

## Задача 2. Потенциал Леннард-Джонса

Для жидкостей, состоящих из неполярных молекул, потенциальная энергия взаимодействия (по модулю) двух молекул приближенно выражается следующим образом:

$$E_0(r) = 4\varepsilon \left( \left( \frac{\alpha}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\alpha}{r} \right)^6 \right),$$

где  $r$  — расстояние между центрами молекул, а  $\varepsilon$  и  $\alpha$  — известные коэффициенты, определяемые строением молекул. Эта зависимость была предложена Джоном Эдвардом Леннард-Джонсом и достаточно хорошо описывает взаимодействие неполярных молекул.

В данной задаче мы предлагаем Вам рассчитать некоторые свойства жидкости (плотность, удельную теплоту парообразования и коэффициент поверхностного натяжения), основываясь на достаточно простых представлениях о ее строении.

### Часть 1. Две молекулы

1.1 Определите, при каком расстоянии потенциальная энергия взаимодействия минимальна и чему она равна. При каком  $r$  энергия взаимодействия равна нулю?

1.2 Качественно изобразите график зависимости  $E_0(r)$ .

### Часть 2. Структура жидкости

Будем, для простоты, считать, что молекулы жидкости располагаются в узлах кубической решетки с периодом  $a$ , т. е. в вершинах кубов со стороной  $a$ . При вычислении потенциальной энергии молекулы Вам предстоит учесть взаимодействие со всеми соседями. Разделим соседние молекулы на три группы: «близкие соседи» — молекулы, находящиеся на расстоянии  $a$ , «средние соседи» — молекулы, находящиеся на расстоянии малой диагонали куба ( $a\sqrt{2}$ ), и «дальние соседи» — молекулы, находящиеся на расстоянии большой диагонали куба ( $a\sqrt{3}$ ).

2.1 Сколько соседей каждой группы имеет молекула находящаяся внутри жидкости?

2.2 Сколько соседей каждой группы имеет молекула находящаяся на плоской поверхности жидкости?

2.3 Учитывая взаимодействия со всеми соседями, определите при каком значении периода  $a$  энергия взаимодействия молекулы, находящейся внутри жидкости, со своими соседями будет минимальна и чему она равна?

### Часть 3. Свойства жидкости

3.1 Пусть молярная масса жидкости равна  $M$ . Определите плотность жидкости  $\rho$ .

3.2 Считая, что парообразование происходит с поверхности, определите удельную теплоту парообразования жидкости  $L$ .

3.3 Определите коэффициент поверхностного натяжения жидкости  $\sigma$ .

### Часть 4. Вычислительная

4.1 Для молекул азота:  $M = 0,028 \text{ кг/моль}$ ,  $\varepsilon = 1,26 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$ ,  $\alpha = 3,70 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ . Приведите численные значения для плотности, удельной теплоты парообразования и коэффициента поверхностного натяжения жидкого азота. Постоянная Авогадро равна  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$ .