сотый*, а не сто градусов по Цельсию !!!
- Как физическая величина **принципиально отличается от** таких аддитивных, как **масса, объем, энергия** и т.д., которые имеют эталоны для измерения.

# Как устанавливается ТР?

*Столкновения молекул между собой не способствуют установлению ТР*



Для установления ТР необходимо хотя бы одно касание молекулы объекта о границу с термостатом.

Такая молекула способна «узнавать» температуру термостата и далее при столкновениях сообщать ее молекулам объекта.

- Молекула объекта до касания со стенкой термостата
- Молекула объекта после касания со стенкой термостата

# При всяком контакте с окружением

- Объект может **получать** от него или **отдавать** ему определённую энергию.
- В зависимости от типа воздействия эта энергия может быть описана разными характеристиками и полностью или частично затрачена на совершение работы.

# Внутренняя энергия (U)



## Макроскопическое описание:

Чтобы перевести тело из одного агрегатного состояния в другое при данной температуре, надо затратить энергию.

## Внутренняя энергия зависит от объёма тела и его температуры $U=U(V, T)$

*Что бы ни происходило с объектом, при возвращении в исходное состояние с прежними значениями температуры и объёма его внутренняя энергия не изменяется. Это функция состояния.*

## Микроскопическое описание:

Средняя энергия движения и взаимодействия всех молекул, участвующих в хаотическом тепловом движении, называется внутренней энергией  $U$

# Баланс энергии для нециклических тепловых процессов (дебет = кредиту)

<p>при тепловом контакте</p> <p><b>ПРИХОД ЭНЕРГИИ</b></p>	<p><b>РАСХОД ЭНЕРГИИ</b></p>
<p><math>Q</math> - от нагревателя</p>	<p><math>\Delta U</math> – изменение внутренней энергии</p> <p><math>A</math> – работа</p>

$$Q = \Delta U - A$$

Это первый закон (начало) термодинамики-науки о тепловых процессах.

# «Неконвертируемость» теплоты и работы

Теплота  $Q$  и работа  $A$  - два **различных** способа **обмена энергией между** телом и окружением за счет контакта. Эти способы существенно отличаются друг от друга:

Работа **может быть полностью** переведена в теплоту  $A \rightarrow Q$ , но теплота в работу переходит лишь **частично**. Остальная часть отдаётся окружению – это «плата» за процесс!

## Подробнее это выглядит так.

**Совершая работу** по сжатию газа, его можно таким образом нагреть, При этом можно добиться того, что **вся совершённая работа полностью перейдёт в теплоту, а внутренняя энергия газа не изменится.**

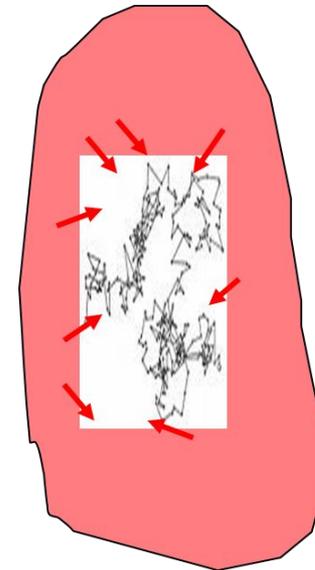
Обратный эффект - **сообщить газу теплоту, не изменяя при этом его внутреннюю энергию, и заставить его совершить работу** - не запрещён I началом. Но реально это удастся только при условии, что **теплота будет передана объекту не полностью, а частично.** «Остаток» теплоты будет согревать его окружение. Это своеобразная плата за процесс, которая демонстрирует **различие** между **контролируемым** (работа силы) и **неконтролируемым** (тепловое) воздействием.

**Механическое перемещение подвержено воздействию трения, а потому со временем может прекратиться, если нет вынуждающей силы**



**Часы следует регулярно заводить!**

**Тепловое движение молекул продолжается бесконечно долго благодаря контакту с термостатом, который хаотически подпитывает его энергией. Этот запас неисчерпаем в силу огромных размеров окружения**

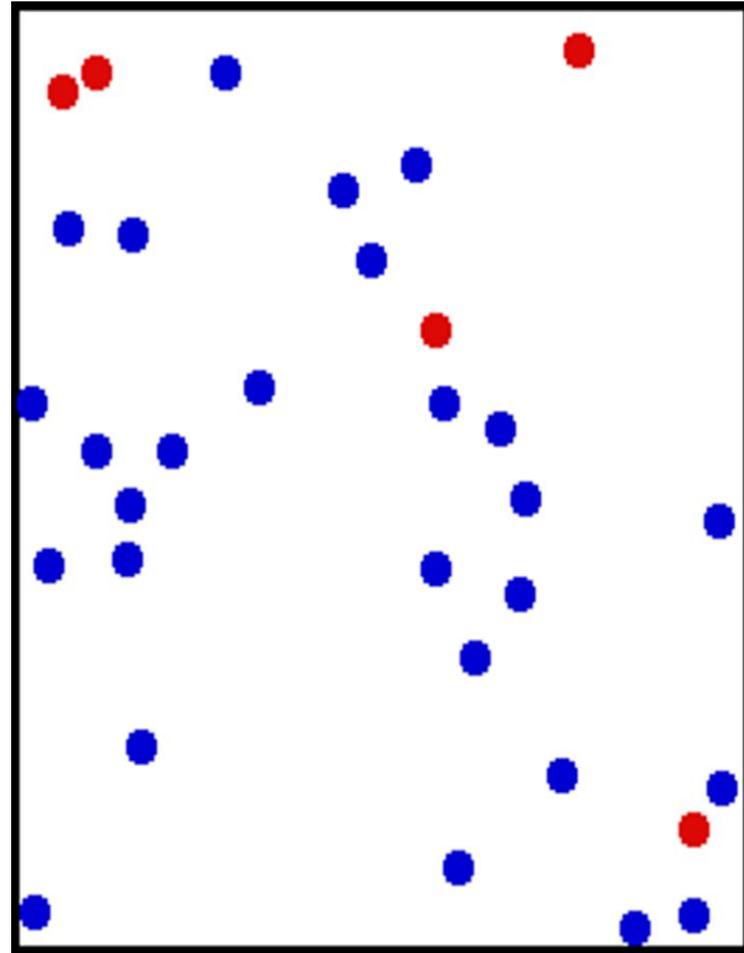




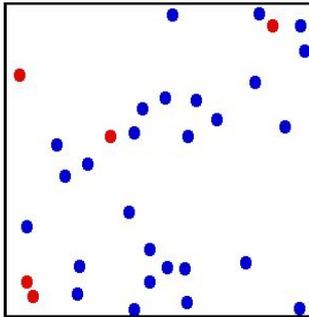
## Модель хаотического теплового движения частиц

Для распространения  
запаха духов в комнате  
нужно **несколько минут,**  
**хотя \скорости молекул**  
**велики - 450- 500 м/сек**

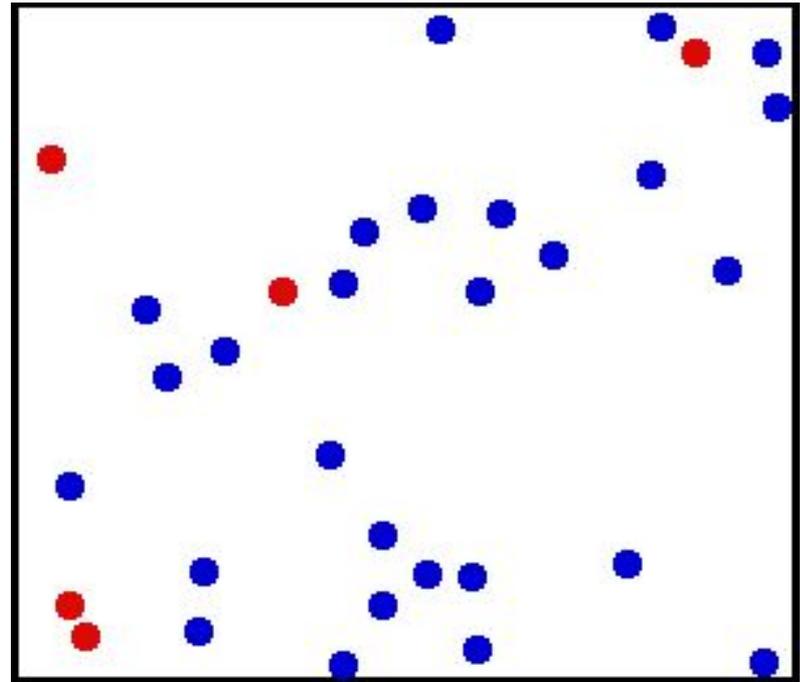
.Причина замедления –  
молекулы движутся  
хаотически, **сталкиваясь**  
**друг с другом**



# Интенсивность хаотичности движения молекул зависит от **доступного объема**



В малом объёме хаотичность меньше, частицы более плотно расположены и не имеют пространства для манёвра

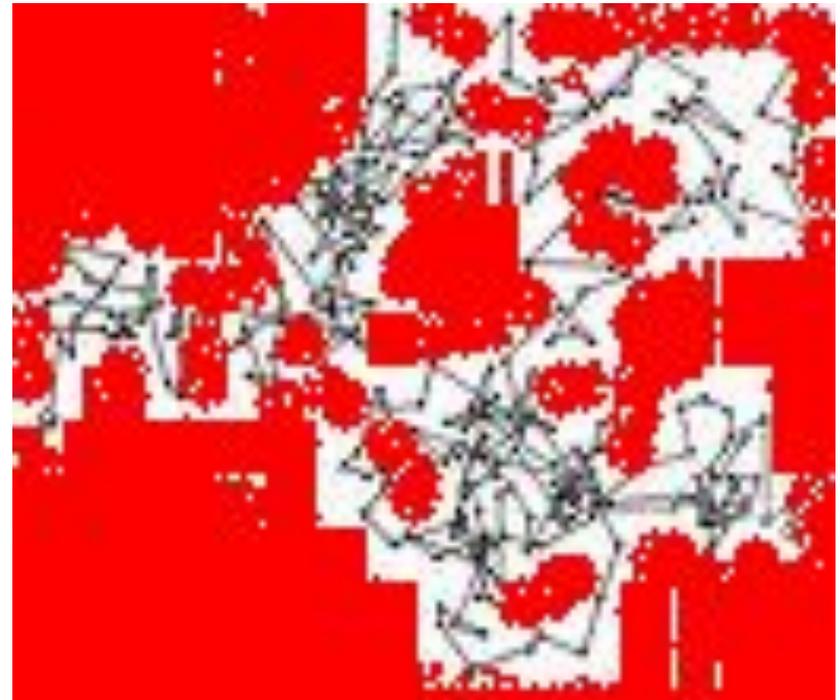


с **увеличением объёма** хаотичность больше

# Скорость хаотического движения возрастает с **повышением температуры**



Температура ниже



Температура выше

# Беспорядок и вероятность



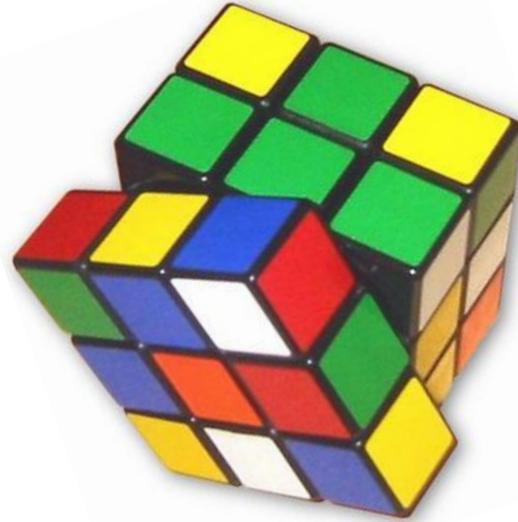
**Порядок** осуществляется одним единственным способом из множества возможных комбинаций.



Вероятность обнаружить **беспорядок** значительно выше, в особенности, если число возможных комбинаций велико

# Хаотичность, вероятность и энтропия

- Чем больше хаотичность объекта, тем больше число способов ее реализации
- Чем **больше хаотичность** объекта, тем **больше его энтропия**



**Связь между энтропией  $S$  и числом способов реализации состояния  $W$**

$$S = k_B \ln W$$

# Л. Больцман



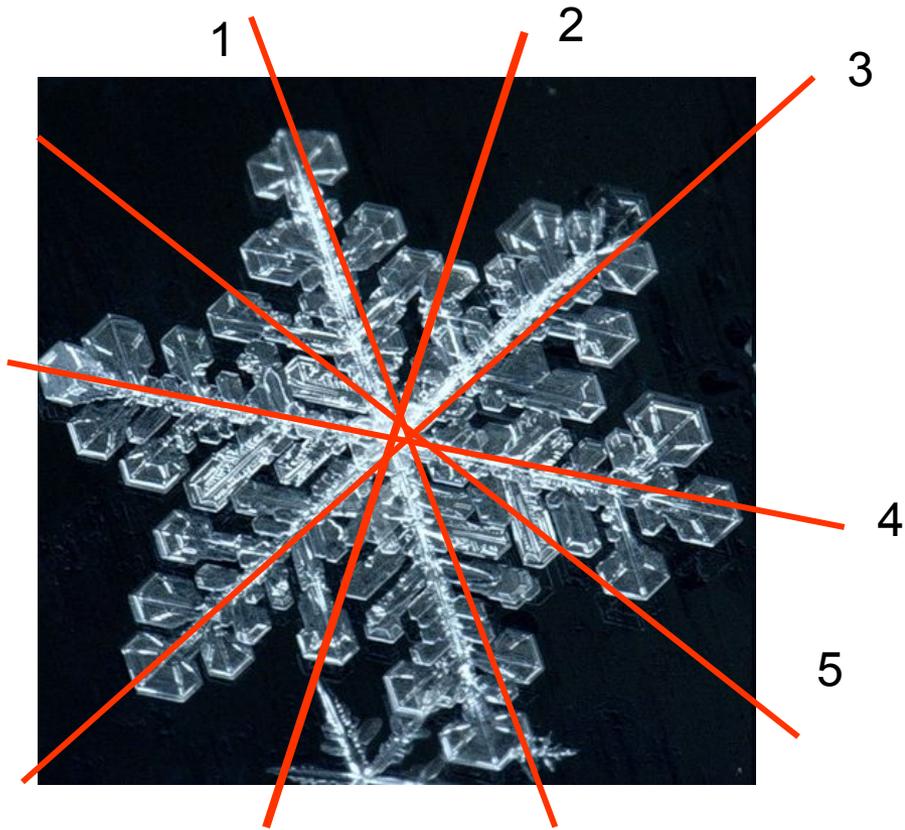
1844-1906



Константа  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К

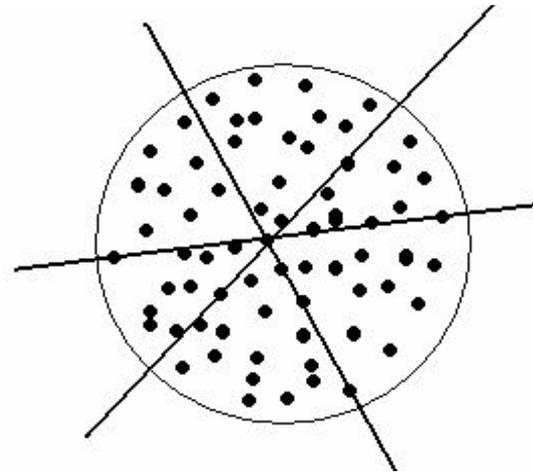
**названа именем Людвигу Болъцмана, который дал миру формулу, начертанную на его могиле. Эта мировая постоянная - константа стохастического теплового воздействия, одна из фундаментальных констант нашего мира.**

# Хаос, симметрия и Энтропия



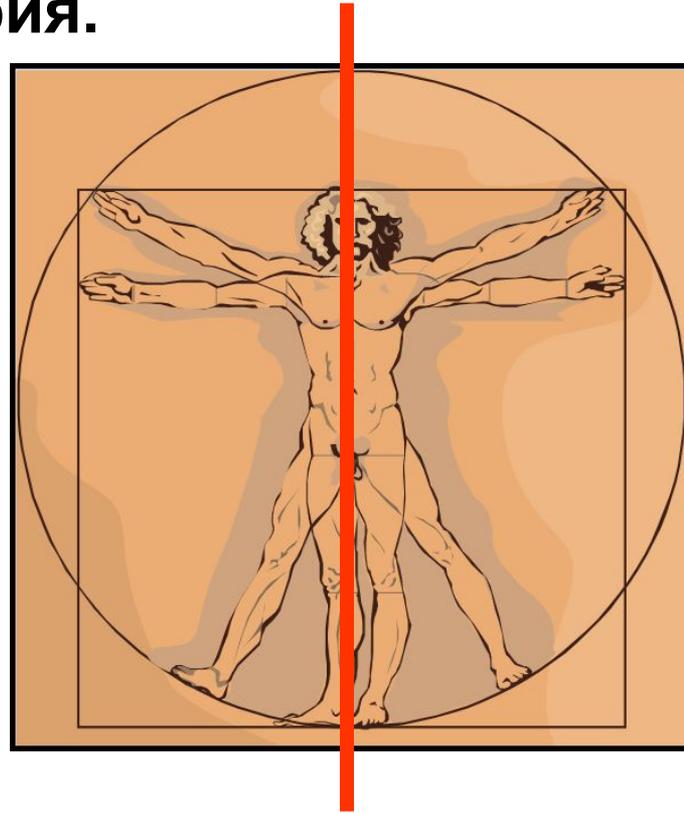
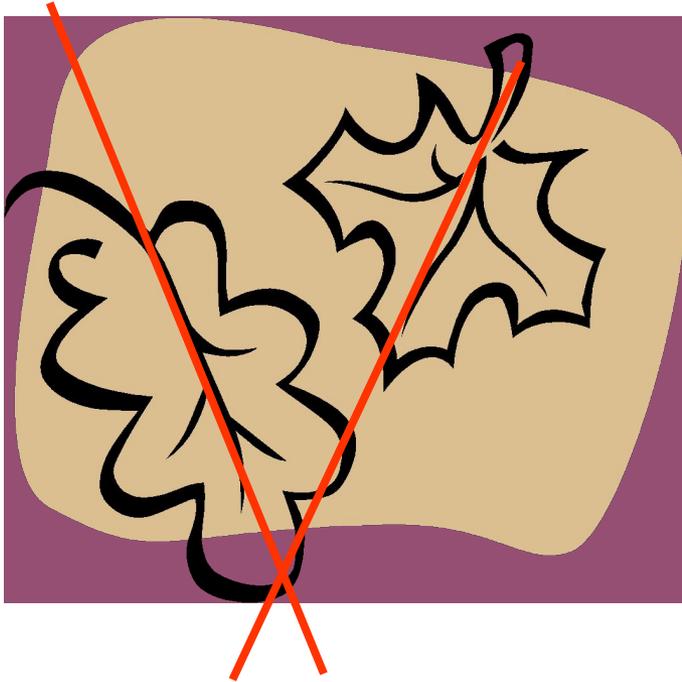
У кажущегося симметричным объекта не так много осей симметрии

Чем **больше хаос** в системе, тем **больше** элементов **симметрии** (выше симметрия)



Бесконечное множество осей симметрии

**С возрастанием уровня организации (сложности) объектов их симметрия уменьшается. Несмотря на наличие ряда парных органов человеку свойственна довольно низкая симметрия.**



# Квантовые состояния

Лекция 5

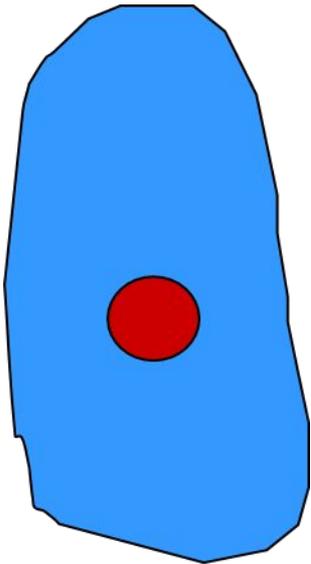
# План темы **Квантовые**

## **СОСТОЯНИЯ**

- Условия применимости модели
  - Микроскопическое тело, Квантовое окружение, Квантон
- Особые свойства квантонов
  - Квантово-волновой дуализм
    - Идея М. Планка о квантовании света
    - Гипотеза де Бройля, опыты Дэвиссона и Джермера, двухщелевой эксперимент с микрочастицами
    - Волны вероятности. Вероятность состояния квантона
  - Суперпозиция
  - Спин
    - Коллективные свойства в зависимости от спина: бозоны и фермионы
    - Принцип запрета Паули
- Более сложные тела
  - Строение атома
  - Строение молекул

# Условия применимости модели

Идеальная ситуация  
Холодное окружение ( $T=0$ )



Квантовое воздействие.  
Окружение - Физический вакуум

- Тепловым воздействием можно пренебречь
- Тепловое движение частиц отсутствует или не учитывается
- Отдельные микрочастицы, помещенные в физический вакуум

**Тело в квантовом состоянии -**  
**КВАНТОН**

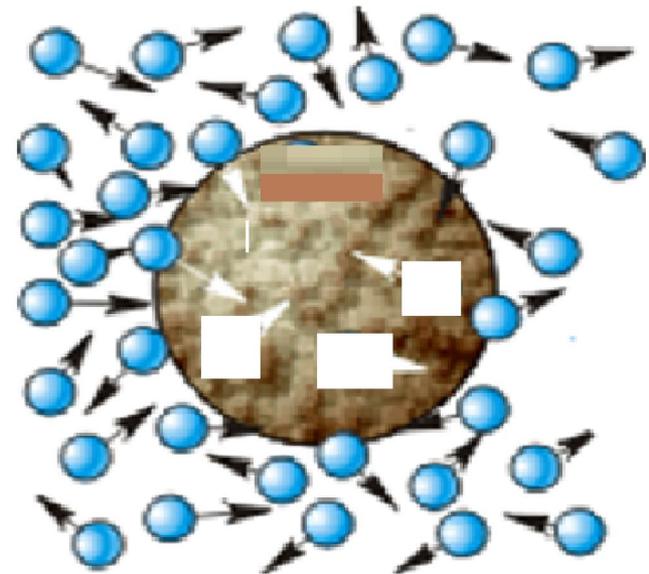
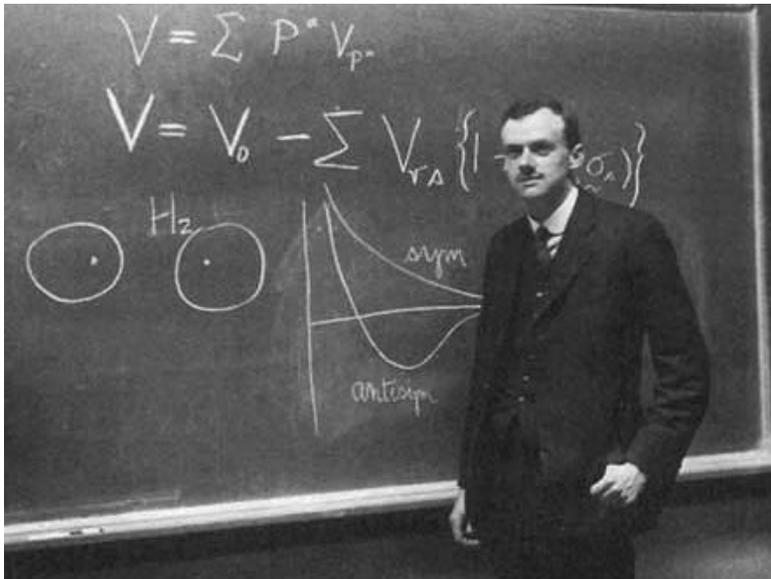
**В неклассической ЕНКМ исходят из того, что под влиянием стохастического воздействия все характеристики объекта являются случайными.**

**При описании квантовых явлений нельзя использовать модель изолированного объекта, как это делается в классике. Термин «свободный объект» следует понимать только как отсутствие регулярного воздействия сил и полей.**

**Так чем же обусловлено квантовое воздействие, если при  $T=0$  тепловое движение в окружении объекта полностью заморожено, нет столкновений с молекулами окружения и никаких внешних сил?**

# Физический вакуум

В отсутствие молекул пространство заполнено физическими полями из которых потенциально могли бы родиться частицы. Такие нерожденные частицы называют **виртуальными**. Они служат переносчиками фундаментальных взаимодействий, а также осуществляют квантовое стохастическое воздействие и служат окружением для квантонои



Идея впервые предложена П.А.-М. Дираком (1902-1984)

# поведение Они обнаруживают очень «необычное»

Быть может, эти электроны –  
Миры, где пять материков,  
Искусства, знания, войны, троны  
И память сорока веков.  
Еще, быть может, каждый атом –  
Вселенная, где сто планет;  
Там все, что здесь, в объеме сжатом,  
Но также то, чего здесь нет....

**В. Брюсов. Мир ЭЛЕКТРОНА.**

Собр.соч. в 7-и тт. Т. 3. С. 172.

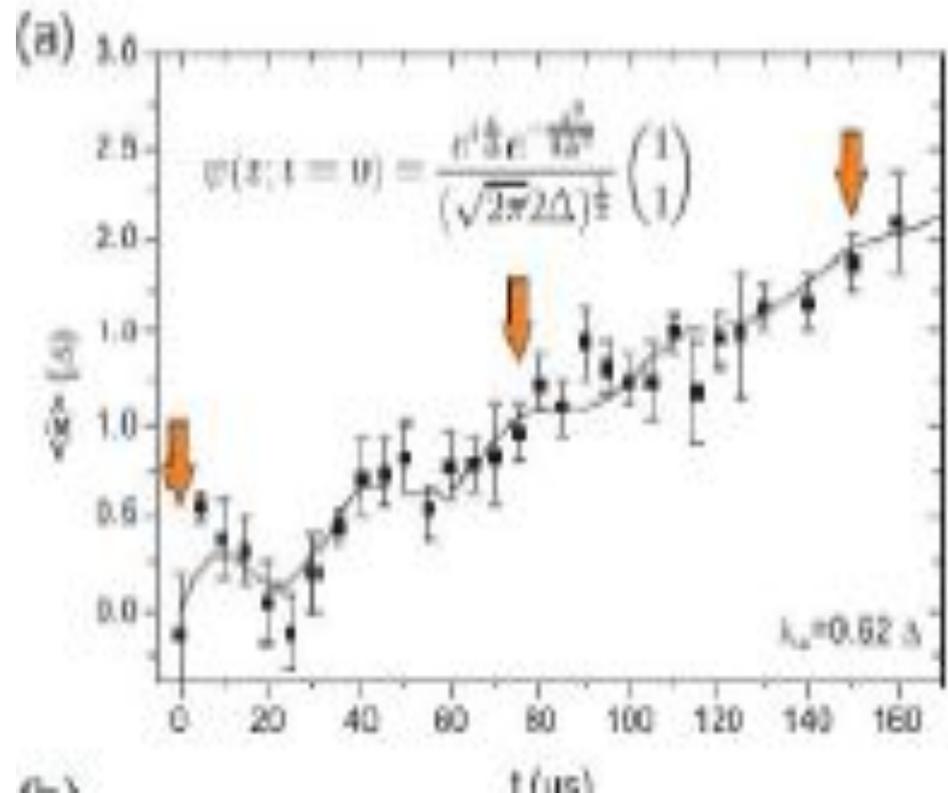
М.: Худ. лит., 1974.

## Пример необычного поведения свободного электрона, описываемого моделью квантона

Свободная электрон в классическом подходе должен двигаться равномерно и прямолинейно, т. е. с постоянной скоростью  $V=const$ , что соответствует линейной зависимости координаты от времени  $x=Vt$ . График этой зависимости – прямая линия.

Однако при скоростях, сравнимых со скоростью света, его скорость перестает быть константой. Она начинает быстро флуктуировать вокруг среднего значения с частотой приблизительно  $1,6 \cdot 10^{21}$  Гц.

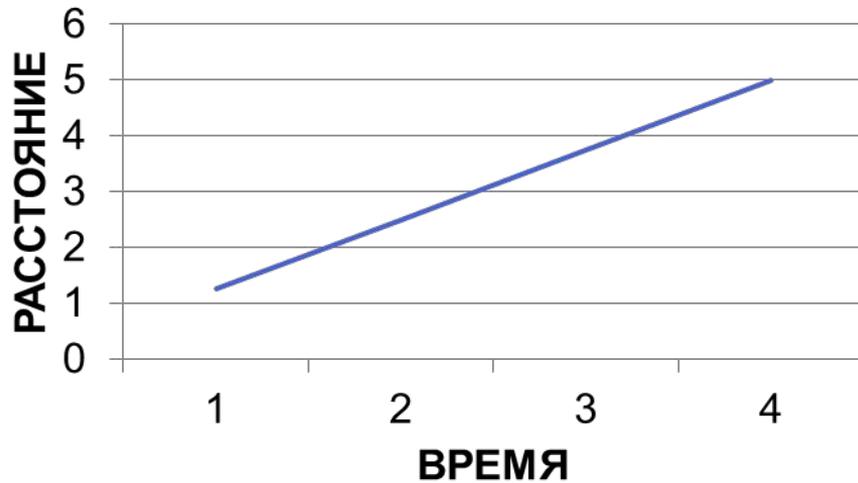
В этих условиях наблюдаются также флуктуации координаты (на рисунке показаны отклонения от прямой линии  $x=Vt$ ). Это говорит о том, что модель свободной частицы к электрону здесь неприменима. Теперь это квантон, т.к. он реагирует на стохастическое квантовое воздействие вакуума.



Данный эффект называется Zitterbewegung ([нем.](#) *Zitterbewegung* — «дрожащее движение») —

# Пример необычного поведения свободного электрона, описываемого моделью квантона

## РАВНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ СВОБОДНОЙ КЛАССИЧЕСКОЙ ЧАСТИЦЫ



## МИКРОЧАСТИЦА ПРИ СКОРОСТЯХ, БЛИЗКИХ К СКОРОСТИ СВЕТА



Модель свободной частицы к электрону здесь неприменима. Необходимо использовать модель «квантон» ( т.е. микрочастица + стохастическое квантовое воздействие вакуума).

Данный эффект называется Zitterbewegung ([нем.](#) *Zitterbewegung* — «дрожащее движение») —

# Квантово-волновой дуализм

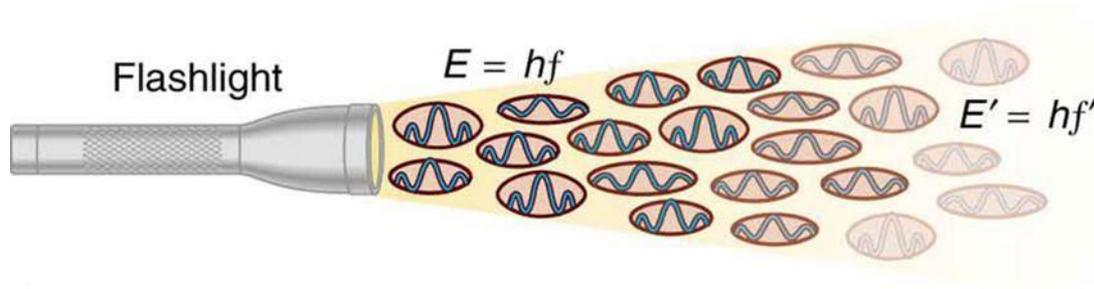


Макс Планк  
(1858-1947)

**1900 г. Квантовая гипотеза:**  
электромагнитное излучение  
испускается в виде отдельных порций  
(квантов) энергии, величина которых  
связана с частотой излучения  
выражением

$$E = \hbar\omega$$

Ввел **квант действия** (постоянная  
Планка):  $\hbar = 1,06 \cdot 10^{-34}$  Дж · с



# Квантово-волновой дуализм



Луи де Бройль  
(1892-1987),  
Нобелевский лауреат  
1929г.  
Франция

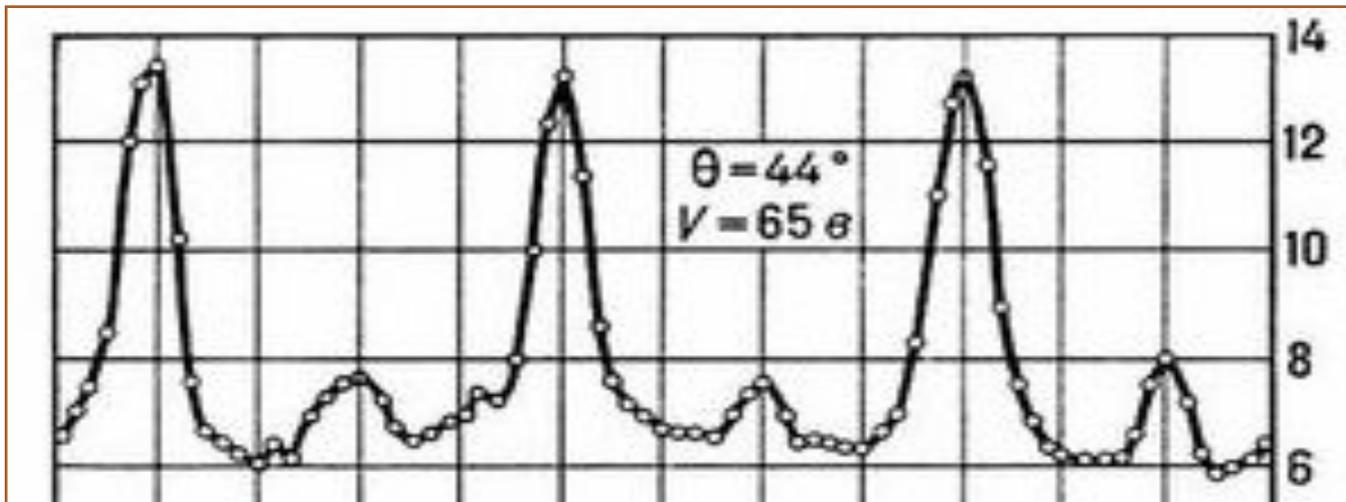
1923-24 г.г. Гипотеза де Бройля: свободной частице, имеющей в некоторой системе отсчета импульс  $p$  можно сопоставить плоскую монохроматическую волну де Бройля с длиной волны

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

*Это соотношение указывает на связь между  $p$  (корпускулярной характеристикой микрочастицы) и  $\lambda$  (характеристикой состояния микрочастицы, формируемого окружением).*

Гипотеза о том, что **волновые свойства в определенных условиях могут проявлять частицы**, имеет опытное подтверждение.

К. Дэвиссон и Л. Джермер в опыте **с частицами (1927 г.)**, неожиданно **обнаружили типичную дифракционную картину**

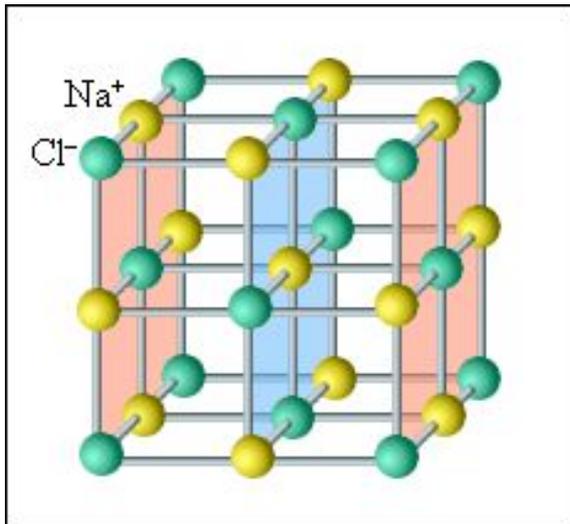


Максимумы на кривой интенсивности соответствуют тем точкам экрана, куда упало наибольшее число частиц, т.е. велика вероятность попадания. На этом основании эти волны интерпретируют как волны вероятности.

- Дифракция - свидетельство особого **волнового** процесса, который в данном случае порождается движущимися **частицами (напр., электронами)**
- **Природа этого процесса необычна** (противоречивое сочетание волны и частицы, что невозможно в классике).
- Для интерпретации природы этих волн необходимо обсудить их особенности

# Условия наблюдения дифракционных максимумов в опыте Дэвиссона и Джермера:

- Поток частиц падает на кристалл  
(Кристаллическая решетка – аналог совокупности щелей для дифракции ЭМИ)



Размер естественной «щели» в кристаллической решетке  $\sim 10^{-10}$  м  
Следовательно, **длина волны дифрагирующих волн  $\lambda$  также  $\sim 10^{-10}$  м**

# Особенности дифракции частиц

Итак, экспериментально доказано, что **при движении любых микрочастиц проявляются волновые свойства.**

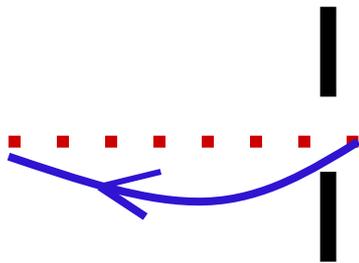
- Эффект наблюдается для **любых микрочастиц** (с зарядом и нейтральных)
  - => природа этого процесса **не связана** с **электромагнитными** волнами.
- Волновые свойства проявляются и у **свободных (в классическом смысле)** микрочастиц.
  - => природа этого процесса **не связана** с **механическими** волнами, т.е. с процессами, вызванными механическими возмущениями.

**Одна** микрочастица в **одиночном** опыте со щелью **не создает** дифракционной картины.

Дифракция микрочастиц происходит, если



1. Через «щель» **одновременно** проходит «поток» микрочастиц

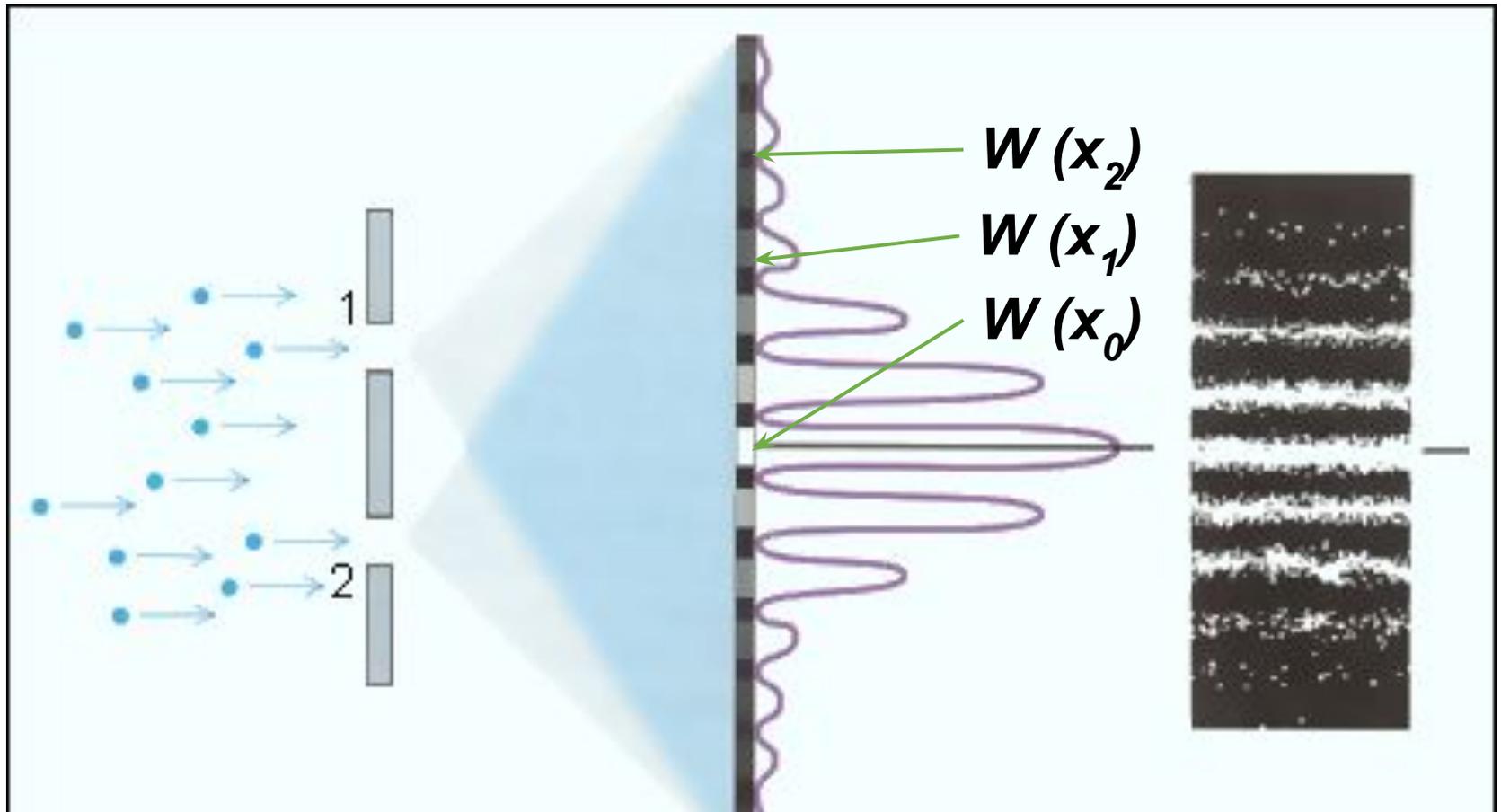


2. **Одну и ту же частицу** поочередно возвращать в исходное положение перед щелью

# ВАЖНО!

- **Волновые свойства возникают только в коллективе  $N$  одинаковых событий, происходящих в одних и тех же условиях**
- **Этот коллектив называется неклассическим статистическим ансамблем**
- **Корректно** использовать теорию вероятностей можно только в случае, когда  $N \rightarrow \infty$ .

# Эксперимент с двумя щелями (микрочастицы)



$W(x)$  - вероятность попадания микрочастицы в определенную точку экрана  $x$

Ансамбль квантонов описывается вероятностным образом через **величину  $\Psi(x)$**

**$\Psi(x)$  - амплитуда вероятности, или волновая функция.**

**$\Psi(x)$  может быть комплексной функцией.**

**Вероятность события  $W(x)$  , при котором одиночный квантон попадет в точку экрана с координатой  $x$  связана с амплитудой вероятности  $\Psi(x)$  следующим соотношением:**

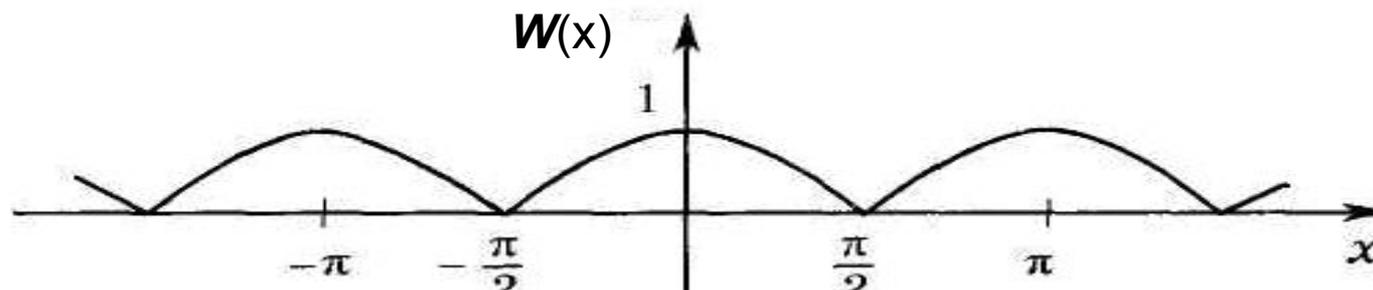
$$W(x) = |\Psi(x)|^2 .$$

*Так как вероятность – действительная (в математическом смысле) и сугубо положительная величина, в этой формуле амплитуда вероятности берётся по модулю:*

$$|\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x) \Psi(x),$$

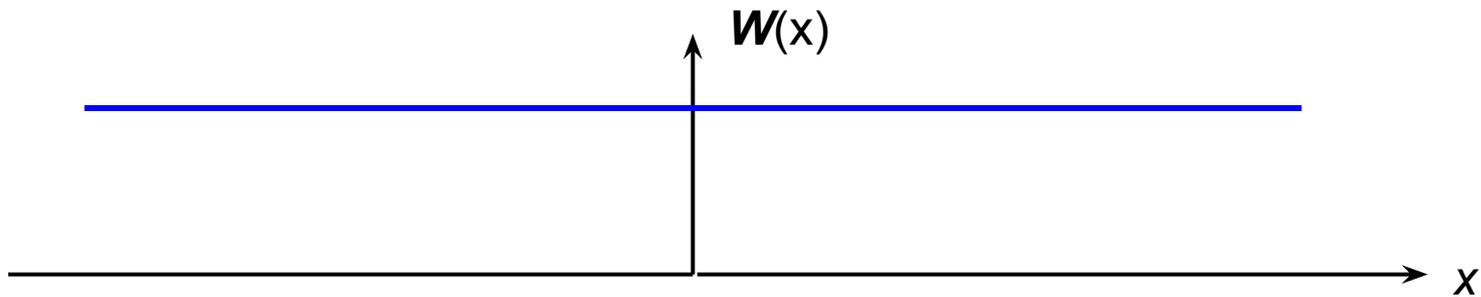
*где символ “ \* ” означает комплексное сопряжение*

**Во многих ситуациях поведение вероятности в зависимости от координаты  $W(x)$  имеет волнообразный характер.**



**В ряде точек оси  $x$  вероятность обнаружить квантон равна нулю. В них квантон находиться не может.**

График  $W(x)$  для **свободного квантона** (нет регулярного воздействия) в **неограниченном пространстве**:



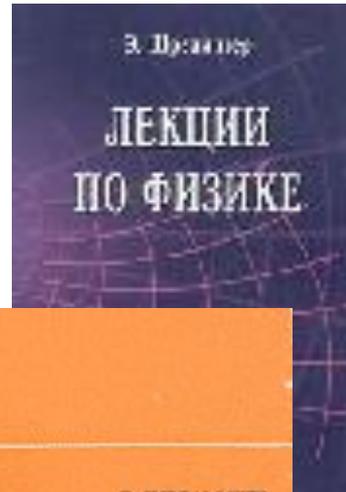
**Вероятность обнаружить квантон одинакова во всех точках оси  $x$ , что аналогично волне.**

# Как узнать вероятность $W(x)$ ?

1. Определить из опыта;
2. Вычислить теоретически, решая знаменитое уравнение, предложенное Э.Шредингером.



**Э. Шрёдингер 1887-1961**  
(Нобелевская премия 1933 г.)



# Особенность квантовых состояний:

Квантон **может** **одновременно** находиться в нескольких квантовых состояниях: **и в состоянии  $|1\rangle$  и в состоянии  $|2\rangle$ : состояние**

$$|3\rangle = C_1 |1\rangle + C_2 |2\rangle;$$

возникает «смесь» (суперпозиция) состояний, осуществляемых с разными вероятностями:

$$W_1 = |C_1|^2 ; W_2 = |C_2|^2$$

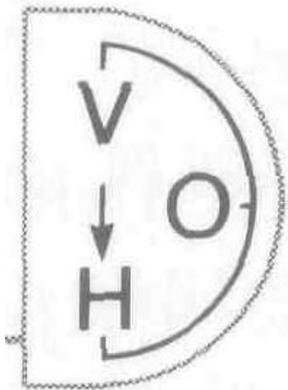
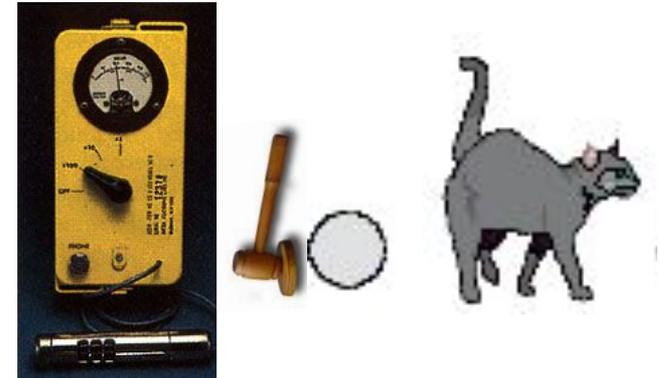
*Однако в эксперименте обнаруживается только одно из двух возможных состояний. Как правило, это будет состояние, вероятность которого больше.*

# Парадокс кота Шрёдингера

В закрытом ящике находится кот.

В том же ящике :

- атом радиоактивного изотопа,
- счётчик продуктов распада,
- молоток, разбивающий ампулу с ядом при срабатывании счетчика



**Пока атом не распался, с котом всё в порядке,**

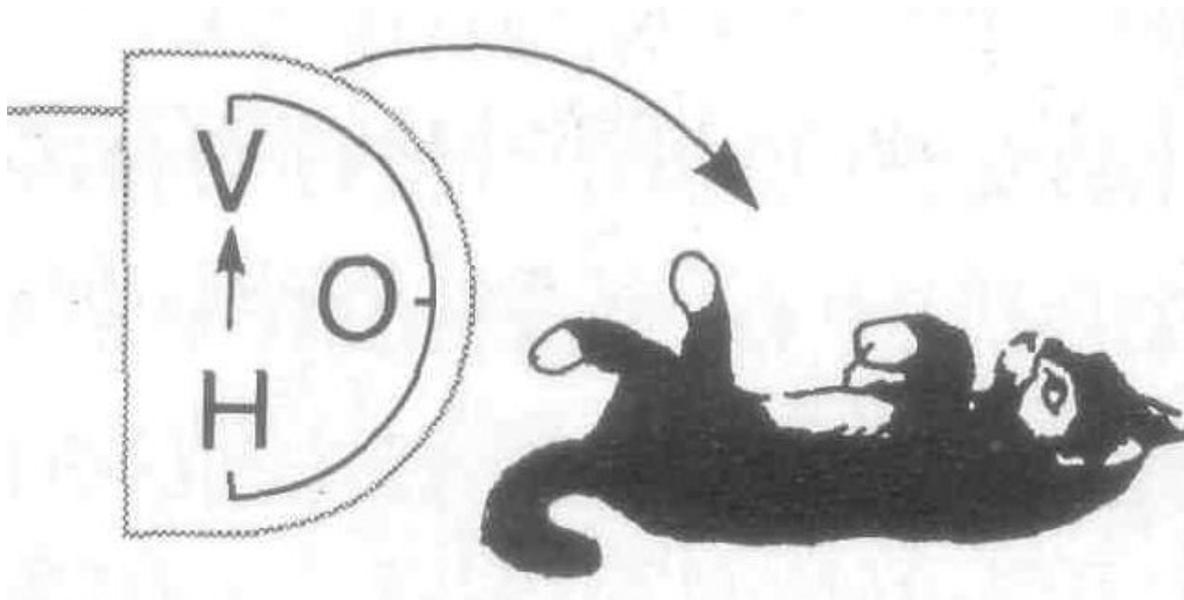
## Далее вступает в силу вероятностный характер квантового состояния.

- Неизвестно, когда атом распадётся. В каждый данный момент имеется лишь определённая вероятность его распада.
- В каждый данный момент **атом** находится в суперпозиции **двух** квантовых состояний: состояния, когда он **ещё не распался**, и состояния, когда он **уже распался**.

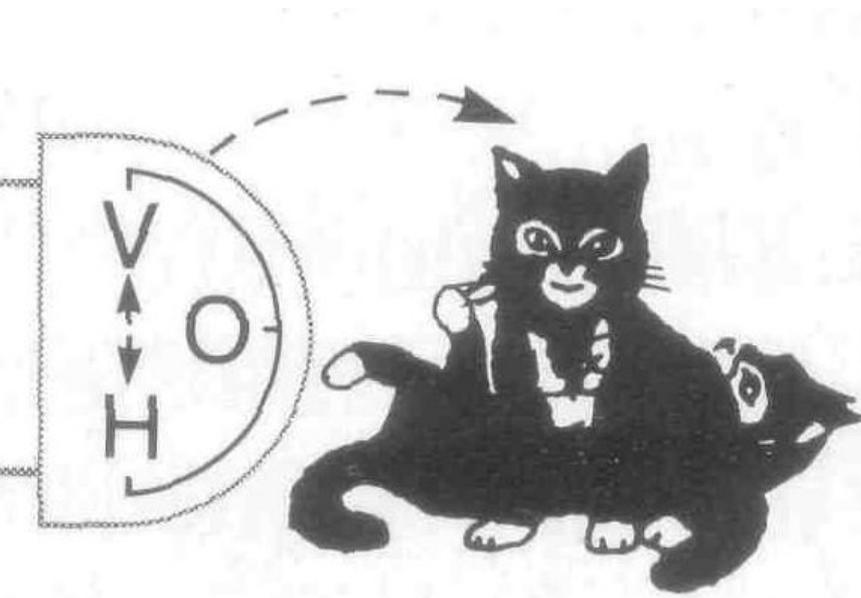


# С другой стороны,

- когда атом распадается, срабатывает счётчик;
- по его сигналу молоток разбивает ампулу, и кот гибнет от яда.



- подходя к **закрытому** ящику, мы должны считать, что система (атом- кот) находится в суперпозиции двух состояний:



**нераспавшийся атом**  
**и живой кот**  
+  
**распавшийся атом**  
**и мёртвый кот.**

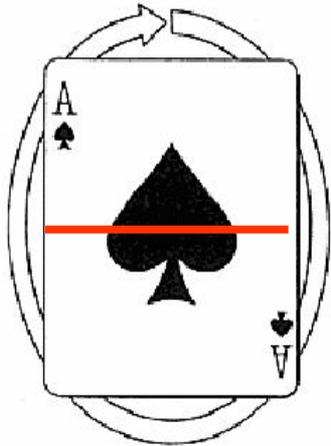
---

Возникающий nonsense является парадоксом лишь для макроскопического тела, каким является кот

**В микромире –  
это обыденное явление**

# СПИН - сугубо квантовая характеристика микрообъектов, связанная с особой симметрией.

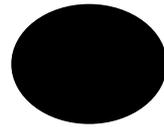
На рисунках - бытовые аналоги различной симметрии в зависимости от значения спина



В этом случае для совмещения объекта с самим собой нужен поворот на  $360^{\circ}$ .

Аналог состояния объекта со спином

$$s = \frac{\hbar}{2}$$



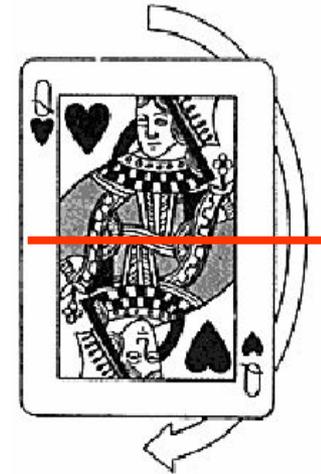
В круге возможны любые повороты. Аналог состояния объекта со спином

$$s = 0$$

Для разных микрообъектов может иметь значения

$$s = n \frac{\hbar}{2},$$

$$n = 0, 1, 2, 3 \dots$$



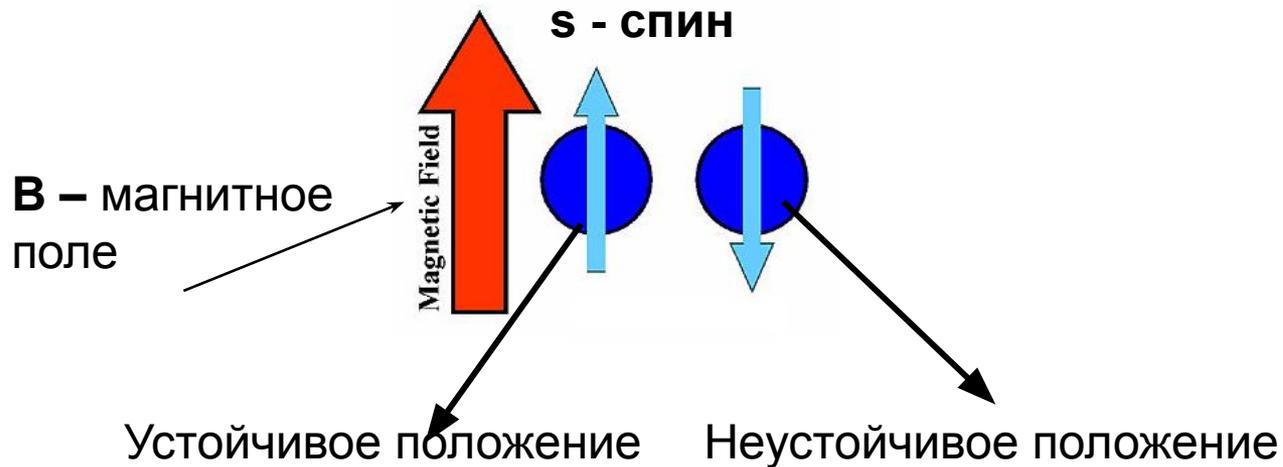
В этом случае для совмещения объекта с самим собой нужен поворот на  $180^{\circ}$ .

Аналог состояния объекта со спином

$$s = \hbar$$

## Спин проявляет себя:

- а) **В магнитном поле** (частица подобна магнитной стрелке)



- б) **В коллективах одинаковых частиц**

## В зависимости от величины спина микрообъекты делятся на

**бозоны** (фотоны и другие переносчики фундаментальных взаимодействий с нулевой массой):

$$s = 0, 1\hbar, 2\hbar, \text{любое чётное число } \hbar/2 .$$

**фермионы** (электроны, протоны, нейтроны и другие частицы с ненулевой массой):

$$s = \frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \frac{5}{2}\hbar, \dots \text{ (любое нечётное число } \hbar/2)$$

- Различие между фермионами и бозонами проявляется в коллективном поведении тождественных квантонов.

# Особенность поведения бозонов



- **Бозоны** с полностью идентичными характеристиками **могут** пребывать в одном и том же квантовом состоянии без ограничения их количества. **образовывать конденсат.**

В этом отношении они ведут себя подобно ансамблю музыкантов, играющих в унисон

Благодаря способности идентичных **фотонов (бозонов)** скапливаться в одном состоянии, мы наблюдаем мощное когерентное излучение лазеров

**Этим свойством объясняется сверхтекучесть и сверхпроводимость жидкого гелия, в котором фермионы-электроны образуют пары и возникает бозонный конденсат. Недавно открыто большое количество новых бозонных конденсатов в различных средах.**

# Особенность поведения фермионов

Два и более фермиона с полностью идентичными характеристиками **не могут** одновременно находиться в одном квантовом состоянии! – *принцип запрета Паули*

В этом отношении фермионы подобны исполнителю-солисту

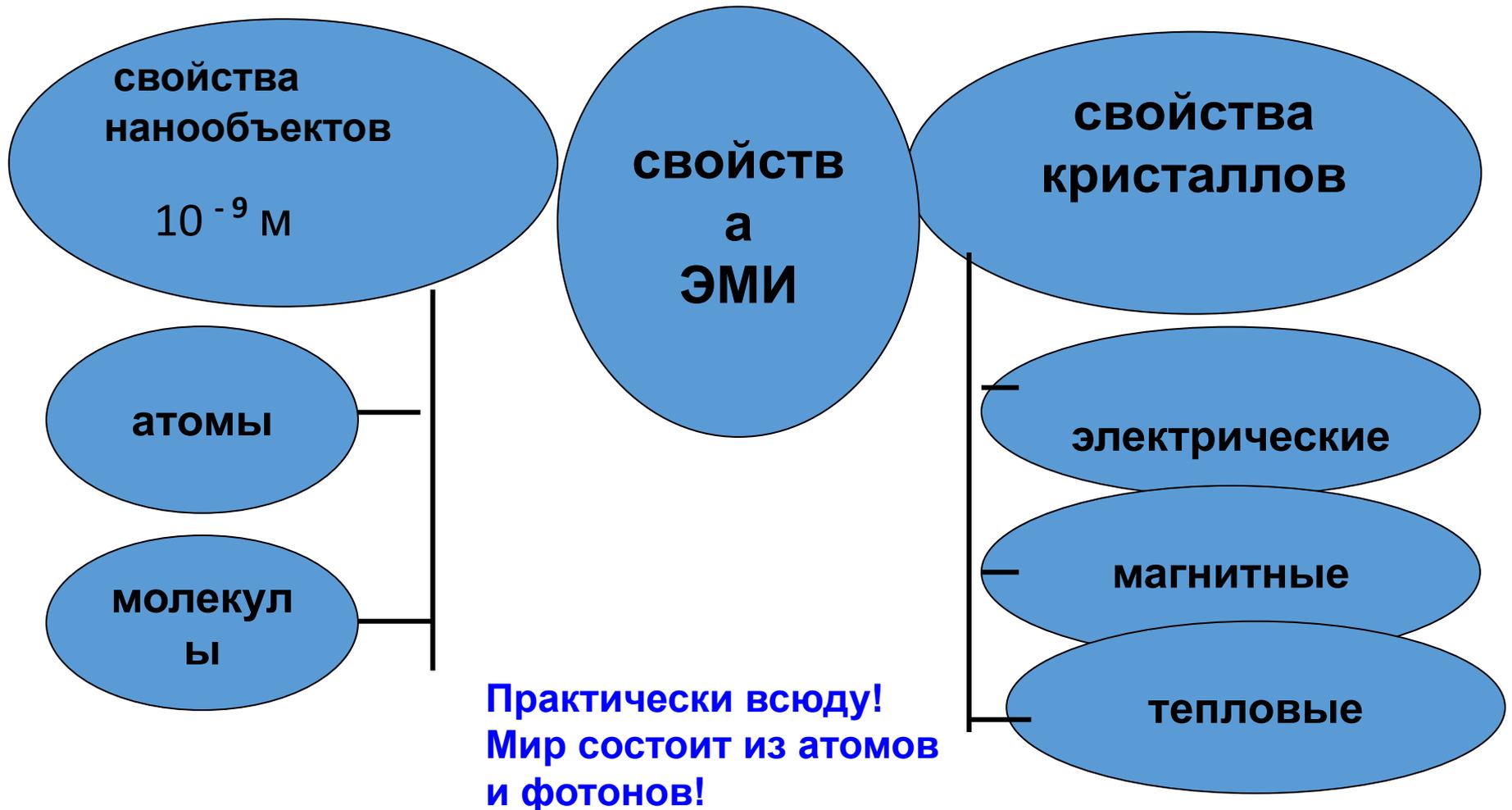


Австрийская почтовая марка с портретом Вольфганга Паули (1900-1958)

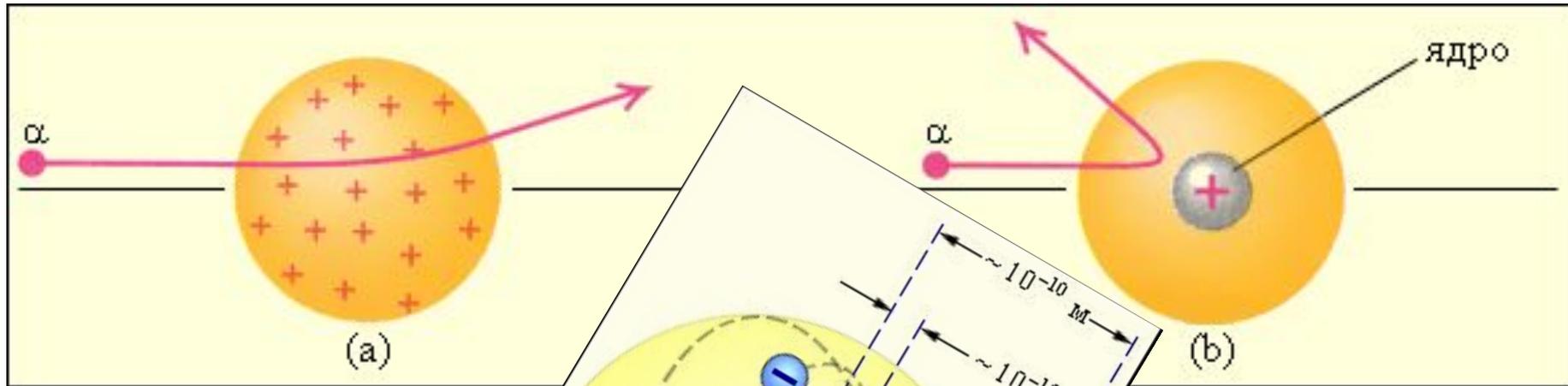
Между фермионами с рядом **одинаковых** характеристик должно быть **различие хотя бы** в ориентации их **спинов**.

Этому требованию подчиняются электронные состояния в атомах.

# Где проявляются особенности поведения квантонов?



# Модель Резерфорда 1911 г.



Опыты по  
рассеянию  $\alpha$ -частиц  
свидетельствовали  
о наличии  
массивного  
образования в  
центре атома - ядра.

Но устойчивость  
атома модель не  
объясняла

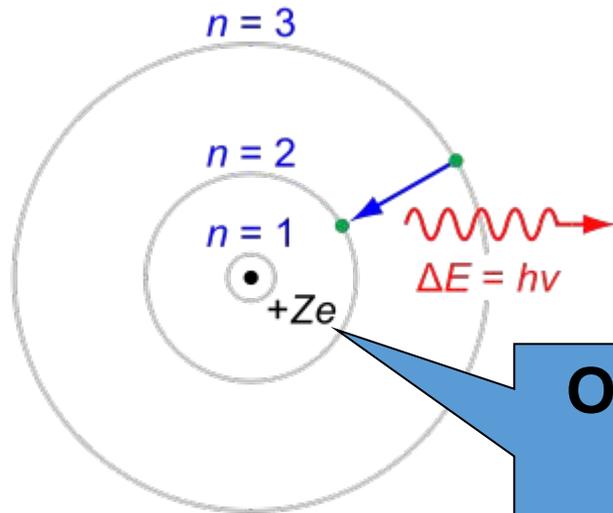
# Нильс Бор (1885 - 1962 )

датский ученый, один из создателей современной физики. Автор основополагающих трудов по квантовой механике, теории атома, атомного ядра, ядерным реакциям.



# Модель простейшего атома - атома ${}_1\text{H}^1$

по Нильсу Бору (1913 г.) также подобна планетной системе: это совокупность устойчивых орбит – возможных траекторий электрона в зависимости от его энергии



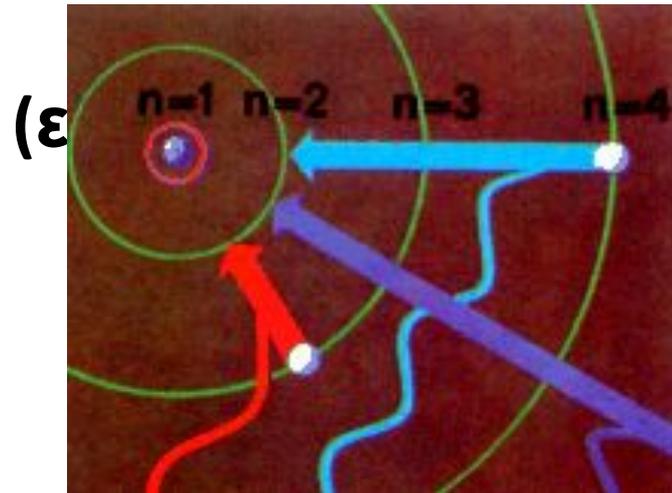
учитывает **только регулярное воздействие - кулоновское притяжение** между протоном и электроном

**Основное состояние электрона – ближайшая к ядру орбита**

# Основные особенности модели Бора

- Энергия системы «электрон - ядро» принимает дискретные значения, различные для разных орбит  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3 \dots$
- Атом излучает и поглощает энергию при переходах между орбитами порциями (квантами) величиной

$$(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) = \hbar\omega_{21};$$
$$\hbar\omega_{31};$$



# Модель Бора сочетает классические и неклассические положения

- - учитывает **только регулярное воздействие - кулоновское притяжение** между протоном и электроном (**классический подход**),
- приписывает электрону дискретные значения энергии (**противоречит классике!**)
- **не объясняет** многие свойства атомов, наблюдаемые на опыте (в том числе – разнообразие геометрии и наличие объема).

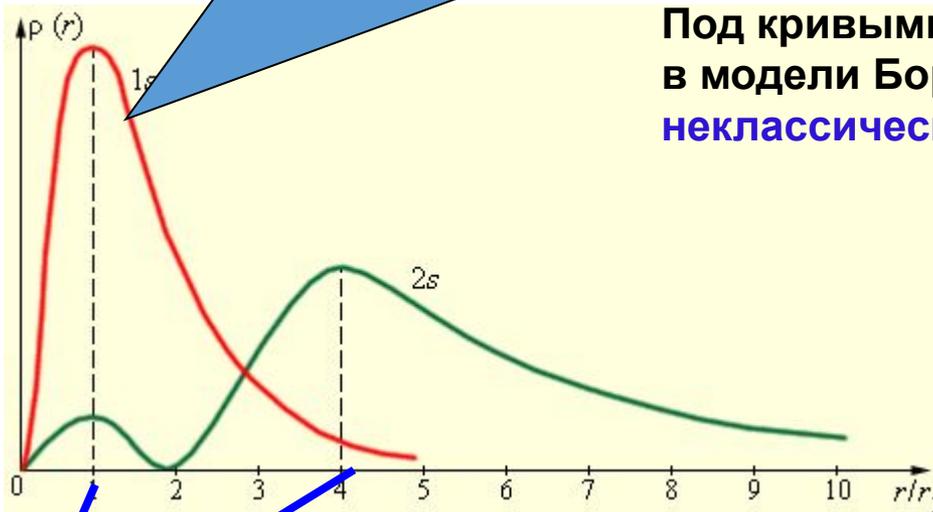
# Современная модель атома водорода как решение уравнения Шрёдингера

## ОСОБЕННОСТИ:

- Учитывает **стохастическое воздействие** на электрон со стороны ядра
- Электрон - квантон даже в основном состоянии, он адекватно описывается волновой функцией
- Электрон **может быть обнаружен практически на любом расстоянии от ядра, но с разной вероятностью**

# Что даёт решение уравнения Шрёдингера?

Вероятность обнаружить электрон на разных расстояниях от ядра в основном состоянии



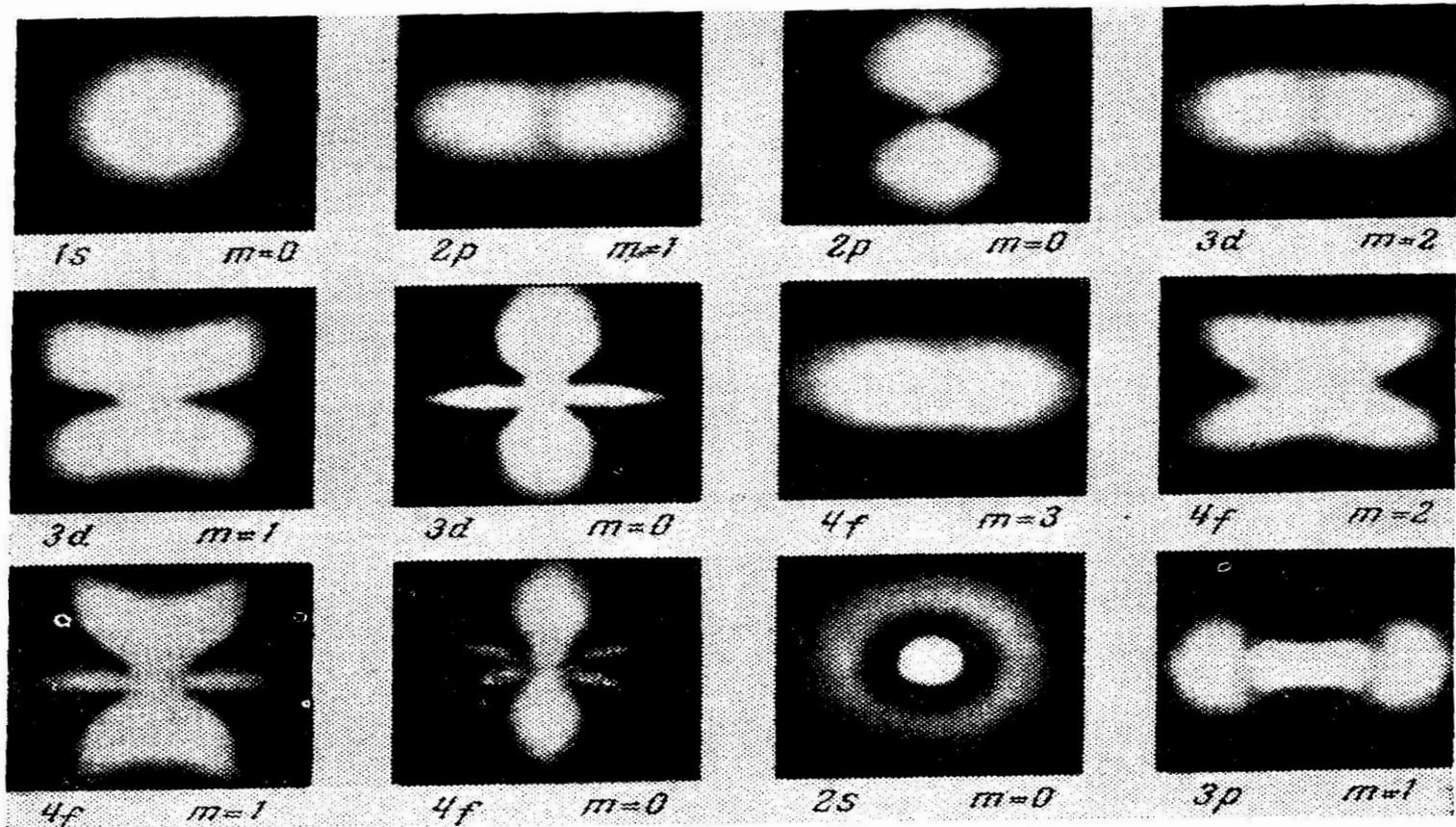
Под кривыми - области, **недоступные** электрону в модели Бора и **доступные** электрону в неклассической современной модели

**Представление об определенной траектории электрона теряет всякий смысл**

Радиусы первой и второй орбит Бора

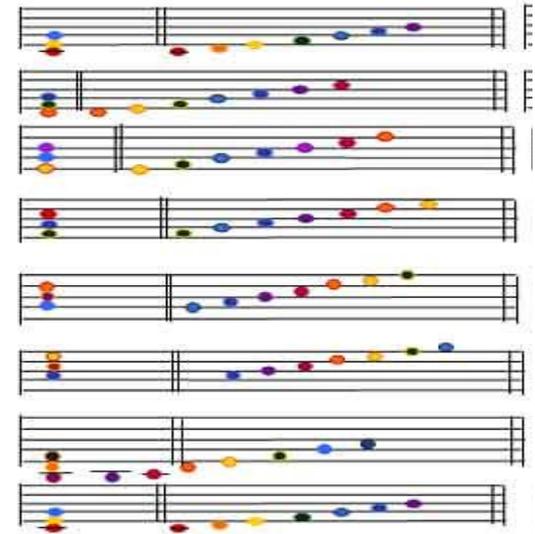
**Наиболее вероятное, но не единственно возможное** в основном состоянии положение электрона - на расстоянии  $x = r_1 \approx 0,5 \cdot 10^{-10}$  м, равном размеру первой орбиты в модели Бора. Его интуиция привела к правильному ответу

# Конфигурации вероятности нахождения электрона в атоме ${}^1_1\text{H}^1$



# Многоэлектронные атомы

- Электронные состояния формируются с учетом выполнения принципа Паули для фермионов – в каждом состоянии может находиться только по 2 электрона с различной ориентацией спина



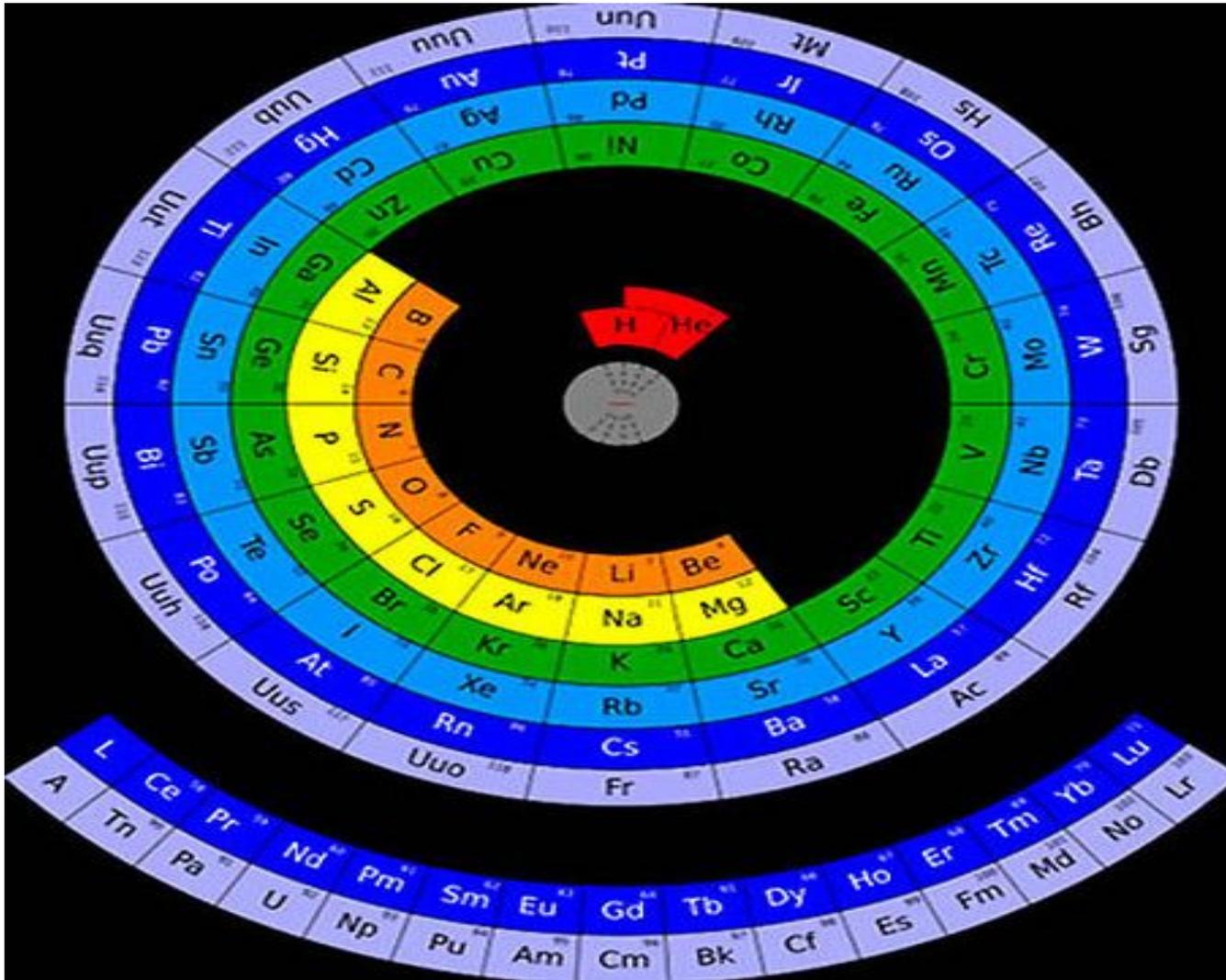
**ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ**  
Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

№ п/п	№ группы	Символ	Обозначение	Последняя степень окисления	Ряд	Периоды										VIII		№																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																											
						I	II	III	IV	V	VI	VII	0	I	II	III	IV		V	VI	VII	0																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
1	2	K	H	1	1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160	161	162	163	164	165	166	167	168	169	170	171	172	173	174	175	176	177	178	179	180	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190	191	192	193	194	195	196	197	198	199	200	201	202	203	204	205	206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	218	219	220	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230	231	232	233	234	235	236	237	238	239	240	241	242	243	244	245	246	247	248	249	250	251	252	253	254	255	256	257	258	259	260	261	262	263	264	265	266	267	268	269	270	271	272	273	274	275	276	277	278	279	280	281	282	283	284	285	286	287	288	289	290	291	292	293	294	295	296	297	298	299	300	301	302	303	304	305	306	307	308	309	310	311	312	313	314	315	316	317	318	319	320	321	322	323	324	325	326	327	328	329	330	331	332	333	334	335	336	337	338	339	340	341	342	343	344	345	346	347	348	349	350	351	352	353	354	355	356	357	358	359	360	361	362	363	364	365	366	367	368	369	370	371	372	373	374	375	376	377	378	379	380	381	382	383	384	385	386	387	388	389	390	391	392	393	394	395	396	397	398	399	400	401	402	403	404	405	406	407	408	409	410	411	412	413	414	415	416	417	418	419	420	421	422	423	424	425	426	427	428	429	430	431	432	433	434	435	436	437	438	439	440	441	442	443	444	445	446	447	448	449	450	451	452	453	454	455	456	457	458	459	460	461	462	463	464	465	466	467	468	469	470	471	472	473	474	475	476	477	478	479	480	481	482	483	484	485	486	487	488	489	490	491	492	493	494	495	496	497	498	499	500	501	502	503	504	505	506	507	508	509	510	511	512	513	514	515	516	517	518	519	520	521	522	523	524	525	526	527	528	529	530	531	532	533	534	535	536	537	538	539	540	541	542	543	544	545	546	547	548	549	550	551	552	553	554	555	556	557	558	559	560	561	562	563	564	565	566	567	568	569	570	571	572	573	574	575	576	577	578	579	580	581	582	583	584	585	586	587	588	589	590	591	592	593	594	595	596	597	598	599	600	601	602	603	604	605	606	607	608	609	610	611	612	613	614	615	616	617	618	619	620	621	622	623	624	625	626	627	628	629	630	631	632	633	634	635	636	637	638	639	640	641	642	643	644	645	646	647	648	649	650	651	652	653	654	655	656	657	658	659	660	661	662	663	664	665	666	667	668	669	670	671	672	673	674	675	676	677	678	679	680	681	682	683	684	685	686	687	688	689	690	691	692	693	694	695	696	697	698	699	700	701	702	703	704	705	706	707	708	709	710	711	712	713	714	715	716	717	718	719	720	721	722	723	724	725	726	727	728	729	730	731	732	733	734	735	736	737	738	739	740	741	742	743	744	745	746	747	748	749	750	751	752	753	754	755	756	757	758	759	760	761	762	763	764	765	766	767	768	769	770	771	772	773	774	775	776	777	778	779	780	781	782	783	784	785	786	787	788	789	790	791	792	793	794	795	796	797	798	799	800	801	802	803	804	805	806	807	808	809	810	811	812	813	814	815	816	817	818	819	820	821	822	823	824	825	826	827	828	829	830	831	832	833	834	835	836	837	838	839	840	841	842	843	844	845	846	847	848	849	850	851	852	853	854	855	856	857	858	859	860	861	862	863	864	865	866	867	868	869	870	871	872	873	874	875	876	877	878	879	880	881	882	883	884	885	886	887	888	889	890	891	892	893	894	895	896	897	898	899	900	901	902	903	904	905	906	907	908	909	910	911	912	913	914	915	916	917	918	919	920	921	922	923	924	925	926	927	928	929	930	931	932	933	934	935	936	937	938	939	940	941	942	943	944	945	946	947	948	949	950	951	952	953	954	955	956	957	958	959	960	961	962	963	964	965	966	967	968	969	970	971	972	973	974	975	976	977	978	979	980	981	982	983	984	985	986	987	988	989	990	991	992	993	994	995	996	997	998	999	1000



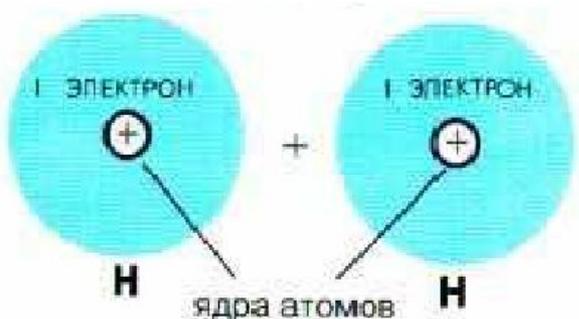
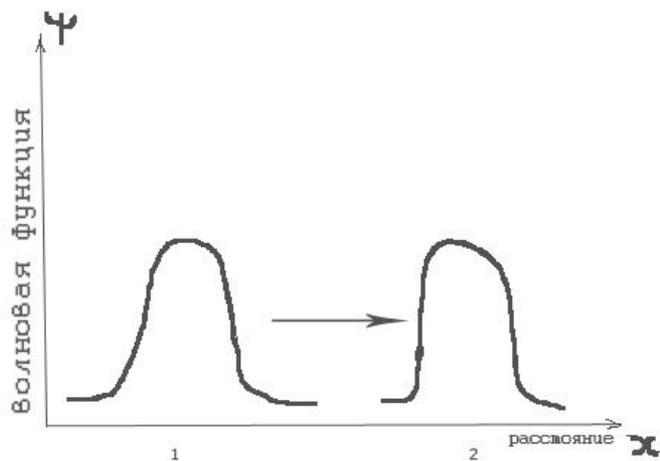
Рис 6.14. Энергетическая диаграмма атома бора.

# Современное представление системы Менделеева

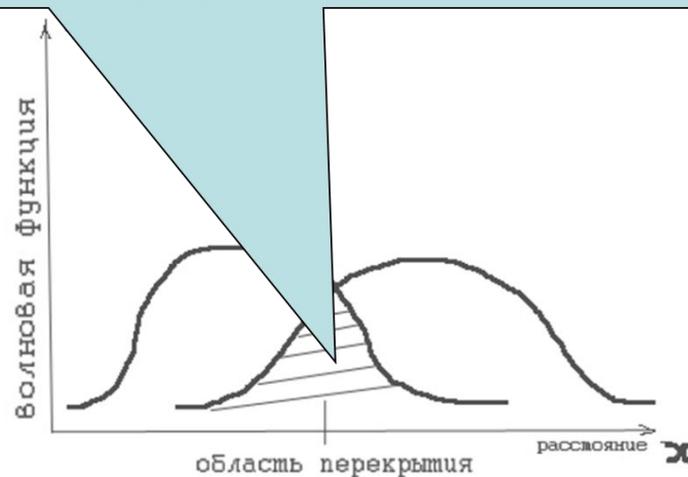


# Как образуется простейшая молекула - $H_2$ ?

Будем мысленно сближать два удалённых атома водорода до тех пор, пока волновые функции их электронов на перекроются.



При сближении атомов образуется зона перекрытия индивидуальных волновых функций двух электронов с образованием целостного двухэлектронного состояния.



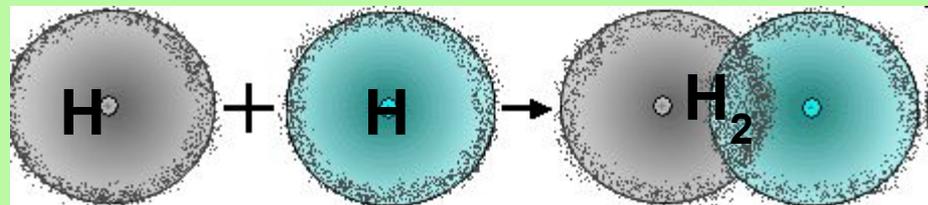
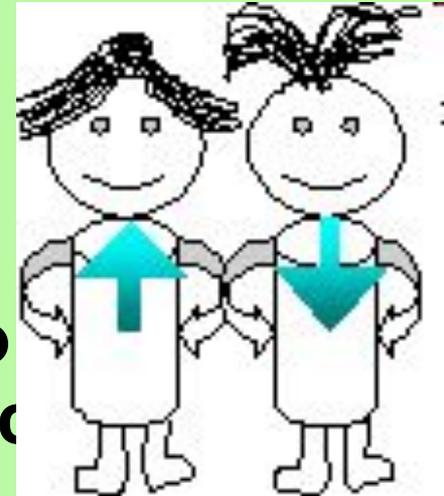
В этой зоне возникает особый тип взаимодействия электронов – обменное, которому нет классического аналога.

Состояния двух удаленных атомов H

# Обменное взаимодействие - сугубо квантовый эффект

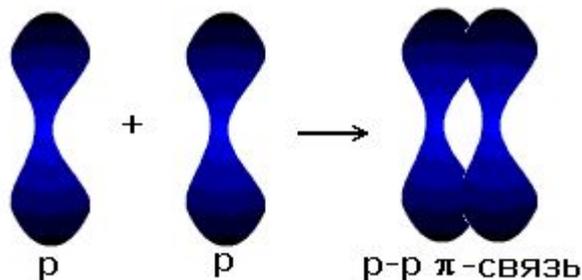
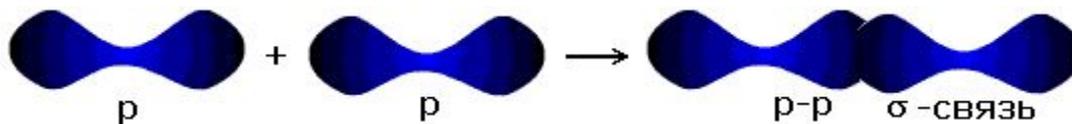
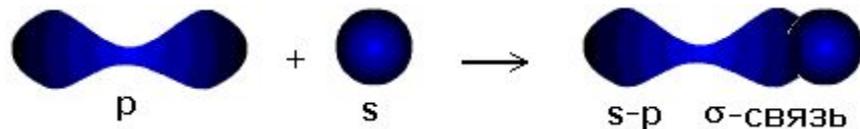
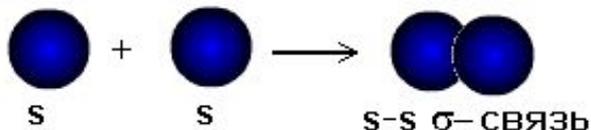
Оно зависит от взаимной  
ориентации спинов  
электронов.

- При антипараллельных  
имеет характер **притяжения**, что  
обеспечивает **ус**  
молекулы  $H_2$



# Химическая ковалентная связь в молекулах обусловлена обменным взаимодействием.

s-s- СВЯЗЬ
s-p- СВЯЗЬ
p-p- СВЯЗЬ
p-p- СВЯЗЬ



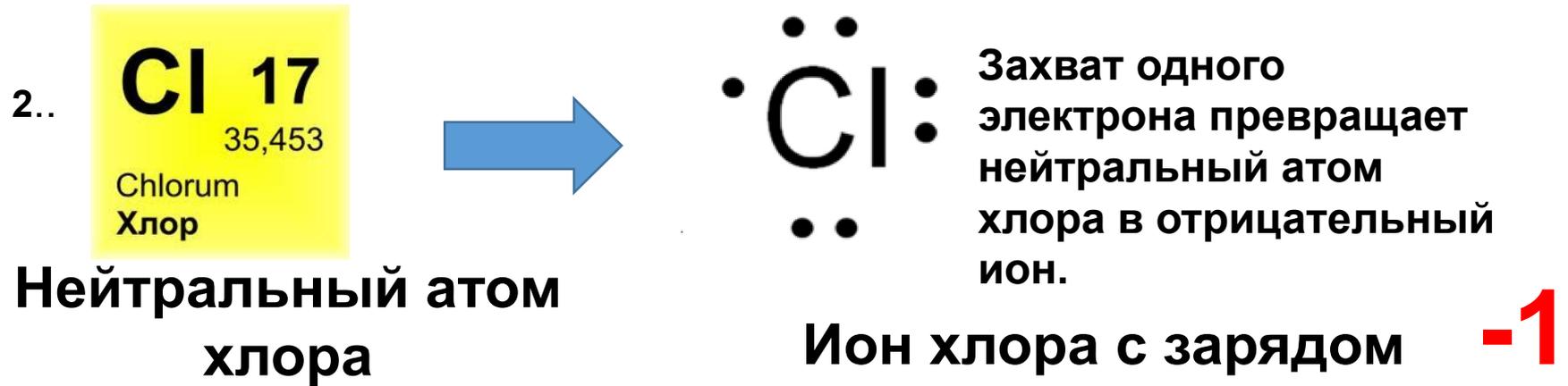
# ИОННАЯ СВЯЗЬ – ЭТО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИОНОВ НА ОСНОВЕ КУЛОНОВСКИХ СИЛ.

## 1. Образование иона натрия из нейтрального атома.



Кювета с водой, в которой валентный электрон отрывается от атома натрия.

Оторвавшийся электрон захватывается атомом хлора

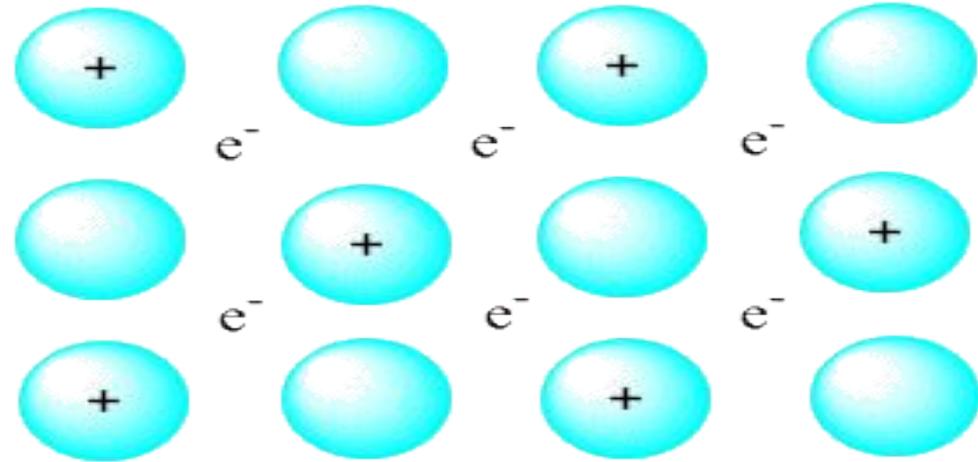
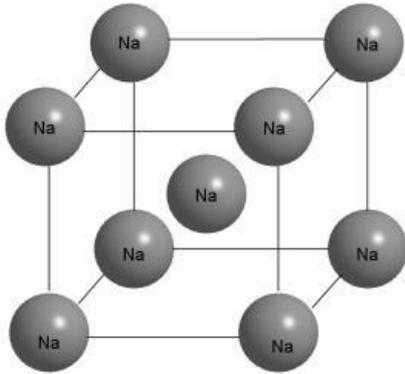


**молекула с ионной связью**



В молекуле **NaCl** ионы связаны электрическими кулоновскими силами

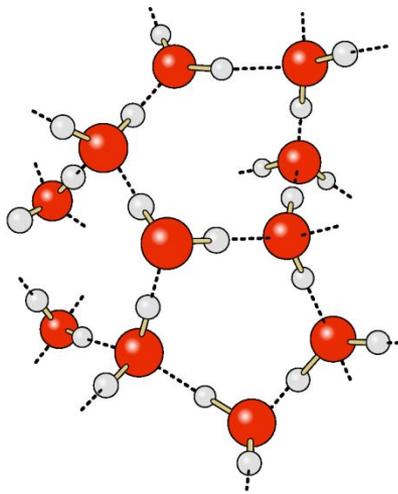
# МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ



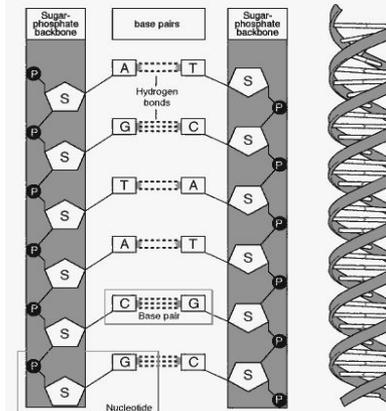
Она осуществляется благодаря тому, что в металлах есть газ свободных электронов. Они циркулируют в кристаллической решётке. Периодически каждый из них присоединяется к иону в узле кристалла и превращает его в атом, затем снова отсоединяется, формируя ион. Таким образом, катионы кристаллической решётки связаны в единое целое взаимодействием типа кулоновского.

# Водородная связь осуществляется протонами

**Межмолекулярная**  
Возникает между  
молекулами



**Возникает внутри**  
**молекулы**

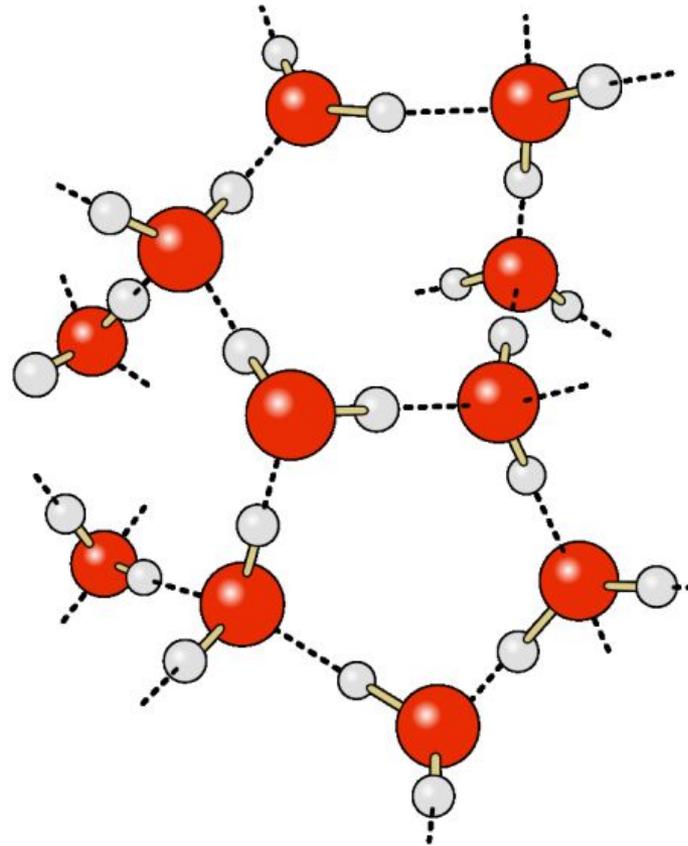


# Межмолекулярная водородная СВЯЗЬ

1) между молекулами воды

водородные связи (чёрные пунктиры) между молекулами воды приводят к возникновению *кластеров* или комплексов. Простейшим примером такого кластера может служить димер воды:

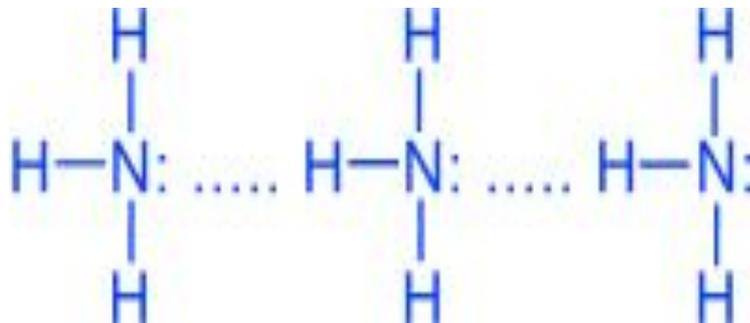
Они могут легко возникать и исчезать в результате тепловых флуктуаций.



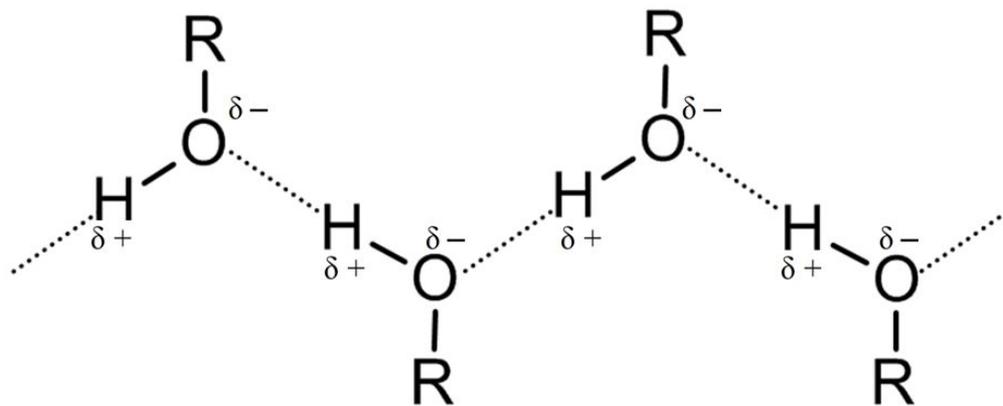
Межмолекулярные водородные связи способствуют образованию кристаллов в виде снежинок или измороси



2) между молекулами аммиака



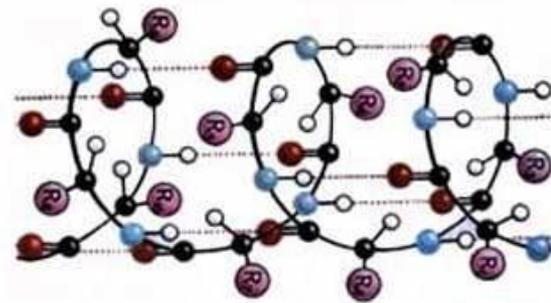
3) между молекулами спиртов



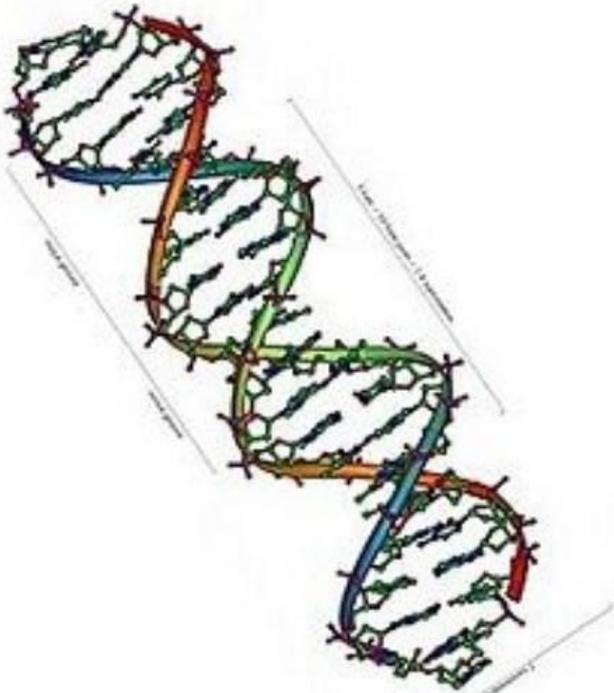
# Внутримолекулярная водородная связь

возникает

1) внутри молекул **белков** (водородная связь удерживает витки спирали пептидной молекулы)



## 2) внутри молекул РНК и ДНК (между азотистыми основаниями каждой спирали



Двойная спиральная структура ДНК определяется в значительной степени наличием **водородных связей**, сцепляющих пары нуклеотидов, которые связывают одну комплементарную нить с другой,

Она определяет основные функции ДНК и РНК (репликация, транскрипция, трансляция)