

**Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Казанский (Приволжский) федеральный университет»**

**ИНСТИТУТ ФИЗИКИ
КАФЕДРА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ
И МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

**Направление 44.04.01- Педагогическое образование
Магистерская программа: Образование в области физика**

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
(магистерская диссертация)
Углубленное изучение раздела
«Молекулярная физика» школьного курса**

Работа завершена:

Студент(ка) гр. _06-416_

“ ____ ” _____ 201_г. _____

Л.Ф.Ганеева

подпись

Работа допущена к защите:

Научный руководитель:

Зав. Кафедрой, д.ф.-м.н.,
доцент

“ ____ ” _____ 201_г. _____

А. В. Мокшин

подпись

Зав. Кафедрой, д.ф.-м.н.,
доцент

“ ____ ” _____ 201_г. _____

А.В.Мокшин

Казань - 2016

Оглавление

Аннотация.....	3
Введение	4
Глава 1. Актуальность раздела молекулярной физики	8
§ 1.1 Содержание курса физики. Проблема изучения физики в школе	8
§ 1.2 Раздел молекулярной физики. Основные задачи и элементы раздела ...	14
§ 1.3 Молекулярно - кинетическая теория	17
§ 1.4 Температура.....	21
§ 1.5 Идеальный газ в МКТ	24
§ 1.6 Броуновское движение, диффузия	29
§ 1.7 Агрегатные состояния вещества.....	32
§ 1.8 Зависимость молекулярных сил от расстояния между молекулами.	35
§ 1.9 Кристаллография	37
§ 1.10 Функция радиального распределения	43
Глава 2. Углубленное изучение раздела «Молекулярная физика» школьного курса.....	49
§ 2.1 Рекомендации по организации внеурочной работы по предмету «Физика» раздела «Молекулярная Физика».....	49
§ 2.2 Факультативный курс по разделу «Молекулярная физика»	50
§2.3 Занятие №1	54
Тема: «Актуализация знаний учащихся по разделу «Молекулярная физика (жидкость и структура)»	54
§ 2.4 Занятие №2.....	62
Тема занятия: «Трактовка современных экспериментальных данных по структуре жидкостей некоторыми современными научными подходами»....	62

§ 2.4.1 Функция радиального распределения	66
§ 2.5 Занятие №3.....	76
Тема: «Применение к различным жидкостям (простым) и состояниям с различной температурой».....	76
§ 2.6 Занятие №4.....	91
Тема: «Самостоятельная работа»	92
Заключение	95
Приложение 1. Листинг программы Matlab 2011:	96
Источник использованной литературы.....	102

Аннотация

Данная выпускная квалификационная работа включает в себя введение, основную часть, состоящую из двух глав, заключение, приложение, а также список использованной литературы.

Во введении отмечена актуальность выбранной темы.

В первой обзорной главе раскрыты общие вопросы молекулярной физики: актуальность раздела, проблема изучения физики в школе и немаловажное место занимает вопрос о роли молекулярной физики в нашей жизни. Представлена информация об агрегатных состояниях вещества.

Во второй главе приведены результаты практической части работы. На основании проделанной работы были получены следующие результаты:

1. Разработан оригинальный факультативный курс;
2. Создан программный продукт, позволяющий интерпретировать экспериментальные данные;
3. Выполнена адаптационная программа современного научного метода по трактовке структуры простых жидкостей;
4. Исследованы поведения характеристик функции распределения химического элемента в зависимости от различных температур;
5. Сформулированы выводы на основе полученных данных.

Введение

Современный мир стремительно развивается и в то же время стремительно изменяется. То, что было ново и мало кому доступно ещё 10 лет назад, сейчас доступно любому. То, что раньше использовалось всего лишь единицами - сейчас используется всеми и повсеместно. "Впервые в истории человечества поколения вещей и идей сменяются быстрее, чем поколения людей".

В последние годы активно разрабатываются новые учебные материалы по физике и корректируются имеющиеся. Усилия ученых направлены на совершенствование как учебного курса физики в целом, так и отдельных его разделов, каждый из которых имеет специфическое содержание, располагает своими возможностями для формирования у учащихся определенных знаний, умений, навыков и представлений о научной картине мира. Ведутся поиски оптимальных комплектов материалов, рассчитанных на учителя и ученика, включающих учебники, методические пособия, лабораторные работы и системы упражнений, дидактические указания.

Сказанное выше в полной мере относится и к разделу "Молекулярная физика". В разделе «Молекулярная физика» изучают молекулярно-кинетическую теорию строения вещества, основные положения которой рассматривали еще в VII классе. Изучая физику в VII и VIII классах, учащиеся научились объяснять целый ряд физических явлений, свойств веществ (свойства газов и жидкостей, твердых тел, тепловые явления и пр.) с точки зрения внутренней структуры вещества. Однако понятия, составляющие содержание соответствующих тем, изучали на уровне представлений, а все явления описывали качественно. Мы остановимся на рассмотрении старшей школы, 10 класс. При преподавании молекулярной физики в X классе знания, имеющиеся у учащихся, нужно актуализировать, углубить и расширить, довести их до уровня понятий и количественного описания явлений. В частности, в курсе физики X класса изучают основное

уравнение молекулярно-кинетической теории газов; значительно глубже, чем в VII классе, рассматривают свойства газов, жидкостей и твердых тел. В этом разделе изучается качественно новая, по сравнению с механической, форма движения материи-тепловое движение, которое подчиняется статистическим закономерностям, ранее учавшимся неизвестным.

При изучении раздела молекулярной физики школьники знакомятся с первичными понятиями статистической физики. В данном разделе изучаются явления, играющие большую роль, как в повседневной жизни человека, так и в его производственной деятельности. Особое значение приобретают знания о тепловых явлениях при решении проблем сохранения природы. В то же время, микромеханизм этих явлений скрыт от восприятия человека и познаётся только с помощью процесса моделирования.

Возможности школьного учебного оборудования для проведения самостоятельного демонстрационного и тем более самостоятельного ученического эксперимента по молекулярной физике весьма ограничены. Поэтому учащиеся стоят перед необходимостью на основе наблюдаемых явлений мысленно конструировать "микромир", опираясь на свои знания о моделях различных объектов и образном представлении процессов, явлений и опытов. Это все затрудняет понимание тепловых явлений и свойств вещества.

Следует отметить, что целесообразность применения программных пакетов для построения моделей возрастает при изучении явлений, недоступных непосредственному наблюдению. К таким, как раз, относятся явления, изучаемые в разделе "Молекулярная физика".

В настоящей работе предлагается методика углубленного изучения школьного раздела молекулярной физики, особенностью которого является сочетание современных экспериментальных данных (спектроскопия и дифракция), с доступным для понимания школьников методологическим

аппаратом (школьные понятия молекулярной физики), а также предполагается использование оригинального программного комплекса, адаптированного к проведению занятий со школьниками.

В результате усвоения материала этого курса учащимися у них должны появиться **углубленные знания** о молекулярном строении вещества и взаимодействии молекул между собой, **умения** формулировать первичные (но обоснованные) выводы о микроскопической структуре простых жидкостей и **навыки** использования современных компьютерных (вычислительных) средств для решения частных задач молекулярной физики.

Целью данного исследования является развитие оригинальной методики для углубленного изучения школьного курса молекулярной физики.

Преимуществом данного метода является то, что он предполагает в себе активное использование компьютеров, вычислительных устройств, а также предполагает использование современных(актуальных) экспериментальных данных, в результате чего сами учащиеся смогут почувствовать себя в роли исследователей. И второй немаловажный момент заключается в том, что реализуется межпредметная связь физики с химией, нет никакой оторванности от современных результатов. Еще одним плюсом можно отметить, что в результате школьники лучше усваивают раздел молекулярной физики.

Задачи исследования:

1. Разработан оригинальный факультативный курс;
2. Выполнить адаптацию современного научного метода по трактовке структуры простых жидкостей для школьного курса молекулярной физики;
3. Написать (разработать) программный продукт, позволяющий интерпретировать экспериментальные данные (по рассеянию нейтронов и рентгеновских лучей);

4. Выполнить построение алгоритма вычислений на примере простых жидкостей (рассматриваем химические элементы первой, второй и третьей группы) с помощью программного пакета Matlab.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Рассмотрен принцип проблемного обучения;
2. Разработан оригинальный факультативный курс;
3. Написан программный продукт, позволяющий интерпретировать экспериментальные данные (по дифракции нейtronов и рентгеновских лучей);
4. Изучены структурные особенности таких элементов, как Na, Li, Rb (элементы первой группы таблицы Менделеева), Ca, Mg(элементы второй группы), и элементы третьей группы -Al, In на основе компьютерного моделирования функции распределения;
5. Хорошо рассматривается межпредметное взаимодействие предметов физика-химия.

Глава 1. Актуальность раздела молекулярной физики

§1.1 Содержание курса физики. Проблема изучения физики в школе

Образование, воспитание и развитие человека являются основными задачами школы на протяжении всей её истории.

Приоритетными задачами обучения физике в общеобразовательной школе в классах любого профиля является формирование у учащихся представления о физике как части общечеловеческой культуры, развитие научного мировоззрения и мышления учащихся, ознакомление с фундаментальными понятиями и законами физики. Все эти требования сформулированы в обязательном минимуме содержания образования в Федеральном Государственном Образовательном Стандарте Среднего (Полного) Общего Образования, который утвержден приказом Минобрнауки России от 17 мая 2012 г. № 413)[1].

Проблема содержания курса естественных наук и, в частности физики, была актуальной всегда, а сегодня - особенно. Физика - не только совокупность конкретных научных результатов, приведших к изобилию наукоемкого продукта, но и развитие специфического взгляда на природу, мировоззрение, отношение к действительности, не имеющее аналогов в других сферах интеллектуальной деятельности. Обилие физического материала и глубина его описания на самом деле не нужны всем учащимся. Изучение физики не должно быть только в формулах, оно необходимо для развития основ полноценного мировоззрения и интеллекта учащегося на школьном этапе его образования и воспитания. Структура физического образования предполагает изучение в 7 – 9 классах основной школы законченного курса физики, включающего все элементы знаний, предусмотренные Российской федеральным стандартом образования [2]. Программа основной школы увеличена за счет включения электромагнитных явлений, атомной и ядерной физики. В 9 классе, начиналось изучение систематического курса

«Механика». В соответствии с новой моделью обучения, подробное изучение этого курса перенесено в 10 класс. В 10 – 11 классах вводится новая концепция старшей школы, которая предполагает профильную подготовку учащихся. В ее рамках теперь должны изучаться все основные разделы основ курса физики от механических и тепловых явлений до атомной и ядерной физики. Объем учебного материала в старшей школе существенно увеличился, что вызывает ряд объективных трудностей. Преподавание физики придётся вести, имея различное число часов, в соответствии со спецификой профиля старшей школы [3]. Кроме этого, кроме традиционных умений, в новых программах заметно расширены требования к уровню подготовки старшеклассников при объяснении фундаментальных физических экспериментов, интерпретации результатов измерений и научных наблюдений. По итогу школьники должны уметь: -предсказывать дальнейший ход физических процессов и явлений; -перерабатывать и предъявлять полученную информацию на уровне владения современными информационными технологиями.

В практике преподавания физики в школе сложилась такая ситуация: сокращение числа часов (2 часа в неделю по 7 – 11 классам) на преподавание основ естественнонаучных дисциплин привело к тому, что оказалось практически невозможным на базовом уровне должным образом изложить ряд тем учебных программ курса физики, тем более глубокое изучение какого-либо раздела физики. В нашей случае мы займемся более глубоким изучением раздела молекулярной физики на случае простых жидкостей и будем использовать программный пакет Matlab 2011.

Имеется еще одно противоречие: на всю программу выделенного времени, к сожалению, не достаточно. Поэтому в данной работе мы займемся более детальным изучением раздела молекулярной физики и создадим факультатив по внеурочной деятельности по углубленному изучению раздела молекулярной физики. Несмотря на кажущееся многообразие программ и учебников, преподавание должно быть ограничено не более чем 2 – 3

современными учебниками(УМК – учебно-методическими комплектами), ориентированными на определенный профиль обучения физики в школе.

В итоге должно быть четко определено: что ученики должны знать и уметь, чему мы должны их научить. Теперь распишем сколько отводится времени на предмет физики в старших классах.

Список рекомендуемых учебников описывается в федеральном перечне учебников, рекомендуемых к использованию при реализации имеющих государственную аккредитацию образовательных программ начального общего, основного общего, среднего общего образования [1].

Приказ Министерства образования и науки РФ вышел от 31 марта 2014 г. №253, который говорит “Об утверждении федерального перечня учебников, рекомендуемых к использованию при реализации имеющих государственную аккредитацию образовательных программ начального общего, основного общего, среднего общего образования”.

Старшая школа, общеобразовательный уровень

В старшей школе (10 – 11 классах) используются в основном пять УМК.

1)УМК - «Физика 10-11» авт. Касьянов В.А.:

10 класс: 2-3 часа в неделю. Учебник, авт. Касьянов В.А.

11 класс: 2-3 часа в неделю. Учебник, авт. Касьянов В.А.

Этот курс предназначен для учащихся общеобразовательных классов, его используют 90% россиян, для которых физика не является профильным предметом и должна изучаться в соответствии с базисным компонентом учебного плана. Основная цель – формирование у школьников представлений о методологии научного познания, роли, месте и взаимосвязи теории и эксперимента в процессе познания, об их соотношении, о структуре Вселенной и о положении человека в окружающем мире. Курс призван сформировать у учащихся мнение об общих принципах физики и основных задачах, которые она решает и рассматривается немаловажная задача осуществить экологическое образование школьников, т.е. сформировать у

них представление о научных аспектах охраны окружающей среды и постараться выработать научный поход к анализу новых явлений.

2)УМК – «Физика 10-11», авт. Мякишев Г.Я., Буховцев Б.Б., Сотский Н.Н.:
10 класс: 3-4 часа в неделю. Учебник, авт. Мякишев Г.Я., Буховцев Б.Б., Сотский Н.Н.

11 класс: 3-4 часа в неделю. Учебник, авт. Мякишев Г.Я., Буховцев Б.Б.
Физика 10 класс рассчитана на 3, и более часов в неделю, к коллективу первых двух хорошо известных авторов Мякишеву Г.Я., Буховцеву Б.Б. добавился Сотский Н.Н., написавший раздел механики, изучение которого теперь стало необходимо в старшей профильной школе.

3)УМК – «Физика 10-11», авт. Анциферов Л. И.:

10 класс: 3 часа в неделю. Учебник, авт. Анциферов Л.И.

11 класс. 3 часа в неделю. Учебник, авт. Анциферов Л.И.

В основу программы курса положен циклический принцип построения учебного материала, предусматривающий изучение физической теории, ее использование при решении задач, а также применение теории на практике. Выделены два уровня содержания образования: базовый минимум, обязательный для всех, и материал повышенной трудности, адресуемый школьникам, особо интересующимся физикой. Эти учебники трудны для общеобразовательного уровня.

4)УМК - «Физика 10-11», авт. Громов С. В.:

10 класс: 3 часа в неделю. Учебник, авт. Громов С. В.

11 класс: 2 часа в неделю. Учебник, авт. Громов С. В.

Учебники предназначены для старших классов общеобразовательных школ. Порядок изложения необычен: механика завершается главой СТО, далее следуют электродинамика, МКТ, квантовая физика, физика атомного ядра и элементарных частиц. Такая структура, по мнению автора курса, позволяет формировать в сознании учащихся более строгое представление о современной физической картине мира включают теоретическое изложение «школьной физики» [4]. Практическая часть представлена описаниями

минимального числа стандартных лабораторных работ. Много внимания уделяется историческим материалам и фактам. Эти учебники в современной школе могут использоваться в классах естественнонаучного, технического и др. профилей, с сеткой 4-5 ч. в неделю.

5)УМК - «Физика 10-11», авт. Мансуров А. Н., Мансуров Н. А. 10-11 класс. 2 часа (1час) в неделю. Учебник, авт. Мансуров А. Н., Мансуров Н. А.

По данному комплекту работают единичные школы.

Авторы попытались сформировать представление о физической картине мира.

Последовательно рассматриваются механическая, электродинамическая и квантово-статистическая картины мира, математический аппарат практически не используется и заменен словесным описанием физических моделей. Решение задач и проведение лабораторных работ не предусмотрено.

Старшая школа (10-11 класс), углубленное изучение физики:

1) УМК «Физика 10-11», под редакцией Пинского А. А.

Физика 10 класс: 6 часов и более в неделю. Учебник, под ред. Пинского А.А.

Физика 11 класс: 6 часов и более в неделю. Учебник, под ред. Пинского А.А.

Программа начинается с курса механики, в котором рассматриваются также динамика вращающегося твердого тела, закон сохранения момента импульса, законы Кеплера, подробно изучается реактивное движение. В курс 10-го класса включены разделы «МКТ и термодинамика» и «Электродинамика» (электростатика, законы постоянного тока, магнитное поле, электромагнитная индукция и электрический ток в различных средах). Курс 11-го класса включает в себя два раздела: «Колебания и волны» (электромагнитные колебания и физические основы электротехники, электромагнитные волны и физические основы радиотехники, световые волны, элементы теории относительности, а также оптические приборы) и

«Квантовая физика» (элементарные частицы, световые кванты, физика атомного ядра, физика атома)[5]. В данном учебнике предусматривается проведение большого числа лабораторных работ, а также обширный практикум.

2)УМК «Физика 10-11», Мякишев Г. Я., Синяков А. З. и др.

Физика-10: Механика. Учебник. Авторский коллектив Мякишев Г.Я., Синяков А.З. и др.

Физика-10: Молекулярная физика. Термодинамика. Учебник. Авторский коллектив Мякишев Г.Я., Синяков А.З. и др.

Физика-10–11: Электродинамика. Авторский коллектив Мякишев Г.Я., Синяков А.З. и др.

Физика-11: Колебания и волны. Учебник. Авторский коллектив Мякишев Г.Я., Синяков А.З. и др.

Физика-11 класс: Оптика. Квантовая физика. Учебник. Авторский коллектив Мякишев Г.Я., Синяков А.З. и др.

Представлено изложение основ фундаментальных физических теорий:

10-й кл. – механика и статистическая физика, электродинамика;

11-й кл. – колебания и волны, оптика, квантовая физика[5].

Данные книги предназначены для учащихся школ и классов с углубленным изучением предмета, они располагают вполне доступным математическим аппаратом также предусматривается решение большого количества задач. Качественно и грамотно изложенный учебный материал способствует формированию умения использовать полученные теоретические знания школьников, которые в дальнейшем понадобятся для поступления в физический ВУЗ. Следует отметить, что только в этих учебниках реализован углубленный уровень обучения школьников, он прекрасно продуман и методически завершен. Рекомендуется для изучения расширенного профиля, чтобы ученики свободно объясняли те или иные процессы и явления в курсе школьной физики.

§ 1.2 Раздел молекулярной физики. Основные задачи и элементы раздела

В данном разделе изучаются явления, играющие большую роль, как в повседневной жизни человека, так и в его производственной деятельности. Особое значение приобретают знания о тепловых явлениях при решении проблем сохранения природы. Микромеханизм этих явлений скрыт от восприятия человека и познать его можно только с помощью процесса моделирования.

Возможности школьного учебного оборудования (проектор, компьютеры, вычислительные машины) для проведения демонстрационного эксперимента по молекулярной физике весьма ограничены. Кроме того, даже проведение реального эксперимента не позволяет непосредственно осознавать микромеханизм явлений и внутреннюю структуру вещества. Следовательно, что приходится, на основе наблюдаемых явлений, мысленно представлять "микромир", опираясь на свои образные представления и знания о моделях различных объектов, процессов, явлений и опытов. Всё это затрудняет понимание учащихся о тепловых явлениях и свойств вещества.

Предметом исследования является методика применения программного пакета при изучении раздела "Молекулярная физика".

Молекулярная физика — раздел физики, который изучает физические свойства тел на основе рассмотрения их молекулярного строения.

Задачи молекулярной физики решаются методами статистической механики, термодинамики и физической кинетики, они связаны с изучением движения и взаимодействия частиц (атомов, молекул, ионов), составляющих физические тела.

Определим заранее, что такое **макроскопическое тело** – это тело, состоящее из большого числа частиц (Например: наша планета, машина, человек, би-

льярдный шарик), а **микроскопическое тело** – тело, состоящее из одной или нескольких частиц (Например: атом, молекула, электрон).

Первым сформировавшимся к обучению разделом молекулярной физики была кинетическая теория газов, далее в процессе её развития была создана классическая статистическая физика при помощи работ великих ученых таких как Джеймс Клерк Максвелл, Дж. У. Гиббса, Людвиг Больцман.

Количественные представления о взаимодействии молекул точнее о молекулярных силах начали развиваться в теории капиллярных явлений. Классические работы в этой области Алекси Клод Клеро (1743), С. Д. Пуассона, Пьера-Симона Лапласа (1806), Томаса Юнга (1805), Карла Фридриха Гаусса (1830—1831) и других положили начало теории поверхностных явлений.

Межмолекулярные взаимодействия были учтены Й. Д. Ван-дер-Ваальсом (1873) при объяснении физических свойств жидкостей и реальных газов.

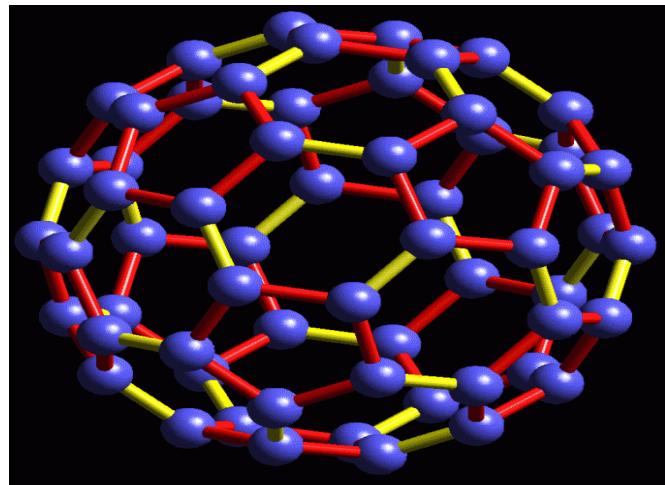


Рисунок 1. Молекула [6]

В начале XX века молекулярная физика вступила в новый этап развития. В работах Жана Батиста Перрена и Теодора Сведберга (1906), Мариан Смолуховского и Альберта Эйнштейна (1904—06), посвященных

броуновскому движению микрочастиц, были получены доказательства реальности существования молекул.

Чтобы понять, в чем разница между термодинамикой и молекулярной физикой, вспомним, что такое термодинамика. **Термодинамика** (с греч. - «тепло» и «сила») — это раздел физики, изучающий наиболее общие свойства макроскопических систем и способы передачи и превращения энергии в таких системах.

Также можно отметить, что Молекулярная физика и термодинамика – это по существу две разные по своим подходам науки, которые тесно связаны между собой и занимаются эти науки одним и тем же – изучением макроскопических свойств физических систем, только разными методами.

Молекулярная физика является **статистической** теорией, т. е. теорией, которая рассматривает поведение систем, состоящих из огромного числа частиц (атомов, молекул), на основе вероятностных моделей. Она стремится на основе статистического подхода установить связь между экспериментально измеренными макроскопическими величинами (температура, давление, объем и т.д.) и микроскопическими характеристиками частиц, входящих в состав системы (масса, энергия, импульс и т.д.).

Приведем еще одно отличие термодинамики от молекулярно-кинетической теории, термодинамика при изучении свойств макроскопических систем не опирается ни на какие представления о молекулярной структуре вещества. Она делает выводы о свойствах вещества на основе законов, установленных на опыте, таких, как закон сохранения энергии. Термодинамика оперирует только с макроскопическими величинами (температура, давление, объем и т.п.), которые вводятся на основе физического эксперимента [7].

Совместное использование термодинамики и молекулярно-кинетической теории может дать наиболее полное представление о свойствах систем,

состоящих из огромного числа частиц. Тем самым получается, что эти оба подхода, термодинамический и статистический, не противоречат, а именно, дополняют друг друга.

§ 1.3 Молекулярно-кинетическая теория

Молекулярно-кинетической теорией (МКТ) называют учение о строении и свойствах вещества на основе представления о существовании атомов и молекул как наименьших частиц химических веществ.

МКТ также это теория, объясняющая тепловые явления в макроскопических телах и свойства этих тел на основе их молекулярного строения.

Основные положения МКТ

В основе молекулярно-кинетической теории лежат три основных положения:

Первое положение: Все вещества – твердые, жидкые и газообразные – образованы из мельчайших частиц – молекул, которые сами состоят из атомов («элементарных молекул»). Молекулы химического вещества могут быть простыми и сложными, т.е. состоять из нескольких или одного атома (мельчайшая частица химического элемента, размеры атомов (их диаметр) имеет порядок 10^{-7} – 10^{-8} см). Молекулы и атомы представляют собой электрически нейтральные частицы. При определенных условиях атомы и молекулы могут приобретать дополнительный электрический заряд и превращаться либо в положительные, либо в отрицательные ионы. Стоит отметить, что различных типов атомов, в отличие от молекул, относительно немного. Все их разновидности, которые на сегодняшний день известны человеку, собраны в так называемой таблице Менделеева (Рисунок 2).



Рисунок 2. Периодическая система химических элементов Д.И.Менделеева [8]

Второе положение: Атомы и молекулы находятся в непрерывном тепловом хаотическом движении.

Так же, как и в рассматриваемых выше примерах, важно понимание не только количественных аспектов этого движения, но и качественных для различных веществ.

Молекулы и атомы жидких тел совершают колебания, но из-за больших размеров межмолекулярного пространства иногда меняются местами друг с другом; молекулы и атомы твёрдых тел совершают лишь небольшие колебания относительно своего постоянного положения; частички газа, в свою очередь, практически не сталкиваясь, свободно перемещаются в пространстве.

Третье положение: Частицы взаимодействуют друг с другом силами, имеющими электрическую природу. Гравитационное взаимодействие между частицами пренебрежимо мало.

Взаимодействие это носит электромагнитный характер (взаимодействия ядер и электронов атома) и действует в обе стороны (как притягивание, так и отталкивание).

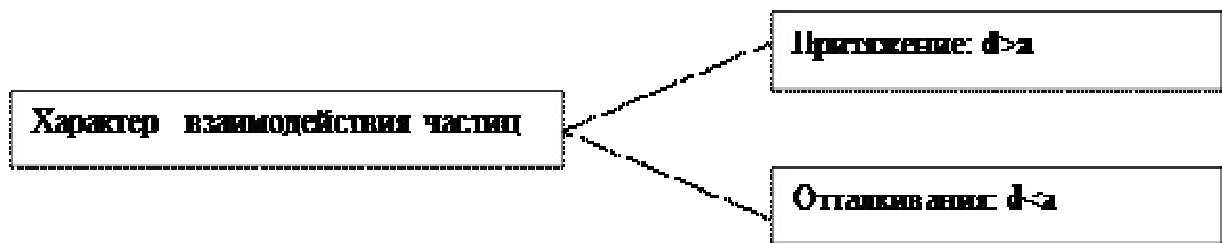


Рисунок 3. Два вида взаимодействия частиц. Здесь: **a** – размеры частиц (диаметр), **d** – расстояние между частицами.

Масса и размеры молекул

1. Массы молекул и атомов очень малы. Например, масса одной молекулы водорода равна примерно $3,34 \cdot 10^{-27}$ кг, кислорода - $5,32 \cdot 10^{-26}$ кг. Масса одного атома углерода: $m_{0C}=1,995 \cdot 10^{-26}$ кг.

Отношение массы вещества m к числу молекул N в данном веществе-масса молекул.

2. Для веществ, молекулы которых состоят из одного атома, часто используется термин **атомная масса**.

За единицу массы атомов и молекул принимается $1/12$ массы атома изотопа углерода ^{12}C (с массовым числом 12). Она называется **атомной единицей массы** (а. е. м.): $1 \text{ а. е. м.} = 1,66 \cdot 10^{-27}$ кг.

Эта величина практически совпадает с массой нейтрона или протона. Отношение массы атома или молекулы данного вещества к $1/12$ массы атома углерода ^{12}C называется **относительной массой**.

Относительной молекулярной (или атомной) массой вещества M_r называют отношение массы молекулы (или атома) данного вещества к $1/12$ массы атома изотопа углерода (атомная единица массы)[9]:

$$M_r = \frac{m_0}{1/12 m_{0C}} \quad (1.3.1)$$

$$[M_r] = 1 \text{ а.е.м.} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$$

3. Количество вещества - это отношение числа молекул (атомов- в атомарном веществе, молекул- в молекулярном веществе) N в данном теле к числу молекул (атомов) в $0,012$ кг углерода (в моле вещества) N_A (то есть, к постоянной Авагадро):

$$\nu = \frac{N}{N_A}, [\nu] = 1 \text{ моль} \quad (1.3.2)$$

4. Единица количества вещества называется **молем** (моль).

Моль – это количество вещества, содержащее столько же частиц (молекул), сколько содержится атомов в $0,012$ кг углерода ^{12}C . Молекула углерода состоит из одного атома.

5. Количество молекул (или атомов) в 1 моле вещества называют *постоянной Авогадро*:

$$N_A = \frac{N}{\nu} = \frac{m}{\nu m_{0C}} = \frac{0,012 \text{ кг}}{1,995 \cdot 10^{-26} \text{ кг} \cdot 1 \text{ моль}} = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1} \quad (1.3.3)$$

Постоянная Авогадро важнейшая постоянная в молекулярно-кинетической теории.

6. *Молярная масса* вещества- это масса 1 моля вещества:

$$\mathcal{M} = m_0 N_A, [\mathcal{M}] = 1 \text{ кг/моль} \quad (1.3.4)$$

Молярная масса равна произведению массы m_0 одной молекулы данного вещества на постоянную Авогадро.

И, наконец, Молярная и относительная молекулярная массы вещества связаны соотношением:

$$M = M_r * 10^{-3} \text{ кг/моль} \quad (1.3.5)$$

§ 1.4 Температура

Температура (от лат. *temperatura* - надлежащее смешение, нормальное состояние) - физическая величина, которая характеризует состояние теплового равновесия системы тел: все тела системы, находящиеся друг с другом в тепловом равновесии, имеют одну и ту же температуру.

Температура относится к интенсивным величинам, т.к. не зависит от массы системы.

Любое макроскопическое тело или группа макроскопических тел называется *термодинамической системой*.

Тепловое (термодинамическое равновесие) - это такое состояние термодинамической системы, при котором все ее макроскопические параметры (давление, объем, не происходит теплообмен) остаются неизменными, отсутствуют переходы из одного агрегатного состояния вещества в другое и т.д.

Введем понятие Абсолютный нуль температуры - это некая предельная температура, при которой давление идеального газа при постоянном объеме

должно быть равно нулю или должен быть равен нулю объем идеального газа при постоянном давлении.

Прибором для измерения температуры является **термометр**. Обычно термометры градуируют по шкале Цельсия: температура кипения воды - 100°C , температуре кристаллизации воды (таяния льда) соответствует 0°C .

Абсолютную шкалу температур ввел Кельвин, согласно которой нулевая температура соответствует абсолютному нулю, единица измерения температуры по шкале Кельвина равна градусу Цельсия: $[T] = 1 \text{ K}$ (Кельвин).

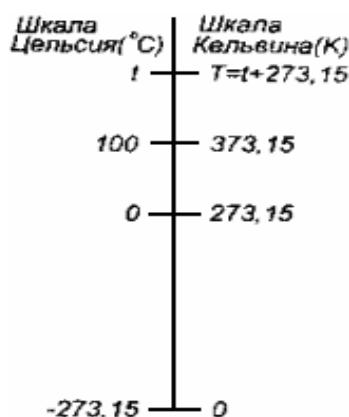


Рисунок 4. Шкала по Цельсию и Кельвину

Связь температуры в энергетических единицах и температуры в градусах Кельвина:

$$\Theta = kT, \text{ где } k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К} \quad (1.4.1)$$

постоянная Больцмана

Связь абсолютной шкалы и шкалы Цельсия:

$$T = t + 273, \text{ где } t - \text{температура в} \quad (1.4.2)$$

градусах Цельсия

Средняя кинетическая энергия хаотического движения молекул газа пропорциональна абсолютной температуре:

$$\bar{E} = \frac{3}{2}kT \quad (1.4.3)$$

$$\frac{m_0 \bar{v}^2}{2} = \frac{3}{2}kT \Rightarrow \bar{v}^2 = \frac{3kT}{m_0} \quad (1.4.4)$$

Средняя квадратичная скорость молекул:

$$v = \sqrt{\frac{3kT}{m_0}} \quad (1.4.5)$$

Учитывая равенство (1.4.3), основное уравнение молекулярно-кинетической теории можно записать так:

$$p = nkT \quad (1.4.6)$$

Скорость движения молекул

Несмотря на беспорядочный характер движения молекул, их распределение по скоростям носит характер определенной закономерности, которая называется **распределением Максвелла [9]**.

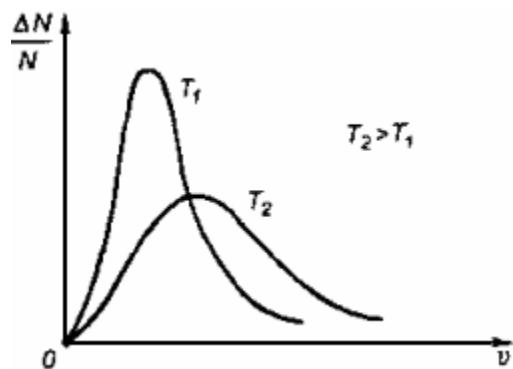


Рисунок 5. Скорость движения молекул

График, характеризующий это распределение, называют кривой распределения Максвелла. Она показывает, что в системе молекул при данной температуре есть очень медленные и очень быстрые молекулы. Большая часть молекул движется с определенной скоростью, ее

называют наиболее вероятной. С увеличением температуры эта наиболее вероятная скорость начинает увеличиваться.

§ 1.5 Идеальный газ в МКТ

Идеальный газ - это упрощенная физическая модель газа, взаимодействие между молекулами которого пренебрежительно мало, понятие вводится для математического описания поведения газов.

Его свойства:

- молекулы газа считаются материальными точками;
- взаимодействие между молекулами пренебрежительно мало;
- расстояние между молекулами намного больше размеров молекул;
- молекулы, соударяясь с препятствиями, испытывают упругие взаимодействия;
- отталкивание молекул возможно только при соударении;
- движение молекул – подчиняется законам механики (законам Ньютона).

Реальные газы ведут себя подобно идеальным при достаточно больших разрежениях, когда расстояния между молекулами во много раз больше их размеров.

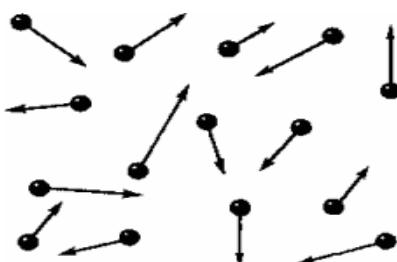


Рисунок 6. Поведение молекул идеального газа

Основное уравнение молекулярно-кинетической теории можно записать в виде:

$$p = \frac{2}{3} n \bar{E} \quad (1.5.1)$$

$$v = \sqrt{\bar{v}^2} = \sqrt{\frac{2\bar{E}}{m_0}} = \sqrt{\frac{3p}{m_0 n}} \quad (1.5.2)$$

v - называют средней квадратичной скоростью.

Уравнение состояния идеального газа

Пусть газ массой m занимает объем V при температуре T и давлении p , а M - молярная масса газа. По определению, концентрация молекул газа: $n = N/V$,

$$N = \frac{m}{M} N_A \Rightarrow n = \frac{m N_A}{V M} \quad (1.5.3)$$

где N -число молекул.

Подставим это выражение (1.5.3) в основное уравнение молекулярно-кинетической теории:

$$p = n k T = \frac{m N_A}{V M} k T \Rightarrow p V = \frac{m}{M} k N_A T \quad (1.5.4)$$

$$R = k N_A = 8,31 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)} \quad (1.5.5)$$

Величина R – универсальная газовая постоянная, а уравнение, записанное в виде:

$$p V = \frac{m}{M} R T \text{ или } p V = n R T \quad (1.5.6)$$

Уравнение Клапейрона - Менделеева — это уравнение состояния идеального газа, связывающее три макроскопических параметра, таких как давление, объем, температуру данной массы газа.

Нормальные условия — это такие условия, когда давление газа равно атмосферному ($p = 101,325$ кПа) при температуре таяния льда ($T = 273,15\text{ K}$).

Рассмотрим, что такое Изопроцесс. Это процесс, при котором один из макроскопических параметров состояния данной массы газа остается постоянным.

1. Изотермический процесс — это процесс изменения состояния термодинамической системы (определенной массы газа) при постоянной температуре ($T=\text{const}$)[9].

Если $T = \text{const}$, то

$$pV = \frac{m}{M}RT \Rightarrow pV = \text{const} \quad (1.5.7)$$

Закон Бойля-Мариотта: Для данной массы газа произведение давления газа на его объем постоянно, если температура газа не меняется: $p_1V_1 = p_2V_2$ при $T = \text{const}$, где p_1, p_2, V_1, V_2 — давление и объем газа в начальном и конечном состояниях.

График изменения макроскопических параметров газа, происходящего при постоянной температуре, называется изотермой (Рисунок 7).

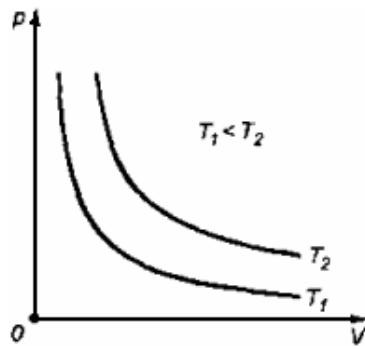


Рисунок 7. Изотермический процесс

2. Изобарный процесс - процесс изменения состояния термодинамической системы при постоянном давлении .

$$\text{Если } p = \text{const, то } pV = \frac{m}{M}RT \Rightarrow \frac{V}{T} = \text{const} \quad (1.5.8)$$

Закон Гей-Люссака: Объем данной массы газа при постоянном давлении прямо пропорционален абсолютной температуре:

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2} \quad \text{при } p = \text{const} \quad (1.5.9)$$

V_1, V_2, T_1, T_2 — объем и температура газа в начальном и конечном состояниях.

Если газ, имея объем V_0 находится при нормальных условиях:

$T_0 = 273 K$, $p \approx 10^5 Pa$, а затем при постоянном давлении переходит в состояние с температурой T и объемом V , то можно записать [9]:

$$\frac{P_0}{T_0} = \frac{P}{T} \Rightarrow P = P_0 \cdot \frac{T}{T_0} \quad (1.5.10)$$

Обозначив,

$$\alpha = \frac{1}{T_0} = \frac{1}{273} K^{-1} \quad (1.5.11),$$

$$\text{получим } V = V_0 \alpha T \quad (1.5.12)$$

α - это температурный коэффициент объемного расширения газов.

График процесса, происходящего при постоянном давлении, называется **изобарой**, изображен ниже (Рисунок 8).

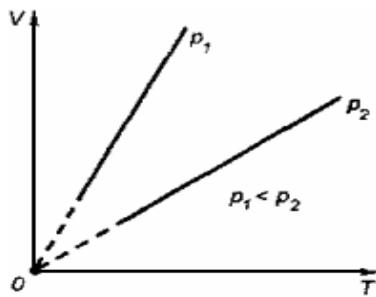


Рисунок 8. Изобарный процесс

3. Изохорный процесс - процесс изменения состояния термодинамической системы при постоянном объеме называют изохорным. Если $V = \text{const}$, то

$$pV = \frac{m}{M}RT \Rightarrow \frac{P}{T} = \text{const} \quad (1.5.13)$$

Закон Шарля: Давление данной массы газа при постоянном объеме прямо

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2} \quad \text{при } V = \text{const} \quad (1.5.14)$$

пропорционально абсолютной температуре:

где p_1, p_2, T_1, T_2 — давление и температура газа в начальном и конечном состояниях.

Если газ, имея объем V_0 , находится при нормальных условиях:

$T_0 = 273 K, p \approx 10^5 Pa$, а затем, сохраняя объем, переходит в состояние с температурой T и давлением p , то можно записать:

$$\frac{p_0}{T_0} = \frac{p}{T} \Rightarrow p = p_0 \cdot \frac{T}{T_0} \quad (1.5.15)$$

Изохора — график изменения макроскопических параметров газа при изохорном процессе, изображен ниже (Рисунок 9).

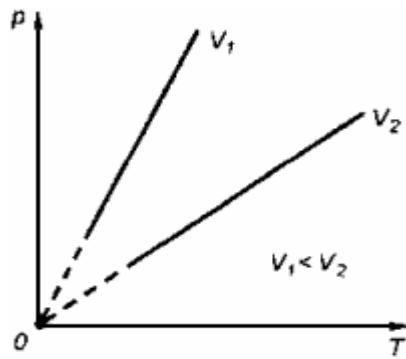


Рисунок 9. Изохорный процесс

Итак, рассмотрели идеальный газ в МКТ, идем далее по основам молекулярно-кинетической теории.

§ 1.6 Броуновское движение, диффузия

Одним из самых ярких экспериментальных подтверждений представлений молекулярно-кинетической теории о беспорядочном движении атомов и молекул является **броуновское движение** (Рисунок 10).

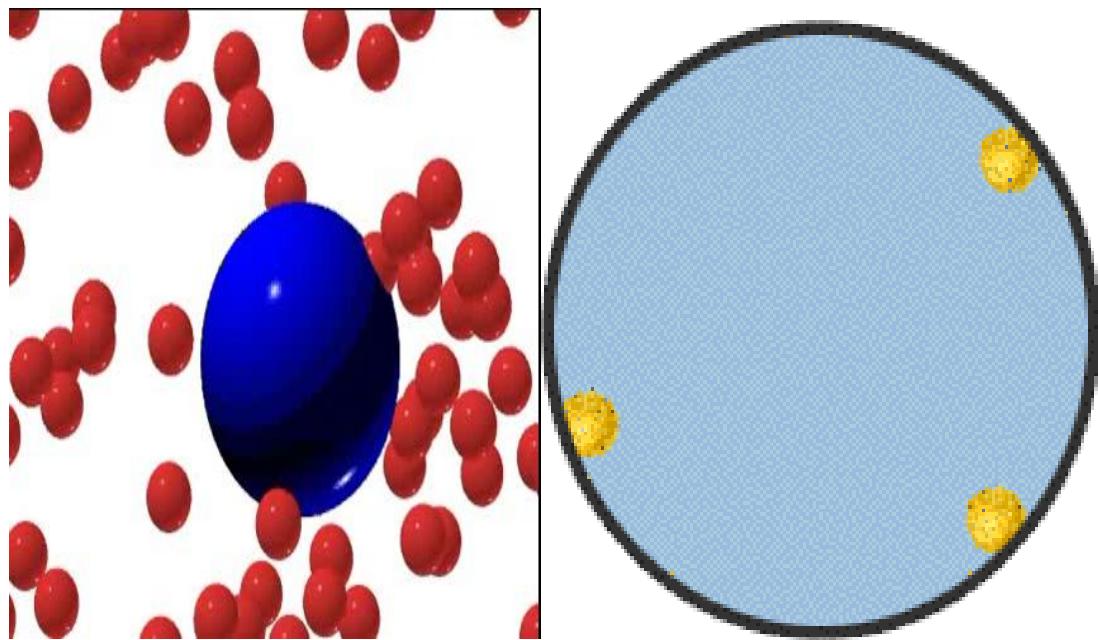


Рисунок 10. Траектория броуновской частицы[10]

Броуновское движение открыл английский ботаник Р.Броун в 1827 г..Это тепловое движение мельчайших микроскопических частиц, взвешенных в жидкости или газе.Броуновские частицы движутся под влиянием беспорядочных ударов молекул. Из-за хаотического теплового движения молекул эти удары никогда не уравновешиваются друг друга.Наблюдение Броуна были подтверждены и другими учеными. Мельчайшие частички вели себя так, как будто живые, причем «хаос» частиц ускорялся с повышением температуры и с уменьшением размера частиц и явно замедлялся при замене воды более вязкой средой. Это удивительное явление можно было наблюдать очень долго. В результате скорость броуновской частицы беспорядочно меняется по модулю и направлению, а ее траектория представляет собой сложную зигзагообразную кривую. Теория броуновского движения была создана **А. Эйнштейном** в 1905 г.(Рисунок 11). Экспериментально теория Эйнштейна была подтверждена в опытах французского физика **Ж. Перрена**,

проведенных в 1908–1911 гг.(Рисунок 12).

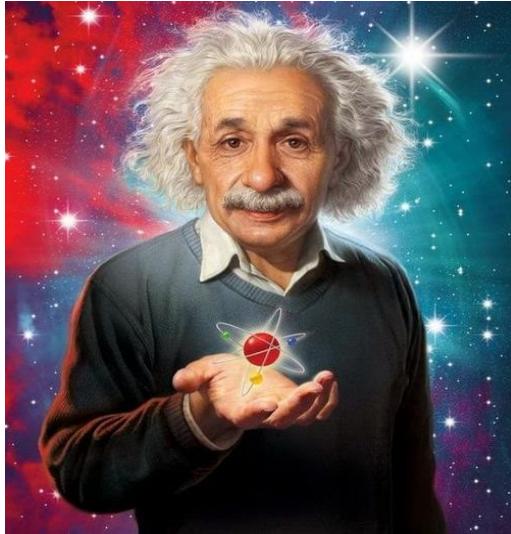


Рисунок 11. А. Эйнштейн [11]

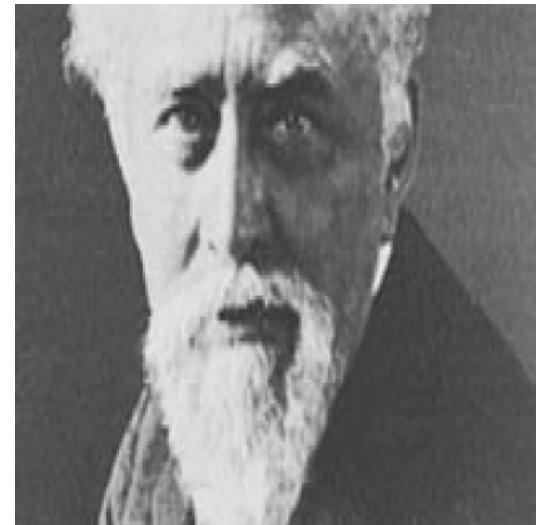


Рисунок 12. Французский физик
Ж.Перрен[12]

Главный вывод теории А. Эйнштейна состоит в том, что квадрат смещения $\langle r^2 \rangle$ броуновской частицы от начального положения, усредненный по многим броуновским частицам, пропорционален времени наблюдения t .

$$\langle r^2 \rangle = Dt \quad (1.6.1).$$

Это соотношение выражает так называемый **диффузионный закон**. Коэффициент пропорциональности D монотонно возрастает с увеличением температуры.

Также следует отметить, что постоянное беспорядочное движение молекул вещества проявляется также в еще одном легко наблюдаемом явлении – **диффузии**.

Диффузия -явление проникновения двух или нескольких соприкасающихся веществ друг в друга. Наиболее быстро процесс протекает в газе, если он

неоднороден по составу. Явление диффузии приводит к образованию однородной смеси независимо от плотности компонентов.

Значительно медленнее протекают подобные процессы перемешивания в жидкостях, взаимопроникновение двух разнородных жидкостей друг в друга, растворение твердых веществ в жидкостях (например, сахара в воде, соли в воде) и образование однородных растворов – примеры диффузионных процессов в жидкостях.

И, наконец, самый медленно – протекающий процесс диффузии происходит в твердых телах. Однако, опыты показывают, что при контакте хорошо очищенных поверхностей двух металлов через длительное время в каждом из них обнаруживается атомы другого металла.

Из выше сказанного следует, что диффузия и броуновское движение – родственные явления.

Взаимопроникновение (перемешивание) соприкасающихся веществ друг в друга и беспорядочное движение мельчайших частиц, взвешенных в газе или жидкости, происходит вследствие теплового хаотичного движения молекул.

§ 1.7 Агрегатные состояния вещества

Как уже упоминалось выше, вещество может находиться в трех агрегатных состояниях: твердом, жидком и газообразном. Напомним, что **молекулярная физика** – раздел физики, в котором изучаются физические свойства тел в различных агрегатных состояниях на основе их молекулярного строения (Рисунок 13).



Рисунок 13. Состояния вещества: жидкое, газообразное, твердое

В **газах** расстояние между молекулами во много раз больше размеров самих молекул. Молекулы в газе движутся хаотично. Газы не сохраняют ни объема, ни формы. Силы взаимодействия (притяжения) между молекулами на таких больших расстояниях очень малы, и каждая молекула движется вдоль прямой линии до очередного столкновения с другой молекулой или со стенкой сосуда. Среднее расстояние между молекулами воздуха при **нормальных условиях** порядка 10^{-8} м, т. е. в десятки раз превышает размер молекул (молекулы имеют чрезвычайно малые размеры; простые одноатомные молекулы имеют размер порядка 10^{-10} м, а сложные многоатомные молекулы могут иметь размеры в сотни и тысячи раз больше).

Слабое взаимодействие между молекулами объясняет способность газов расширяться и заполнять весь объем сосуда.

Жидкость

Молекулы расположены практически в плотную друг к другу. Молекулы совершают колебания около положения равновесия, время от времени перескакивают из одного оседлого состояния в другое. **Жидкости** плохо сжимаются и сохраняют свой объем, они текучи и принимают форму сосуда,

в который налиты. Молекулы сравнительно медленно изменяют положение друг относительно друга.

В жидкостях молекулы имеют значительно большую свободу для теплового движения. Они не привязаны к определенным центрам и могут перемещаться по всему объему. Этим объясняется текучесть жидкостей.

Близко расположенные молекулы жидкости также могут образовывать упорядоченные структуры, содержащие несколько молекул. Это явление называется **ближним порядком** в отличие от **дальнего порядка**, характерного для кристаллических тел.

Твердое тело

Молекулы расположены в строгом порядке, близко друг к другу. Они колеблются около определенных положений равновесия (фиксированных центров). Эти центры могут быть расположены в пространстве нерегулярным образом (**аморфные тела**) или образовывать упорядоченные объемные структуры (**кристаллические тела**).

Молекулярные силы притяжения велики. Твердые тела сохраняют свою форму и объем. При деформации возникают силы, стремящиеся восстановить его форму и объем, стремятся вернуть в прежнее состояние [13].

Движение молекул в этих трех состояниях показаны на рисунке 14.



Рисунок 14. Агрегатные состояния вещества [14]

§ 1.8 Зависимость молекулярных сил от расстояния между молекулами.

Силы, действующие между двумя молекулами, зависят от расстояния между ними. Молекулы представляют собой сложные пространственные структуры, содержащие как положительные, так и отрицательные заряды. Если расстояние между молекулами достаточно велико, то преобладают силы межмолекулярного притяжения, а если расстояние мало, то преобладают силы отталкивания. Зависимости результирующей силы F и потенциальной энергии E_p взаимодействия между молекулами от расстояния между их центрами качественно изображены на рисунке 15. При некотором расстоянии $r = r_0$ сила взаимодействия обращается в нуль, это расстояние условно можно принять за диаметр молекулы. Потенциальная энергия взаимодействия при $r = r_0$ минимальна. Чтобы удалить друг от друга две молекулы, находящиеся на расстоянии r_0 , нужно сообщить им дополнительную энергию E_0 . Величина E_0 называется **глубиной потенциальной ямы или энергией связи** (Рисунок 15) [15].

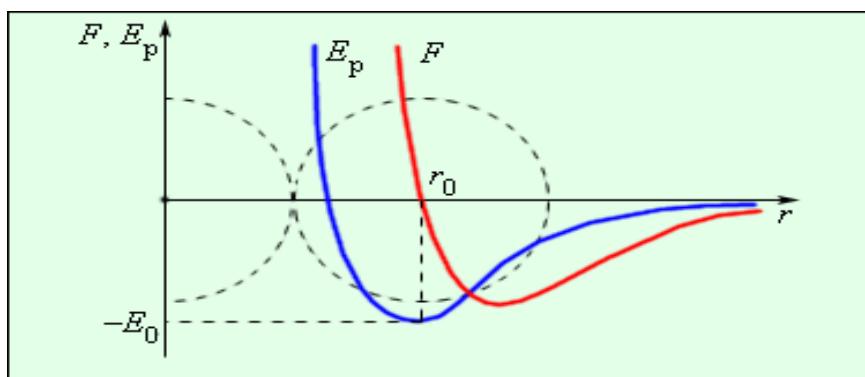


Рисунок 15. Сила взаимодействия F и потенциальная энергия взаимодействия E_p двух молекул (если $F > 0$ – сила отталкивания, когда $F < 0$ – сила притяжения [15])

На расстояниях, превышающих 2-3 диаметра молекул, сила отталкивания практически равна нулю. Заметна лишь сила притяжения.

Теперь посмотрим на рисунок 8, там изображена зависимость проекции силы отталкивания от расстояния между центрами молекул (верхняя кривая), проекции силы притяжения (нижняя кривая) и проекция результирующей силы (средняя кривая). Проекция силы отталкивания положительна, а проекция силы притяжения отрицательна. Тонкие вертикальные линии проведены для удобства выполнения сложения проекций сил [16].

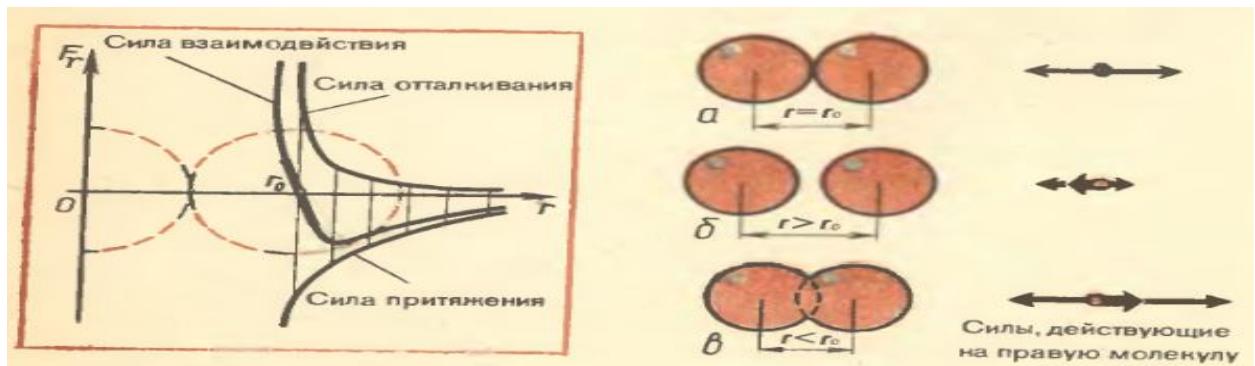


Рисунок 16.Примерная зависимость проекции силы отталкивания от расстояния между центрами молекул (верхняя кривая), проекции силы притяжения (нижняя кривая) и проекция результирующей силы (средняя кривая) [16].

На расстоянии r_0 , равном примерно сумме радиусов молекул, проекция результирующей силы $F_r = 0$, так как сила притяжения равна по модулю силе отталкивания (рис. ,16 а). При $r > r_0$ сила притяжения превосходит силу отталкивания и проекция результирующей силы (жирная стрелка) отрицательна (рис 16, б). Если $r \rightarrow \infty$, то $F_r \rightarrow 0$. На расстояниях $r < r_0$ сила отталкивания превосходит силу притяжения (рис. 16, в).

Кинетическая энергия теплового движения молекул (беспорядочное, хаотическое) растет с возрастанием температуры. При низких температурах средняя кинетическая энергия молекулы может оказаться меньше глубины

потенциальной ямы E_0 . В этом случае молекулы конденсируются в жидкое или твердое вещество; при этом среднее расстояние между молекулами будет приблизительно равно r_0 . При повышении температуры средняя кинетическая энергия молекулы становится больше E_0 , молекулы разлетаются, и образуется газообразное вещество (Рисунок 14) [16].

§ 1.9 Кристаллография

Кристаллография — наука о кристаллах, их структуре, возникновении и свойствах. Она тесно связана с минералогией, физикой твёрдого тела и химией. Исторически кристаллография возникла в рамках минералогии, как наука, описывающая идеальные кристаллы.

Истоки кристаллографии можно усмотреть ещё в античности, когда греки предприняли первые попытки описания кристаллов, большое значение придавалось их форме. Ими же была создана геометрия, выведены пять платоновых тел и сконструировано множество многогранников, позволяющих описывать форму кристаллов.

Впервые в России предпринял точные кристаллографические исследования - Н. И. Кокшаров, а полная классификация кристаллографической группы была получена Е. С. Фёдоровым.

Кристаллография — одна из главных фундаментальных наук о Земле, ее веществе. Это наука не только о кристаллах — о процессах их образования, об их внешней форме, внутреннем строении и физических свойствах, — но и о закономерностях развития Земли, ее формы, о процессах, происходящих в глубинах геосфер [17].

Кристаллы изображены на рисунке 17.



Рисунок 17. Кристаллы [18]

В природе существует два предельных состояния дискретной материи - хаос и идеальный кристалл. Все остальные состояния - промежуточные между этими двумя. **Идеальный кристалл** – твердое тело, в котором составляющие его основу структурные единицы (атомы, ионы, молекулы и пр.) расположены строго периодически, образуя геометрически закономерную кристаллическую структуру. **Кристаллография** - фундаментальная наука об атомном строении, образовании и физических свойствах кристаллов. Эти три аспекта рассматриваются вместе как единая комплексная проблема. Подразделяют кристаллографию на физическую кристаллографию (кристаллофизику, которая изучает физические свойства кристаллов — тепловые, механические и оптические), геометрическую кристаллографию (изучает формы кристаллов, внешнее и внутреннее строение), кристаллогенез (изучает образование и рост кристаллов) и химическую кристаллографию ((кристаллохимию), которая изучает связь между химическим составом вещества и его физическими и химическими свойствами) .

Задачи кристаллографии входит всестороннее исследование свойств кристаллического вещества, три из которых наиболее важные:

1. Описание и классификация кристаллов;

2. Определение вещества по формам (внешней огранке) кристаллов, физическим способностям;

3. Изучение строения вещества и физических свойств.

В огранке любого кристалла можно выделить грани, ребра и вершины: грани кристалла пересекаются по ребрам, последние же сходятся в вершинах. Между ними устанавливается следующая зависимость (формула Эйлера-Декарта) Границы+Вершины-Ребра=2 .

Среди основных свойств кристаллов можно выделить три самых важных:

1. Прямореберность и плоскогранность;

2. Анизотропия (неодинаковые свойства в разных направлениях, но равные в симметрично-эквивалентных направлениях);

3. Однородность (равные свойства в параллельных направлениях, так как все параллельные направления равнозначны).

Твердые тела отличаются постоянством формы и объема и делятся на кристаллические и аморфные.

Кристаллические тела (кристаллы)- это твердые тела, атомы или молекулы которых занимают упорядоченные положения в пространстве.

Частицы кристаллических тел образуют правильную **кристаллическую пространственную решетку**(Рисунок 18).

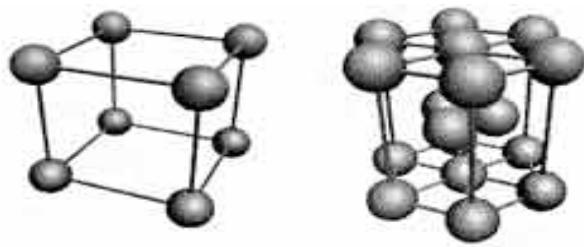


Рисунок 18. Кристаллическая решетка [20]

Каждому химическому веществу, находящемуся в кристаллическом состоянии, соответствует определенная кристаллическая решетка, которая задает физические свойства кристалла.

Также стоит отметить, что кристаллы могут иметь различные формы и ограничены плоскими гранями.

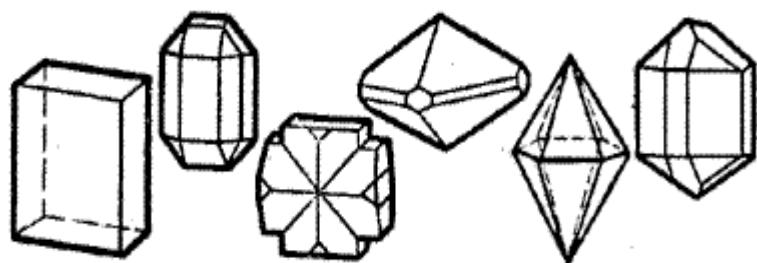


Рисунок 19. Различные формы кристаллов [20]

Анизотропия кристаллов

В кристаллах наблюдается **анизотропия** - зависимость физических свойств (механической прочности, электропроводности, теплопроводности, преломления и поглощения света, дифракции и др.) от направления внутри кристалла.

В природе существуют кристаллические тела двух видов:

- а) **монокристаллы** - это одиночные однородные кристаллы, имеющие форму правильных многоугольников и обладающие непрерывной кристаллической решеткой;
- б) **поликристаллы** - это кристаллические тела, сросшиеся из мелких, хаотически расположенных кристаллов.

В основном твердые тела имеют поликристаллическую структуру (сахар, камни, металлы, песок).

В **поликристаллах** (например, огромный кусок металла) анизотропия в обычном состоянии не проявляется. Поликристаллы состоят из большого количества мелких кристаллических зерен. Хотя каждый из них обладает анизотропией, но за счет беспорядочности их расположения поликристаллическое тело в целом утрачивает анизотропию. Анизотропия наблюдается в большей части в **монокристаллах**.

Любое кристаллическое вещество плавится и кристаллизуется при строго определенной **температуре плавления**: железо — при 1530° , кварц — при 1713° , олово — при 232° , ртуть — при минус 38° .

Таким образом, нарушить порядок расположения в кристалле частицы могут, только если он начал плавиться.

Пока есть порядок частиц, есть кристаллическая решетка – это значит, что существует кристалл. Нарушился строй частиц - значит, кристалл расплавился - превратился в жидкость, или испарился - перешел в пар.

Аморфные тела не имеют строгого порядка в расположении атомов и молекул (стекло, янтарь, смола).



Рисунок 20. Аморфное тело [20]

В аморфных телах наблюдается **изотропия**, то есть их физические свойства одинаковы по всем направлениям.

При внешних воздействиях эти тела обнаруживают **одновременно** упругие свойства (при ударах раскалываются на куски как твердые тела) и текучесть (при длительном воздействии текут как жидкости). При низких температурах аморфные тела по своим свойствам напоминают твердые тела, а при высоких температурах - подобны очень вязким жидкостям.

Аморфные тела не имеют определенной температуры плавления, а значит, и температуры кристаллизации.

Аморфные тела занимают некое **промежуточное положение** между кристаллическими твердыми телами и жидкостями.

При нагревании они постепенно размягчаются. Если остывание происходит очень быстро, то частицы не успевают построиться правильными рядами и расплав затвердевает некристаллическим. Так, если вылить расплавленный сахар в холодную воду или на очень холодное блюдо, образуется сахарный леденец, некристаллический сахар.

§ 1.10 Функция радиального распределения

Исследование структурных особенностей веществ, в частности, выявление ближнего (жидкости и аморфные тела) и дальнего порядка (кристаллы, твердые тела), осуществляется через радиальную функцию распределения частиц (*Radial Distribution Function - RDF*) [21]. Структура и равновесные свойства многоатомных жидкостей характеризуется набором функций распределений положений атомов. Наиболее простой является функция распределения частиц $g(r)$. Эта функция определяет вероятность нахождения пары атомов на расстоянии r друг от друга [22]. Схематически, принцип вычисления функции распределения представлено на рисунке 21, где r – радиус воображаемой сферы (в трехмерном случае) с толщиной слоя Δr .

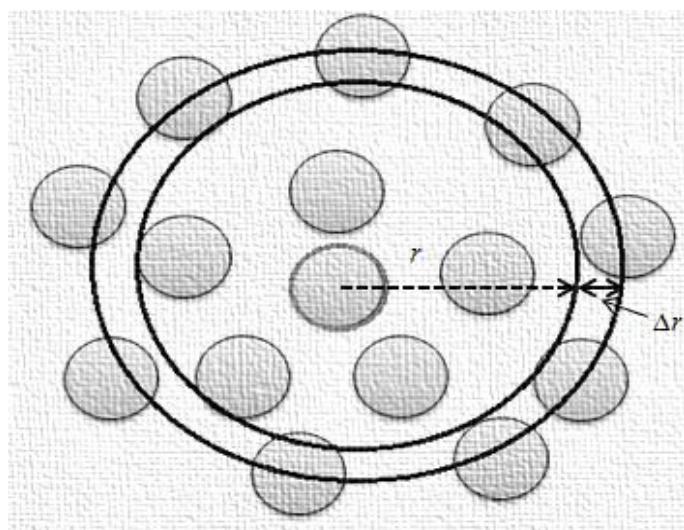


Рисунок 21. Примерная схема вычисления радиальной функции распределения частиц [23]

Таким образом, сфера будет иметь объем $4\pi r^2/3$ или площадь поверхности с приращением $4\pi * r^2 \Delta r$. В итоге, распределение плотности частиц в зависимости от расстояния r можно определить через выражение:

$$4\pi r^2 * \Delta r g(r) \rho = \Delta n_i(r), \quad (1.10.1)$$

где $\rho = N/V$ – численная плотность атомов (молекул), V – объем всей системы, N – число частиц, $g(r)$ – парная корреляционная функция, которая определяет вероятность расположения атомов на расстоянии от r до $r + \Delta r$ друг от друга, $\Delta n_i(r)$ – число частиц в сферическом слое Δr на расстоянии r от i -ой частицы.

Из выражения (1.10.1) находим $g(r)$:

$$g(r) \approx \frac{V}{4\pi r^2 N} \frac{\Delta n_i(r)}{\Delta r}, \quad i = 1 \dots N \quad (1.10.2)$$

После усреднения по времени и по частицам получим:

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N^2} \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{\Delta n_i(r)}{\Delta r} \right\rangle \quad (1.10.3)$$

Таким образом, радиальная функция распределения частиц является нормированной функцией.

На рисунке 22 представлен пример – вид радиальной функции распределения для газообразной, жидкой, твердой и аморфной фазы, из которого видно что, в случае твердого тела с кристаллической структурой на рисунке наблюдаются «острые» пики, расположенные на некотором расстоянии друг от друга и простирающиеся на большие расстояния, что указывает на наличие дальнего порядка в расположении атомов системы, в случае газа $g(r)$ стремится к единице, что соответствует однородному распределению и отсутствию ближнего и дальнего порядка. В жидкости

появляются несколько пиков, которые соответствуют ближнему порядку (расстояние до первого пика примерно равно размеру атома или молекулы). Для аморфной фазы, полученной путем быстрого охлаждения его жидкого расплава, наблюдается характерное удвоение второго пика.

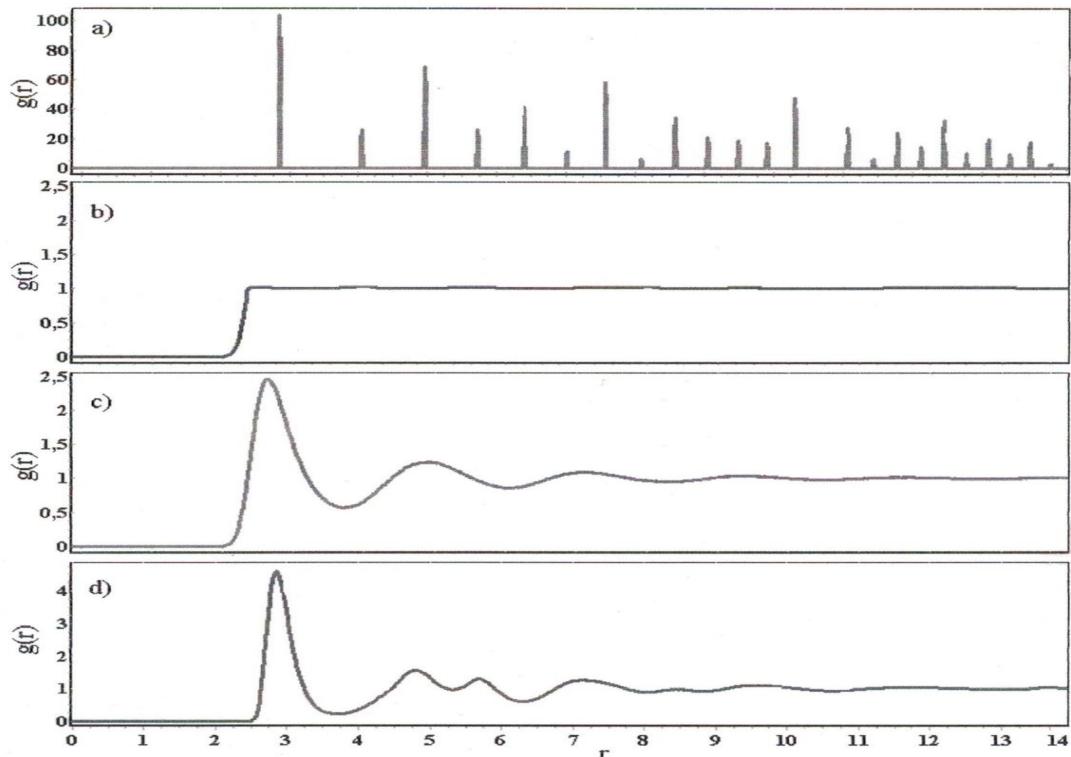


Рисунок 22. Радиальная функция распределения частиц для различных фаз: а) кристаллическая фаза, б) газообразная фаза, в) жидкость, д) аморфное тело [23]

Радиальная функция распределения частиц $g(r)$ имеет осциллирующий характер, где первый пик (максимум) отвечает первой координационной сфере, второй пик (максимум) отвечает второй координационной сфере, третий пик (максимум) – третий и т.д.

Несмотря на преимущества, функцию радиального распределения экспериментально измерить невозможно, поэтому чаще всего вычисляют статический структурный фактор $S(k)$, через который и получают парную функцию распределения $g(r)$.

Исследование структурных особенностей модельной системы было выполнено на основе расчета функции радиального распределения:

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N} \left\langle \sum_{j=1}^N \frac{\Delta n_j(r)}{\Delta r} \right\rangle \quad (1.10.4)$$

и статического структурного фактора, связь между параметрами записывается таким выражением:

$$S(k) = 1 + 4\pi n \int_0^\infty r^2 [g(r) - 1] \frac{\sin(kr)}{kr} dr \quad (1.10.5)$$

Здесь V – объем исследуемой системы, n – количественная плотность системы, величина $\Delta n_j(r)$ определяет число частиц в сферическом слое толщиной Δr на расстоянии r от j -ой частицы;

k -волновой вектор, r -радиус вектор, характеризующий взаимное расположение частиц в произвольной паре.

В простой равновесной жидкости функция $g(r)$ имеет затухающий, осциллирующий около единичного значения, $g(r) = 1$, характер.

При этом визуально различными являются первые три –четыре максимума, в нашей работе мы рассмотрим первые три максимума. Это особенно явно проявляется в жидкостях с высокими плотностями при температурах, близких к температуре плавления T_m . Положения максимумов в $g(r)$ соответствуют характерным корреляционным длином ближнего и среднего порядка, которые в случае кристаллических систем указывают на размеры координационных сфер (первой r_1 , второй r_2 , третьей r_3 и т.д.). Примечательно, что радиальное распределение $g(r)$ и соответствующий ему статистический структурный фактор имеют подобную форму.

В простых однокомпонентных жидкостях межчастичное взаимодействие описывается сферическим потенциалом $U(r)$, содержащим минимум $U(r_0)$, положение которого определяет корреляционную длину, соотносимую с эффективным размером (удвоенным радиусом) частиц, $r=r_0$.

Функция радиального распределения жидкости имеет ряд эмпирических особенностей:

- 1) Форма функции $g(r)$ достаточно хорошо воспроизводится линейной комбинацией гауссовых функций, количество которых соответствует количеству максимумов:

$$g(r) = \sum g_i(r), i = 1, 2, \dots \quad (1.10.6)$$

Где

$$g_i(r) = \frac{n_i}{\sqrt{2\pi\xi_i^2}} e^{-\left(\frac{(r-r_i)^2}{2\xi_i^2}\right)} \quad (1.10.7)$$

Здесь n_i - эффективное i -е координационное число, величина ξ_i^2 определяет ширину максимума , параметр r_i характеризует положение максимума и, тем самым размер i -й координационной сферы.

- 2) Если определить расстояние между соседними максимумами в $g(r)$ через

$(r_{i+1} - r_i)$, $i = 1, 2, 3, \dots$, и оценить среднее значение:

$$\overline{\Delta r} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 (r_{i+1} - r_i), i = 1, 2, 3, \dots \quad (1.10.8)$$

То величина $\frac{2\pi}{\Delta r}$ приближает значение волнового числа, характеризующее положение главного максимума в статистическом структурном факторе $S(k_m)$,

$$k_m \approx \frac{2\pi}{\Delta r} \quad (1.10.9)$$

3) В наборе $(r_1, (r_2 - r_1), (r_3 - r_2), \dots)$ значение величины r_1 , характеризующей размер первой координационной оболочки, является максимальным. При этом выполняется эмпирическое правило:

$$\frac{r_i}{r_2 - r_1} \geq 1 \quad (1.10.10)$$

- 4) Согласно другому эмпирическому правилу – правилу Хансона- Верле при затвердевании простой жидкости высота главного максимума высота главного максимума в статистическом структурном факторе превышает значение 2.85.
- 5) Отношение значений функций радиального распределения в первом минимуме т первом максимуме определяет параметр Вендта-Абрахама[24].

Глава2.Углубленное изучение раздела «Молекулярная физика»школьного курса

§2.1 Рекомендации по организации внеурочной работы по предмету «Физика» раздела «Молекулярная Физика»

Внеурочная деятельность является обязательной при реализации содержания учебного предмета «Физика». Особенностью внеурочной деятельности является то, что она направлена на достижение обучающимися личностных и метапредметных результатов.

Внеурочные занятия призваны способствовать повышению интереса к изучению физики, развитию познавательных и творческих способностей учащихся, формированию умений применять полученные знания на практике. Достижению этих целей в большей мере способствует процесс самостоятельного познания мира, а не процесс передачи готовых знаний. Поэтому на внеурочных занятиях, при организации самостоятельной работы учащихся над индивидуальными исследовательскими или конструкторскими проектами целесообразно чаще ставить школьника в положение не слушателя, а докладчика, первооткрывателя, изобретателя. При организации дискуссий с целью поиска возможного объяснения нового явления следует обратить внимание на тот факт, что творческий процесс связан с особым видом мышления — интуицией. Интуитивное решение проблемы любого вида находится догадкой, без последовательного логического обоснования.

На развитие творческих способностей влияет характер педагогического общения учителя и учащихся в процессе обучения. Специфике внеурочных занятий соответствуют дискуссии, беседы, открытые уроки во время которых каждый имеет возможность высказать собственную точку зрения.

На внеурочных занятиях, полезно дать возможность участникам этих занятий продемонстрировать свои достижения на уроках физики. Готовить

творческие проекты, при изучении соответствующей темы, выступать на школьных и межшкольных конкурсах среди школьников.

Для методического обеспечения реализации внеурочной деятельности в рамках Федерального государственного образовательного стандарта основного общего образования нами предлагается следующая организация – это факультативный курс.

§ 2.2 Факультативный курс по разделу «Молекулярная физика»

Тема: «Изучение некоторых вопросов из раздела молекулярной физики на примере трактовки экспериментальных данных нейтронной и рентгеновской дифракции»

Пояснительная записка

Данный факультативный курс для 10 класса рассматривает углубленное изучение раздела «Молекулярная физика» школьного курса. Программа рассчитана на 34 часа в год, количество часов в неделю: 1 час в неделю, но на освоение нашей программы(оригинальной методики) - потребуется 4-5 уроков. Продолжительность курса обучения: один год .

Предмет: Физика

Раздел: Молекулярная физика.

Курс рассчитан на 1 года обучения

Одной из целей физического образования является формирование умений самостоятельно работать, исследовать современными способами вещества, явления, физические процессы (например, жидкость) и умение пользоваться новыми программными пакетами.

Решение углубленных задач раздела - один из методов обучения физике. С помощью решения практических задач:

- создаются и решаются проблемные ситуации;
 - формируются практические и интеллектуальные умения;
 - затрагиваются знания другого предмета;
- формируются такие качества личности, как целеустремленность, настойчивость, аккуратность, внимательность.

Целью факультатива является:

1. Развитие интереса к физике, к решению новых физических задач с помощью программного комплекса;
2. Совершенствование полученных в основном курсе знаний и умений;
3. Изучение нового программного пакета;
4. Формирование представлений о новых экспериментах;
5. Развитие познавательных интересов, интеллектуальных и творческих способностей в процессе решения физических задач и самостоятельного приобретения новых знаний;
6. Применение знаний по физике для объяснения явлений природы, свойств вещества, решения физических задач, самостоятельного приобретения и оценки новой информации физического содержания.

Задачи курса:

1. Углубление и систематизация знаний учащихся;
2. Усвоение учащимися нового программного пакета Matlab 2011;
3. Усвоение нового алгоритма решения задач;
3. Овладение одним из методов решения исследования (метод заключен в 4 занятиях).

В конце изучения основной темы «Молекулярная физика» проводятся итоговое самостоятельное занятие, в котором ученики сами смогут почувствовать себя юными исследователями (алгоритм занятий проделан и составлен).

Средства обучения

Основными средствами обучения при изучении прикладного курса являются:

- экспериментальные данные.
- графические иллюстрации (графики, схемы, чертежи,).
- дидактические материалы (научная литература).
- учебники физики для старших классов средней школы.
- программный пакет.

Организация самостоятельной работы

Самостоятельная работа предполагает собой то, что ученики самостоятельно изучают химический элемент с помощью компьютеров, вычислительных устройств, предполагает использование современных (актуальных) экспериментальных данных и делают сами выводы на основе использования конкретных законов физических теорий, фундаментальных физических законов, а также методов экспериментальной, теоретической и вычислительной физики из различных учебников с ориентацией на профильное образование учащихся. Оригинальная методика для углубленного изучения школьного курса молекулярной физики полностью прописана.

Ожидаемыми результатами занятий являются:

- развитие познавательных интересов, интеллектуальных и творческих способностей на основе опыта самостоятельного приобретения новых знаний, анализа и оценки новой информации;
- сознательное самоопределение ученика относительно профиля дальнейшего обучения или профессиональной деятельности;

- получение представлений о роли молекулярной физики в познании физических и математических методах исследования.

Требования к уровню освоения содержания курса.

В результате освоения курса учащиеся должны уметь:

1. Анализировать вещество, физическое явление, процесс;
2. Пользоваться программным пакетом;
3. Пользоваться алгоритмом методики;
4. Анализировать полученный ответ;
5. Классифицировать предложенную задачу;
6. Составлять самостоятельно алгоритм простейших задач;
7. Последовательно выполнять и проговаривать этапы решения задачи;
8. Владеть различными методами решения задач: аналитическим, графическим, экспериментальным и т.д.;
9. Владеть методами самоконтроля и самооценки.

Для выполнения задач данной работы нам необходимо написать адаптированную программу для учеников 10 класса, которая будет включать в себя углубленное изучение раздела молекулярной физики на примере трактовки современных и экспериментальных данных нейтронной и рентгеновской дифракции[25].

Итогом изучения факультативного курса физики является:

-решение задач по заданной методики в программном комплексе;

-владение одним из приемов исследования эксперимента;

-получение новых знаний о молекулярном строении вещества и взаимодействии молекул между собой;

-умения формулировать первичные (но обоснованные) выводы о микроскопической структуре простых жидкостей;

-навыки использования современных компьютерных (вычислительных) средств для решения частных задач молекулярной физики.

Итак, далее пойдем по описанию наших занятий. Как уже говорилось выше их всего четыре.

§2.3 Занятие №1

Тема: «Актуализация знаний учащихся по разделу «Молекулярная физика (жидкость и структура)»

Перейдем к описанию первого урока. В нем мы рассмотрим необходимую для нас теоретическую часть Молекулярной физики. Также в этом занятии предполагается актуализация знаний школьников по разделу «Молекулярная физика».

Цели урока:

Общеобразовательная:

- Знать понятие молекулярная физика; основные положениях МКТ;
- Создать условия для усвоения нового учебного материала, используя проблемное обучение;
- Иметь представление о том, что такое жидкость, типы жидкостей, фазовые переходы;
- Понимать, что такое агрегатные состояния вещества.

Развивающая:

- Формировать понятие о молекуле, как величине, состоящей из атомов;
- Развивать творческую и мыслительную деятельность учащихся на уроке с помощью применения задач исследовательского характера;

- Развивать интеллектуальные качества личности школьника такие, как самостоятельность, способность к оценочным действиям, сбор информации, обобщению, быстрому переключению;
- Развивать способность способствовать формированию навыков самостоятельной работы;
- Формировать целостное восприятие окружающего мира.

Воспитательная:

- формировать креативное мышление при описании окружающей действительности различными субъектами измеряемой среды.
- прививать учащимся интерес к предмету с помощью применения информационных технологий (презентации, иллюстраций);
- формировать умения аккуратно и грамотно выполнять поставленные задачи.

Тип урока: Изучение нового материала.

Оборудование:

- опорные конспекты,
- мультимедийный проектор,
- экран.

План урока

Этапы урока	Вре мя, Мин	Приемы и методы
1.Повторение ранее изученного материала	10	Беседа. Опрос по опорным конспектам.
2. Изучение нового материала: раздел молекулярной физики; основные положения МКТ; агрегатные состояния вещества;	15	Рассказ учителя. Беседа. Опорные конспекты. Показ пошаговой анимации.
3. Формирование умений и навыков.	5	Ответы на вопросы учащихся.
4. Первичная проверка усвоения знаний.	8	Опрос по опорным конспектам.
5.Повторение материала.	5	Программа «Основы молекулярной физики»
5. Подведение итогов.	1	Сообщение учителя.
6.Домашнее задание.	1	Запись на доске.

Простые жидкости - это жидкости, построенные из атомов со сферически симметричным потенциалом взаимодействия.

Простыми жидкостями также называют жидкие простые вещества. Иногда простыми жидкостями именуют неассоциированные жидкости, где нет химически связанных друг с другом атомов, образующих молекулы различной формы и размера.

Опыты научных деятелей, показывают, что таких жидкостей в природе не существует. Это абстрактная теоретическая модель, лишенная важной черты жидкого состояния вещества - взаимодействия между молекулами (или атомами), сопровождающегося обобществлением электронов.

Примером простой жидкости может послужить надутый шар или мячик (расстояние где следующей молекулы везде одинаковое), а если его сдуть, то его структура меняется, появляются неоднородности, «дыры», следовательно, это уже не простая, а сложная жидкость. В этом случае расстояние r уже различается так как поверхность неровная (r - некое удобное(комфортное) расстояние для взаимодействия с другой молекулой).

Физические свойства жидкостей

Текучесть

Основное свойство жидкости - это текучесть. Если к участку жидкости, находящейся в равновесии, приложить внешнюю силу, то возникает поток частиц жидкости в том направлении, в котором эта сила приложена: жидкость течёт. Жидкость не имеет предела текучести: достаточно приложить сколь угодно малую внешнюю силу, чтобы жидкость потекла. Таким образом, под действием неуравновешенных внешних сил

жидкость не сохраняет форму и относительное расположение частей, и поэтому принимает форму сосуда, в котором находится.

Сохранение объёма

Одним из характерных свойств жидкости является то, что она имеет определённый объём. Жидкость трудно сжать механически, поскольку, в отличие от газа, между молекулами очень мало свободного пространства. Давление, производимое на жидкость, заключенную в сосуд, передаётся без изменения в каждую точку объёма этой жидкости (закон Паскаля, справедлив также и для газов).

Жидкости обычно расширяются (увеличивают объём) при нагревании и уменьшают объём (сжимаются) при охлаждении. Как и везде, встречаются и исключения, например, вода сжимается при нагревании, при нормальном давлении и температуре от 0 °C до приблизительно 4 °C.

Вязкость

Кроме того, жидкости (как и газы) характеризуются вязкостью. Она определяется как способность оказывать сопротивление перемещению одной из частей относительно другой — то есть как внутреннее трение.

Когда соседние слои жидкости движутся относительно друг друга, неизбежно происходит столкновение молекул дополнительно к тому, которое обусловлено тепловым движением. Возникают силы, затормаживающие упорядоченное движение. При этом кинетическая энергия упорядоченного движения переходит в тепловую — энергию хаотического движения молекул.

Жидкость в сосуде, предоставленная самой себе и приведенная в движение, постепенно остановится, но температура ее повысится.

Образование свободной поверхности и поверхностное натяжение Сферическая форма капли жидкости как пример минимизации площади поверхности, что обусловлено поверхностным натяжением в жидкостях.

Из-за сохранения объёма жидкость способна образовывать свободную поверхность. Такая поверхность является поверхностью раздела фаз данного вещества: с одной стороны, находится жидккая фаза, с другой — газообразная (пар), и, возможно, другие газы (например, воздух).



Рисунок 23 .Образование свободной поверхности и поверхностное натяжение[26]

Если газообразная фаза и жидкая фаза одного и того же вещества соприкасаются, возникают силы поверхностного натяжения, они постоянно стремятся уменьшить площадь поверхности раздела. Поверхность раздела постоянно стремится стянуться.

Один из вариантов объяснения поверхностного - объясняют притяжением между молекулами жидкости. Каждая молекула притягивает другие молекулы, стремится «окружить» себя ими, а значит, уйти с поверхности. Из этого следует, что поверхность стремится уменьшиться.

Поэтому мыльные пузыри и пузыри при кипении стремятся принять сферическую форму: при данном объёме минимальной поверхностью обладает шар.

Небольшие объекты с плотностью, большей плотности жидкости, способны «плавать» на поверхности жидкости, так как сила тяготения меньше силы, препятствующей увеличению площади поверхности

Жидкость обязательно примет сферическую форму, если на нее действуют только силы поверхностного натяжения—пример, капли воды в невесомости.

Испарение и конденсация

Испарение — переход вещества(постепенный) из жидкости в газообразную фазу (пар).



Рисунок 24. Испарение [27]

Водяной пар, содержащийся в воздухе, конденсируется в жидкость после того как произойдет соприкосновение с холодной поверхностью бутылки.

При тепловом движении некоторые молекулы покидают жидкость через её поверхность и переходят в пар. Вместе с тем, часть молекул переходит обратно из пара в жидкость. Если из жидкости уходит больше молекул, чем приходит, то имеет место испарение.

Конденсация — обратный процесс, переход вещества из газообразного состояния в жидкое. При этом в жидкость переходит из пара больше молекул, чем в пар из жидкости.

Стоит отметить, что Испарение и конденсация — неравновесные процессы, они происходят до тех пор, пока не установится локальное равновесие (если установится), причём жидкость может полностью испариться, или же прийти в равновесие со своим паром, когда из жидкости выходит столько же молекул, сколько возвращается [28].

- **Перегрев и переохлаждение**

Жидкость можно нагреть выше точки кипения таким образом, что кипения не происходит. Для перегрева необходим равномерный нагрев, без значительных перепадов температуры в пределах объёма и без вибрации. Если в перегретую жидкость бросить что-либо, она мгновенно вскипает.

Переохлаждение — охлаждение жидкости ниже точки замерзания без превращения в твёрдое агрегатное состояние. Для переохлаждения необходимо отсутствие вибрации и значительных перепадов температуры.

- **Кипение**

Кипение — процесс парообразования внутри жидкости. При достаточно высокой температуре давление пара становится выше давления внутри жидкости, и там начинают образовываться пузырьки пара, которые (в условиях земного притяжения) всплывают наверх [28].

- **Смешиваемость**

Смешиваемость — способность жидкостей растворяться друг в друге. Есть смешиваемые жидкости и несмешиваемые. Пример вода и этиловый спирт (смешиваемых жидкости), пример несмешиваемых: вода и жидкое масло.

- **Диффузия**

Об этом явлении выше уже упоминалось. При нахождении в сосуде двух смешиваемых жидкостей молекулы в результате теплового движения начинают постепенно проходить через поверхность раздела, и таким образом жидкости начинают постепенно смешиваться. Это явление называется диффузией (в веществах, находящихся в других агрегатных состояниях также происходит).

А теперь плавно перейдем к следующему этапу, описанию второго занятия.

§ 2.4 Занятие №2

Тема занятия: «Трактовка современных экспериментальных данных по структуре жидкостей некоторыми современными научными подходами»

Цели и задачи урока:

- Развить практические умения и навыки при работе с вычислительными средствами, программным пакетом;
- Развить навыки аналитической, самостоятельной и экспериментальной работы;
- Развить интерес к учебе и чтению научно-популярной литературы.

Задачи урока:

Образовательные:

- Создать условия для усвоения нового учебного материала, используя проблемное обучение;
- Трактовка экспериментальных данных нейтронной и рентгеновской дифракции;
- Понять смысл программного продукта, позволяющего интерпритировать экспериментальные данные (по дифракции нейтронов и рентгеновских лучей);
- Знать физический смысл функции распределения $g(r)$ (для газов, жидкостей и кристаллов);
- Обобщить и систематизировать знания учащихся по теме “Молекулярная физика”, постепенно подготовить их к исследовательской работе;

Развивающие:

- Развивать творческую и мыслительную деятельность учащихся на уроке с помощью методики исследовательского характера;
- Развивать интеллектуальные качества личности школьника такие, как самостоятельность, способность к оценочным действиям, умение делать правильные выводы, обобщению, развитие кругозора;
- Способствовать формированию навыков самостоятельной работы;
- Формировать умения чётко и ясно излагать свои мысли;
- Развить интерес к углубленным знаниям и чтению научно – популярной литературы;

Воспитательные:

- Прививать культуру умственного труда;
- Прививать учащимся интерес к предмету с помощью применения информационных технологий (с использованием компьютера, программных пакетов);

- Показывать детям новые алгоритмы;
- Формировать умения аккуратно и грамотно излагать свои мысли, на основе проделанной работы.
-

Тип урока: изучение нового материала, исследование, (первая тема: исследования жидкости)

Основные формы и методы работы учащихся на уроке:

1. Индивидуальный опрос, опрос в форме беседы
2. Решение экспериментальных задач.

Оборудование урока:

- Учебник по физике для 10 класса, опорные конспекты.
- Классная доска, заранее оформленная к уроку.
- Компьютеры.
- Программный комплекс Матлаб, включающий программные файлы.
- Тестовые задания для контроля знаний учащихся.

Ход урока

1. Организационный момент. Объяснение учащимся целей и задач урока.

2. Проверка предыдущего домашнего задания, небольшой опрос учащихся.

3. Мотивация учебной деятельности. Актуализация опорных знаний учащихся (вступительное слово учителя).

Как и говорилось ранее, что молекулярная **физика** – это раздел физики, в котором изучаются физические свойства тел в различных агрегатных состояниях на основе рассмотрения их молекулярного строения. Как вы знаете, что физика – это наука экспериментальная, и, если выдвинута какая-

либо теория или сформулирован закон, то их надо подтвердить с помощью эксперимента.

Экспериментальное исследование жидкости было проведено методами рентгеновского структурного анализа (а впоследствии методами электронографии и нейtronографии), были изучены структура твёрдых тел и жидкостей и её изменения при фазовых переходах и изменении температуры, давления и других характеристик. Учение о межатомных взаимодействиях на основе представлений квантовой механики получило развитие в работах Макса Борна, Фрица Лондона и Вальера Гайтлера, а также Петера Дебая. Теория переходов из одного агрегатного состояния в другое, намеченная Ван-дер-Ваальсом и Уильямом Томсоном и развитая в работах Гиббса (конец XIX века), Льва Давидовича Ландау и Макса Фольмера(1930-е) и их последователей, превратилась в современную теорию образования фазы — важный самостоятельный раздел физики [29].

Объединение статистических методов с современными представлениями о структуре вещества в работах Якова Ильича Френкеля, Генри Эйринга (1935—1936), Джона Десмонда Бернала и других привело к молекулярной физике жидких и твёрдых тел.

Рентгеноструктурный анализ(рентгенодифракционный анализ) — один из дифракционных методов исследования структуры вещества. В основе данного метода лежит явление дифракции рентгеновских лучей на трёхмерной кристаллической решётке.

Явление дифракции рентгеновских лучей на кристаллах открыл Лауэ, теоретическое обоснование явлению дали Вульф и Брэгг. Как метод, рентгеноструктурный анализ разработан Дебаем и Шеррером[30]. Метод позволяет определять атомную структуру вещества, включающую в себя пространственную группу элементарной ячейки, её размеры и форму, а также определить группу симметрии кристалла, и по сей день является

самым распространённым методом определения структуры вещества в силу его простоты и относительной дешевизны.

Рентгеновское излучение - это такие электромагнитные волны, энергия фотонов которых лежит на шкале электромагнитных волн между ультрафиолетовым излучением и гамма-излучением, что соответствует длинам волн от 10^{-2} до 10^2 Å (от 10^{-12} до 10^{-8} м)^[1][30].

Теперь поговорим о понятии функция радиального распределения, мы его упоминали выше.

§ 2.4.1 Функция радиального распределения

Форму радиальной функции распределения частиц $g(r)$ можно воспроизвести линейной комбинацией гауссовых систем [31], где количеству максимумов соответствует количество гауссовых систем [32].

Здесь

$$g(r) = \sum_i g_i(r), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (2.4.1.1)$$

$$g_i(r) = \frac{n_i}{\sqrt{2\pi\xi_i^2}} \exp\left(-\frac{(r - r_i)^2}{2\xi_i^2}\right). \quad (2.4.1.2)$$

Где n_i i -ое координационное число, величина ξ_i^2 определяет ширину максимума, параметр r_i описывает положение максимума, а также, размер i -ой координационной сферы [31].

Можно определить расстояние между соседними максимумами в радиальной функции распределения частиц $g(r)$ через $(r_{i+1} - r_i)$, где $i = 1, 2, 3$, а также оценить среднее значение:

$$\overline{\Delta r} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 (r_{i+1} - r_i), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (2.4.1.3)$$

Объектом исследования является методика применения компьютерных моделей при обучении физике в школе.

Следует отметить, что целесообразность применения компьютерных моделей возрастает при изучении явлений, недоступных непосредственному наблюдению. К таким относятся явления, изучаемые в разделе "Молекулярная физика".

И перед нами встает проблема: с помощью эксперимента подтвердить законы, которыми описываются поведение жидкостей в тех или иных условиях.

Следуя работе, [31] так называемая, расшифровка функции радиального распределения $g(r)$ выполняется путем подгонки (2.4.1.1), (2.4.1.2) либо к экспериментальным данным, либо к результатам моделирования молекулярной динамики для функции радиального распределения $g(r)$. В случае простой однокомпонентной жидкости, каждомуциальному отдельному пику функция распределения должна соответствовать отдельными гауссами вида (2.4.1.2). В случае жидкостей с более плотными структурными особенностями, по сравнению с однокомпонентными жидкостями, отдельный максимум функции радиального распределения может характеризоваться наборами нескольких гауссовых функций.

Таким образом, приведенный метод позволяет извлечь полезную информацию из функции радиального распределения о жидкости.

Описание современного научного метода:

Как и говорилось выше, вживую на эту картину посмотреть невозможно, поэтому мы с помощью программы отслеживаем как ведет себя тот или иной элемент.

Все вещества – жидкые, твердые и газообразные – образованы из мельчайших частиц – молекул, которые сами состоят из атомов («элементарных молекул»). Молекулы химического вещества могут быть простыми и сложными, т.е. состоять из одного или нескольких атомов. Молекулы и атомы представляют собой электрически нейтральные частицы. При определенных условиях молекулы и атомы могут приобретать дополнительный электрический заряд и превращаться в положительные или отрицательные ионы.

Как мы говорили выше, рассмотрим простую жидкость, так как это очень удобно. Только жидкость может принимать две формы: кристаллическую и газообразную. И строим для них гауссовую функцию. Рассматриваем по 2-3 примера химических элементов при разных температурах. Подбираем форму $g(r)$ до третьего пика включительно. Этим способом можно упростить задачу учащимся. Создать программный пакет, в котором ученики сами будут исследовать химические элементы.



Рисунок 25. Химические элементы[33]

Пишем для них алгоритм и ставим ученикам задачу! Получаем результаты и на основе результатов делаем выводы. Соответственно делаем новые открытия для учеников. Составляем программу в программном пакете Матлаб 2011 г. и по написанной программе помогаем отслеживать ученикам состояние того или иного металлического расплава.

План(алгоритм) построения:

1. Рассматриваем химические элементы первой, второй и третьей подгруппы периодической системы Менделеева .

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА																													
Периоды	Ряды	ГРУППЫ ЭЛЕМЕНТОВ								Элементы																			
I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII																						
1	1	H 1 ВОДРОД 1.008								He 2 ГЕЛИЙ 4.003																			
2	2	Li 3 ЛИТИЙ 6.941	Be 4 БЕРИЛИЙ 9.0122	B 5 ВОР 10.811	C 6 УГЛЕРОД 12.011	N 7 АЗОТ 14.007	O 8 КИСЛОРОД 15.999	F 9 ФТОР 18.998		Ne 10 НЕОН 20.179																			
3	3	Na 11 НАТРИЙ 22.99	Mg 12 МАГНИЙ 24.305	Al 13 АЛЮМИНИЙ 26.98154	Si 14 КРЕМНИЙ 28.086	P 15 ФОСФОР 30.974	S 16 СЕРА 32.064	Cl 17 ХЛОР 35.453		Ar 18 АРГОН 39.948																			
4	4	K 19 КАЛИЙ 39.102	Ca 20 КАЛЬЦИЙ 40.08	Sc 21 СКАНДИЙ 44.956	Ti 22 ТИТАН 47.956	V 23 ВАНДАНИЙ 50.941	Cr 24 ХРОМ 51.995	Mn 25 МАРГАНЕЦ 54.938	Fe 26 ЖЕЛЕЗО 55.849	Co 27 КОБАЛЬТ 58.933	Ni 28 НИКЕЛЬ 58.7																		
5	5	Rb 37 РУБИДИЙ 85.468	Sr 38 СТРОНИЙ 87.62	Y 39 ИТРИЙ 88.908	Zr 40 ЦИРКОНИЙ 91.22	Nb 41 НИОБИЙ 92.908	Mo 42 МОЛИБДЕН 95.94	Tc 43 ТЕХНЕЦИЙ 99.991	Ru 44 РУТЕНИЙ 101.07	Rh 45 РОДИЙ 102.906	Pd 46 ПАЛАДИЙ 108.4																		
7	7	Ag 47 СЕРЕБРО 107.868	Cd 48 КАДМИЙ 112.41	In 49 ИНДИЙ 113.82	Sn 50 ГОЛОВО 118.69	Sb 51 СУРЬМА 121.75	Te 52 ТЕЛУР 127.8	I 53 ИОД 126.905		Xe 54 КСЕНОН 131.3																			
8	8	Cs 55 ЦЕЗИЙ 132.905	Ba 56 БАРИЙ 138.906	La 57-71 ЛАНТАНОИДЫ 138.906	Hf 72 ГАФНИЙ 178.49	Ta 73 ТАНТАЛ 182.948	W 74 ВОЛЬФРАМ 183.85	Re 75 РЕНИЙ 186.207	Os 76 ОСМИЙ 190.2	Ir 77 ИРИДИЙ 192.22	Pt 78 ПЛАТИНА 195.09																		
9	9	Tl 79 ЗОЛОТО 200.59	Hg 80- РУТИЛ 200.59	Tl 81 ТАЛЛИЙ 204.57	Pb 82 СВИНЦ 207.19	Bi 83 ВИСКОУС 208.98	Po 84 ПОЛОНИЙ 210.0	At 85 АСАМБИ 210.0			Rn 86 РАДОН 222																		
7	10	Fr 87 ФРАНЦИЙ [223]	Ra 88 РАДИЙ [226]	89-103 АКТИНОИДЫ [261]																									
высшие оксиды		R ₂ O	RO	R ₂ O ₃	RO ₂	R ₂ O ₅	RO ₃	R ₂ O ₇	RO ₄																				
легучие водородные соединения					RH ₄	RH ₃	H ₂ R	HR																					
ЛАНТАНОИДЫ																													
57	La	58	Сe	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	No	68	Eg	69	Tm	70	Yb	71	Lu
ЛАНТАН		ЦЕРИЙ		ПРАЗЕДИНИЙ		НЕОДИМ		ПРОМЕТИУМ		САМАРИЙ		ЕВРОПИЙ		ГАДОЛИНИЙ		ТЕРБИУМ		ДИСПРОЗИУМ		ГОЛЬМИЙ		ЭРДИЙ		ТУЛИЙ		ИТТЕРБИЙ		ЛЮТЕЦИЙ	
138.906		140.12		140.908		144.24		145.9		150.4		151.96		157.25		158.526		162.5		164.93		167.28		168.934		173.04		174.94	
АКТИНОИДЫ																						ISBN 978-5-273-16643-3							
89	Ac	90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Ru	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No	103	Lr
АКТИНИЙ		ТОРИЙ		ПРОТактиний		УРАН		ПЕЛТУНИЙ		ПЛУТОНИЙ		АМЕРИКИЙ		КЮРИЙ		БЕРКОЛИЙ		КАЛФОРНИЙ		ЭЛЭПТИЙ		ФЕРМИЙ		МЕНДЕЛЕЕВИЙ		НОБЕЛИЙ		ПОУРЕНСКИЙ	
232.036		232.036		[231]		238.29		[237]		[240]		[243]		[247]		[247]		[254]		[254]		[257]		[258]		[259]		[260]	

Д.И. Менделеев
1834-1907
СИМВОЛ ЭЛЕМЕНТА
ПОРЯДКОВЫЙ НОМЕР
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПО СЛОЯМ
S-элементы
p-элементы
d-элементы
f-элементы

Рисунок 26 . Периодическая система химических элементов

Д.И.Менделеева [34]

2. Описывать свой современный метод будем в программном комплексе Матлаб 2011.
3. Краткое описание программного блока. Наш программный пакет, включает в себя пять файлов: finish, MyGO, MyClear, OpenFileDialog, MyGOTest_1 без этих пяти файлов программа не работает.
 - finish – основной файл, который рисует всю форму программы, где рисуются графики, кнопочки, сама программа;
 - MyGO –файл, который хранит все сделанные нами наработки
 - MyClear –запускается файл, который очищает поле вывода графика, стирает графики;
 - OpenFileDialog –открывает диалоговое окно, для выбора конкретного необходимого файла;
 - MyGOTest_1-файл который позволяет из списка загружать конкретный файл.
 - Запускать программу необходимо нажатием на файл finish, так как он является связующими между всеми файлами.

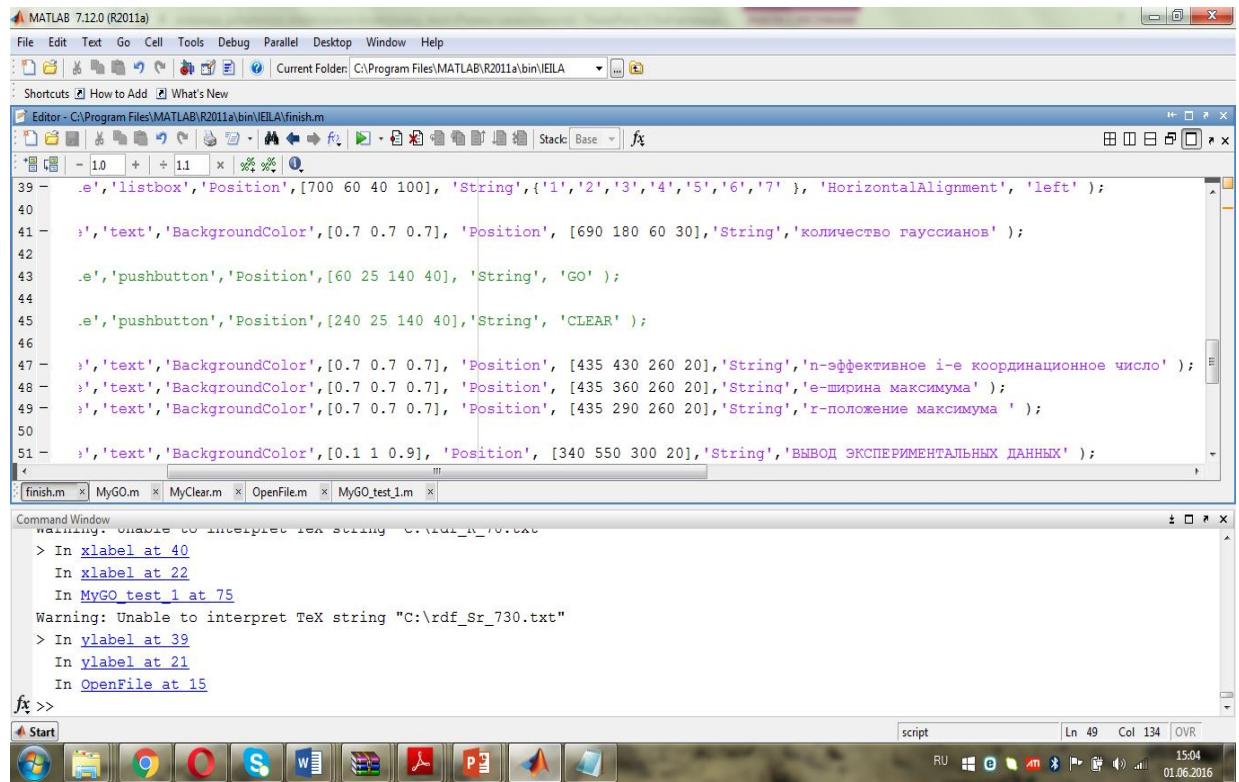


Рисунок 27 .Снимок рабочего стола с запущенным готовым программным продуктом

5. Мы загружаем готовые экспериментальные данные, $g(r)$ и r , в написанную программу. Готовые данные выглядят примерно таким образом:

Na_200_gr	
FileNames: Na_200_gr.txt	
comment: temp.(C) 200 units of number density(atoms/A3) 0.0237	
original file: B:\GR\NA200.GR	
r (A)	$g(r)$
2.50	0.047
2.60	0.026
2.70	0.017
2.80	0.044
2.90	0.138
3.00	0.329
3.10	0.626
3.20	1.008
3.30	1.419
3.40	1.788
3.50	2.052
3.60	2.180
3.70	2.177
3.80	2.079
3.90	1.927
4.00	1.753
4.10	1.575
4.20	1.397
4.30	1.223
4.40	1.061
4.50	0.923
4.60	0.817
4.70	0.745
4.80	0.700
4.90	0.670
5.00	0.650
5.10	0.637
5.20	0.635
5.30	0.644
5.40	0.665
5.50	0.693
5.60	0.725
5.70	0.762
5.80	0.805
5.90	0.853
6.00	0.907
6.10	0.963
6.20	1.016
6.30	1.065
6.40	1.109
6.50	1.148
6.60	1.182

Рисунок 28. Снимок текстового файла с данными (Натрий, $T=200K$)

6. В результате Программный продукт строит нам график- зависимость распределения $g(r)$ от r .

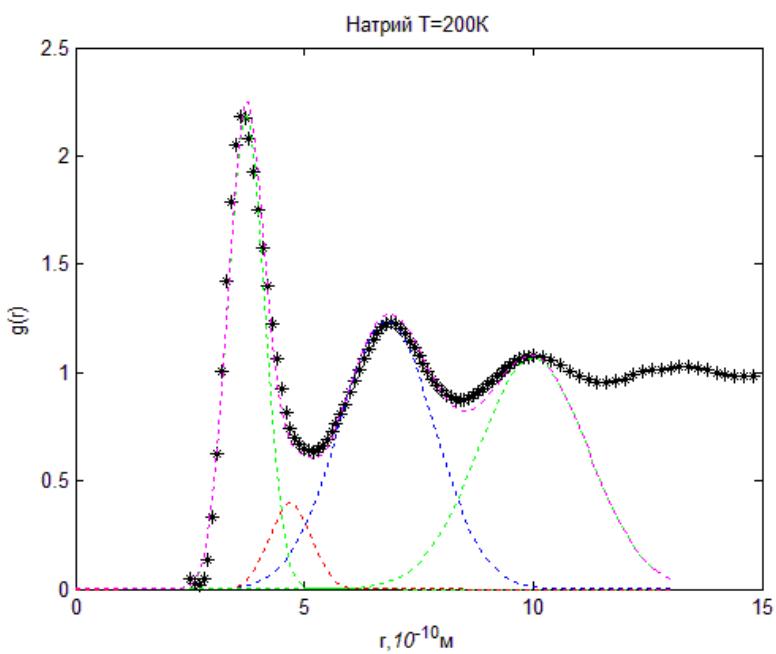


Рисунок29. Снимок готового графика

7. Подбираем форму $g(r)$ до 3-го пика включительно, далее значения пиков затухают, стремятся к единичке.
8. У нас имеется выпадающий список , где мы можем выбрать любой химический элемент и параметры n, ksi, r подгоняя эти параметры наблюдаем, что у нас происходит с функцией распределения и температурой.

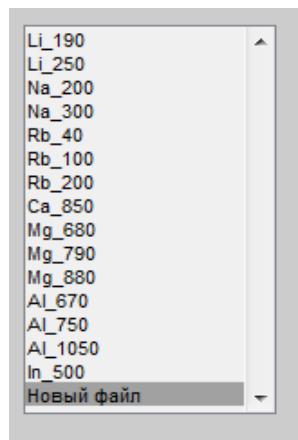
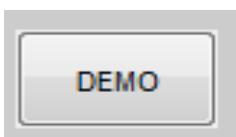


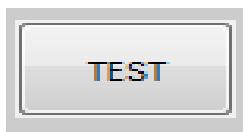
Рисунок 30. Снимок выпадающего списка элементов

- Так же можно выбрать новый файл, то есть любой текстовый файл, в котором хранятся вычисленные экспериментальные данные и при помощи изменения трех параметров выполнить самому подгонку выражений для получения правильной функции радиального распределения атомов в химическом элементе.

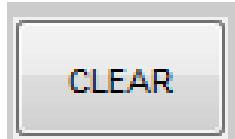
9. Имеется кнопочный интерфейс:



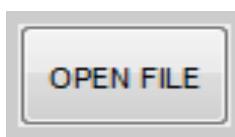
При помощи этой кнопки мы запускаем правильную программу, (с готовыми параметрами) вычисляя данные, строит график;



Эта кнопка дает ученику поэкспериментировать, выбирая различные значения параметров ;



С помощью этой кнопки, мы очищаем полностью поле графика;



Открывает диалоговое окно, для выбора необходимого нам файла (которая подходит для любого готового текстового файла).

Например, перейдем к выбору конкретного готового элемента (Li, T=190 K). В выпадающем списке выбираем элемент, нажимаем на DEMOи программа строит правильный график, но если мы нажмем на TEST, то нам самим придется подгонять параметры для построения программы . На рисунке показано, что в результате получается.

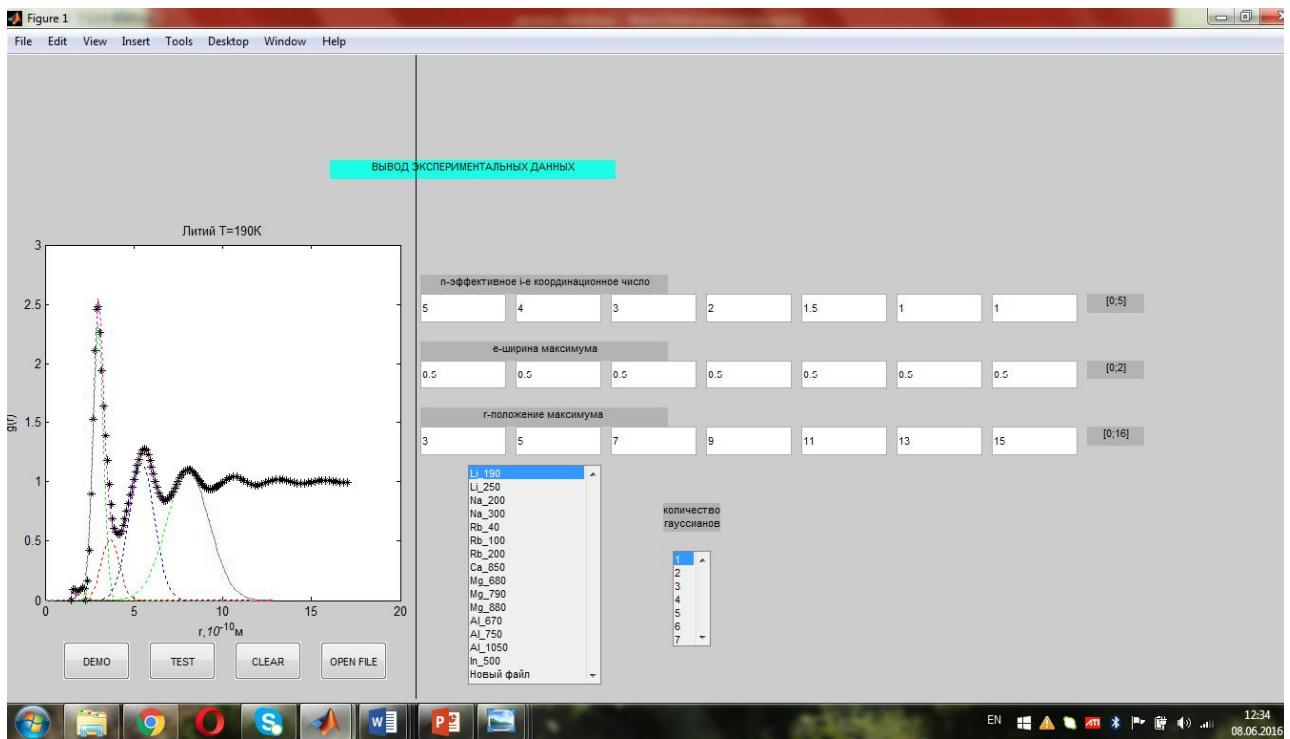


Рисунок 31. Снимок правильной запущенной программы одного из элементов

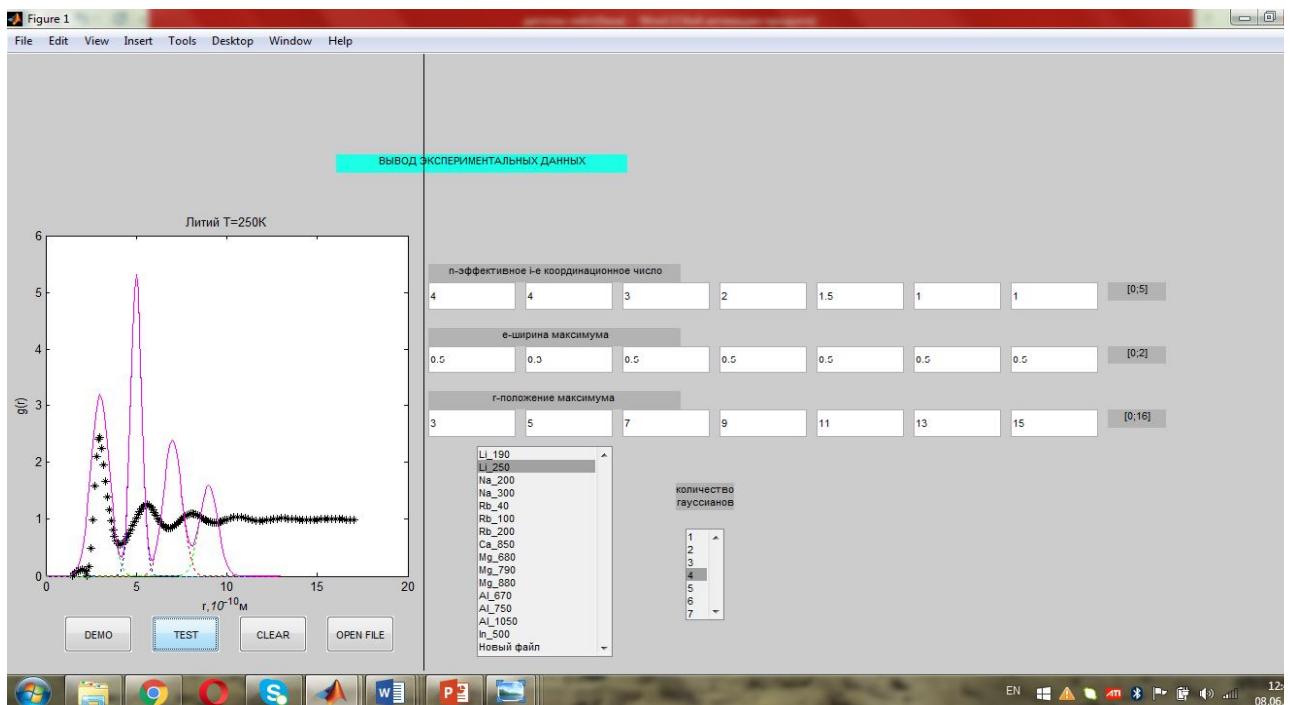


Рисунок 32. Снимок запущенной программы с неправильными параметрами

Количество Гауссианов выбирать можно самостоятельно от двух до семи.

Таким образом мы показали примерное объяснение алгоритма действия программного пакета.

4. Фронтальный опрос учащихся (проводится в форме беседы).

Давайте вспомним основные понятия, которые вы изучили.

1. Что такое простая жидкость?
2. Какие параметры входят в функцию радиального распределения?

Жидкость по своему строению и свойствам занимает промежуточное положение между твердыми телами и газами. Поверхность жидкости обладает одним замечательным свойством, благодаря которому, водомерки, например, могут перемещаться по поверхности воды.

3. Почему жидкость удерживает некоторые предметы на своей поверхности?
4. Описать современный экспериментальный метод.

Вы знаете, что существует две группы тел: кристаллические и аморфные.

5. Чем они отличаются друг от друга?
6. Как работает программа?
7. Что такое функция радиального распределения
8. Что означают все 5 кнопок?

6. Экспериментальные задачи.

Мы повторили все, что вам необходимо для выполнения следующих заданий.

1. Самостоятельно на основе предложенного исследования выполнить эксперимент для любой жидкости
2. Обобщение и систематизация знаний учащихся (проводится путем тестирования учащихся).

3. Подведение итогов решения экспериментальных заданий.

4. Подведение итогов урока. Выставление оценок учащимся.

6. Объяснение нового домашнего задания.

Таким образом, первые два урока позволяют школьникам не только частично адаптироваться к новому виду деятельности, но и актуализировать необходимые знания. Поэкспериментировать дома со всеми файлами.

§ 2.5 Занятие №3

Тема: «Применение к различным жидкостям (простым) и состояниям с различной температурой»

Теперь наглядно рассмотрим все примеры, которые мы выполнили по алгоритмы, построенному во втором уроке.

Перейдем на рассмотрение наших жидкостей. В первую очередь я бы хотела рассмотреть натрий.

Натрий – (Natrium) Na, химический элемент 1-й (Ia) группы Периодической системы, относится к щелочным элементам, атомный номер 11, относительная атомная масса 22,98977. Натрий применяют в медицине для диагностики и для лечения некоторых форм лейкемии, Степень окисления +1 [35].

На рисунке изображена функция радиального распределения атомов в жидком натрии при температуре $T=200\text{K}$, символами представлены данные, извлеченные из экспериментов по дифракции рентгеновских лучей; жирная линия-результат подгонки выражений (4) и (5); пунктиром показаны отдельные вклады, определяемые выражением (5), $r_1=2,25\text{ \AA}$ соответствует фактическому положению острия первого максимума.

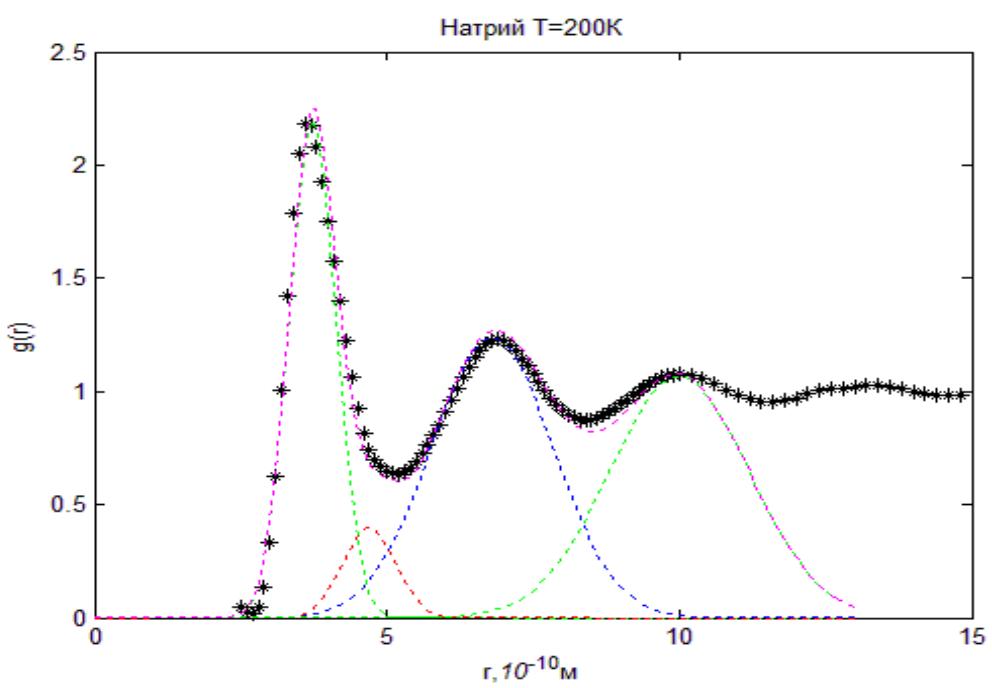


Рисунок33. Функция радиального распределения Натрия, $T=200\text{ K}$

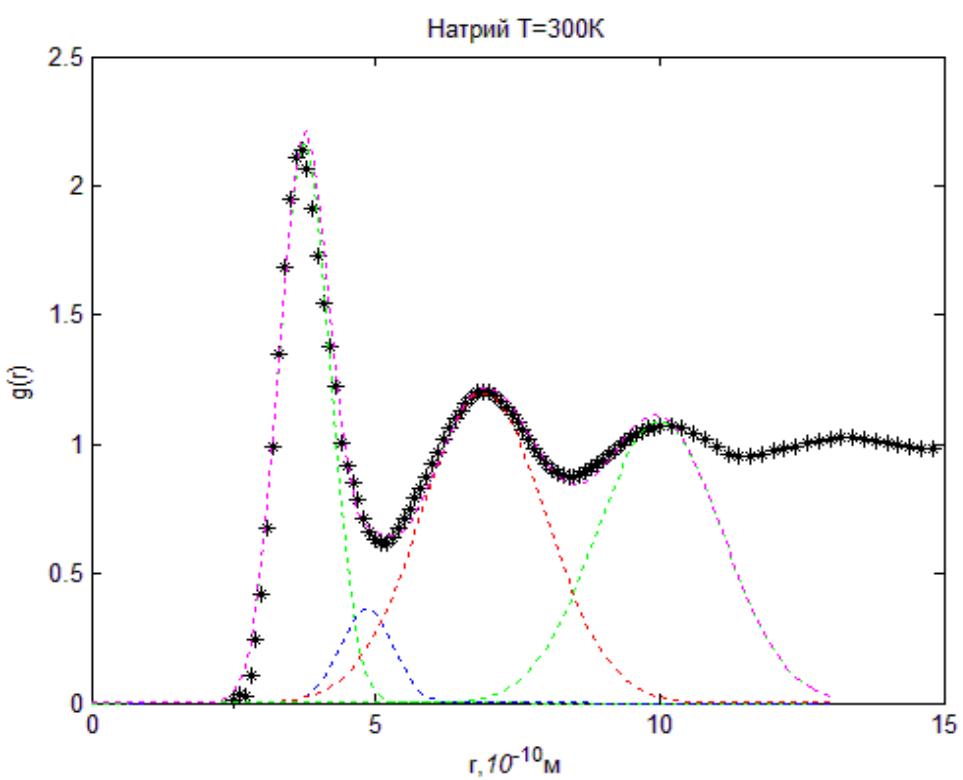


Рисунок 34. Функция радиального распределения Натрия, $T=300\text{ K}$

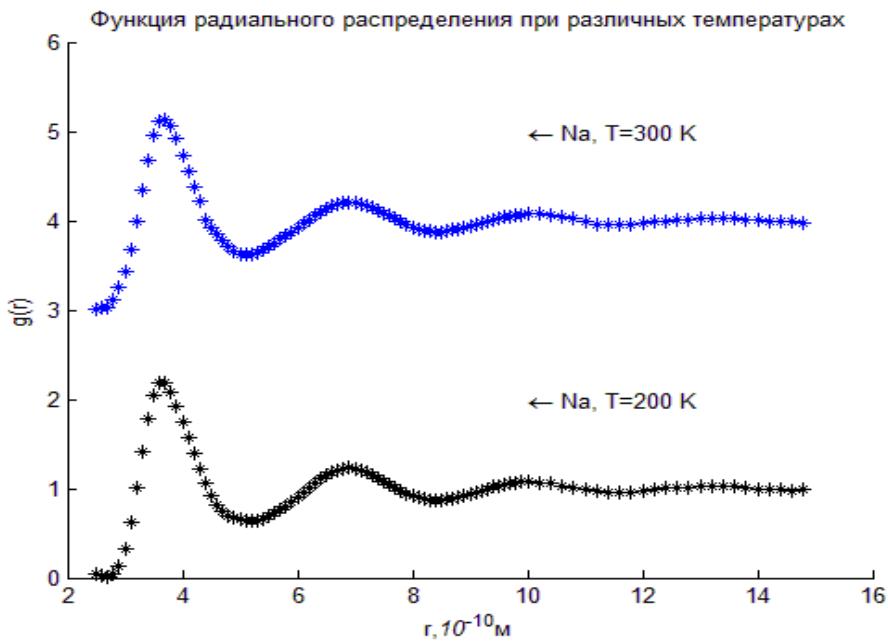


Рисунок 35. Функция радиального распределения Натрия при $T=200 \text{ K}$ и $T=300 \text{ K}$

Как видно из рисунка 35, в случае Натрия с двумя различными температурами с уменьшением температуры системы функции $g(r)$ претерпевают небольшие изменения. Так, главный максимум при уменьшении температуры становится более выраженным, и воспроизводится одним гауссианом, а для того, чтобы второй пик был более выраженным необходимо добавить еще один гауссиан, который является суммой между первым и вторым пиком.

Метод, описанной выше был использован нами, для того, чтобы выполнить расшифровку функции радиального распределения $g(r)$, при различных температурах. Основное внимание уделялось изменению функции радиального распределения $g(r)$ по изотермам $T=200\text{K}$, $T=300\text{K}$. На рисунке представлены функции радиального распределения частиц при $T= 200 \text{ K}$ где символами «+» показано исходная функция распределения (из данных моделирования молекулярной динамики), сплошными линиями отдельные

вклады, полученные при воспроизведении $g(r)$ выжеными (2.10.1 и 2.10.2). На рисунке 33 также представлены функции радиального распределения частиц при $T = 300\text{K}$, на рисунке 34 демонстрируются функции радиального распределения частиц при $T = 300\text{ K}$.

Как видно из приведенных рисунков, с изменением температуры происходит изменение количества отдельных гауссовых функций, а также меняются параметры этих функций: локальные координационные числа n_i , дисперсионные коэффициенты $\bar{\xi}_i^2$, координационные длины r_i .

Итак, в качестве первой важной особенностью можно отметить то, что первый максимум в радиальном распределении для всех состояний воспроизводится одной гауссовой функцией.

По графику видно, что выраженный максимум в $g(r)$ с увеличением расстояния r сменяется быстро на затухания. Далее как видно на рисунке первый максимум в радиальном распределении $g(r)$ имеет выраженную асимметрию: правое крыло этого максимума более пологое, чем левое.

Подгонка выражений $g(r)$ к экспериментальным данным для радиального распределения $g(r)$, обнаруживает, что приемлемое согласие может быть получено в случае когда первый максимум $g(r)$, воспроизводится минимум как комбинацией трех гауссовых функций. В то же время, максимумы следующих порядков в $g(r)$ ($i=2, 3, \dots$) воспроизводятся отдельными Гауссианами вида:

$$g_i(r) = \frac{n_i}{\sqrt{2\pi\bar{\xi}_i^2}} \exp\left(-\frac{(r - r_i)^2}{2\bar{\xi}_i^2}\right). \quad (2.5.1)$$

Рассмотрим второй, пример, литий при различных температурах ($T=190\text{ L}$, $T=250\text{ K}$).

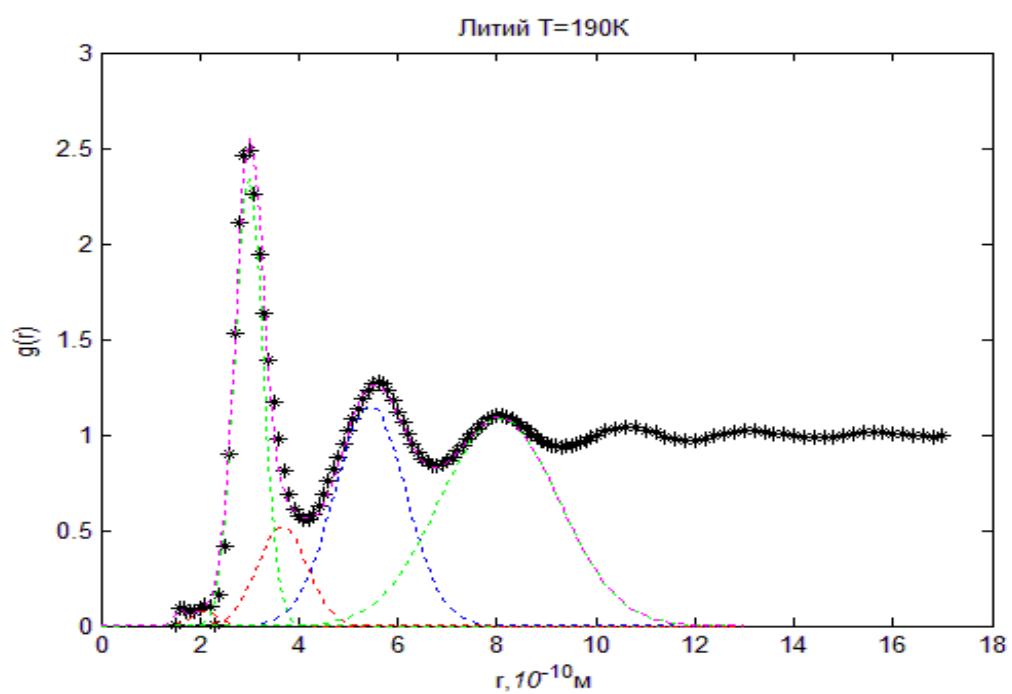


Рисунок 36. Функция радиального распределения литий, T=190 К

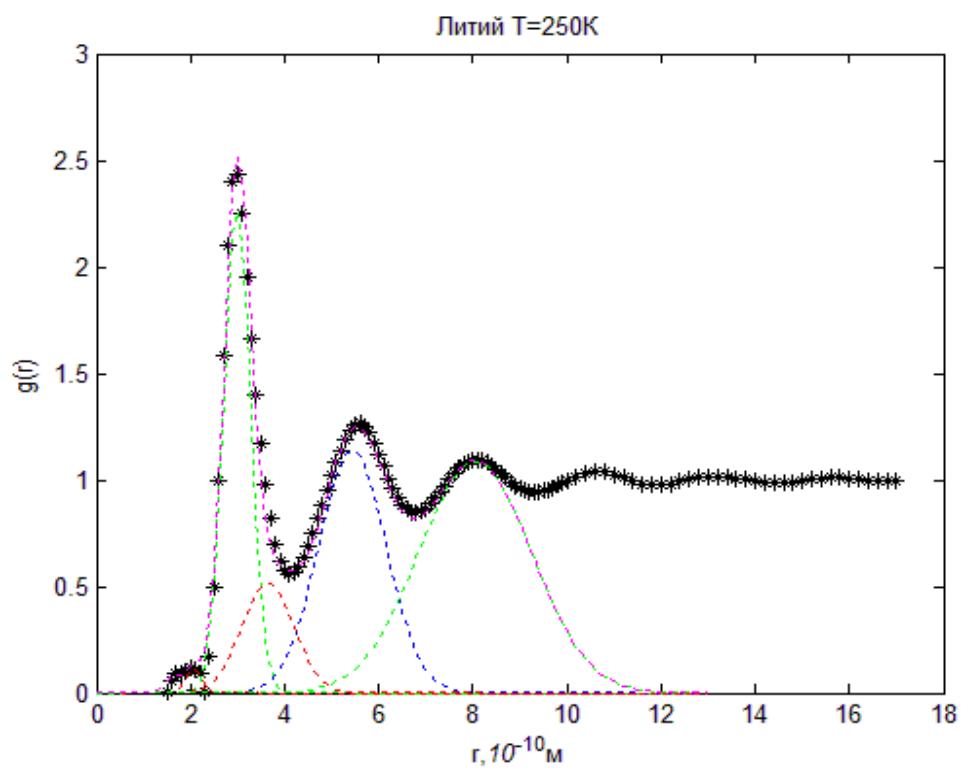


Рисунок 37. Функция радиального распределения лития, T=250K

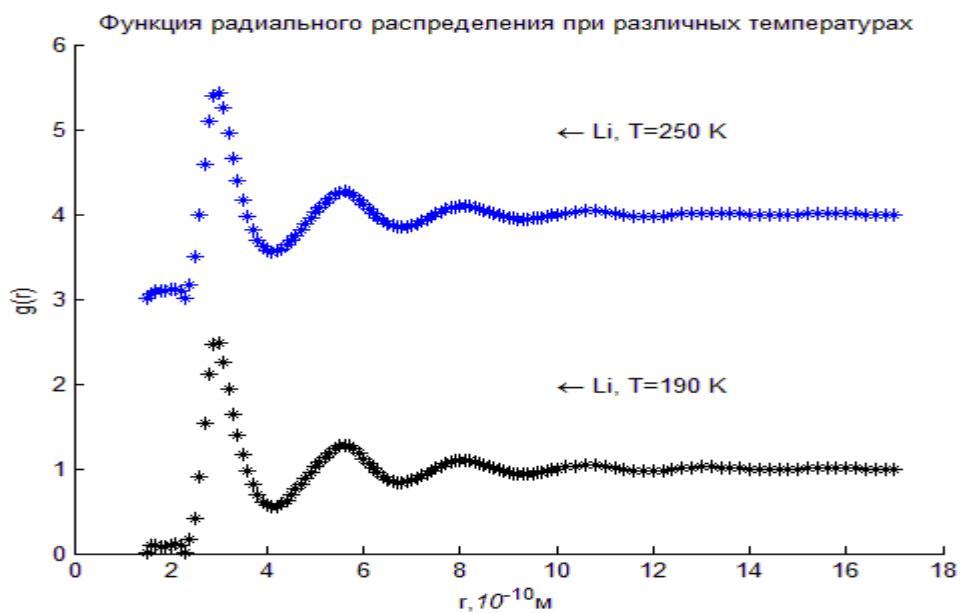


Рисунок 38. Функция радиального распределения лития при различных температурах, T=190, 250 K

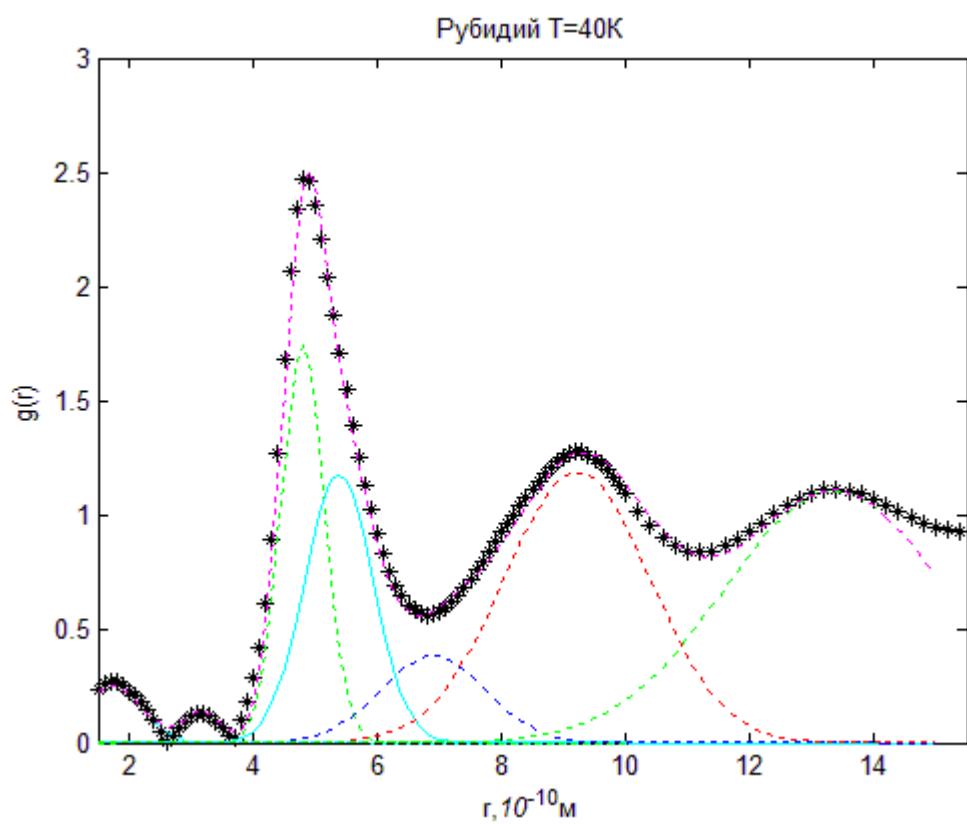


Рисунок 39. Функция радиального распределения рубидия, $T=40\text{ K}$

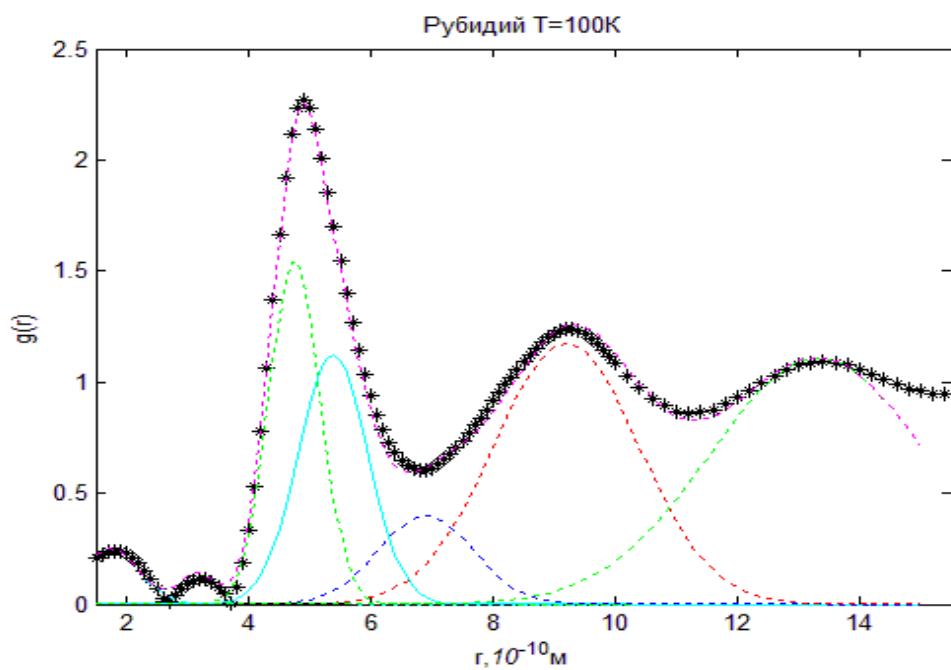


Рисунок 40. Функция радиального распределения рубидия, $T=100\text{ K}$

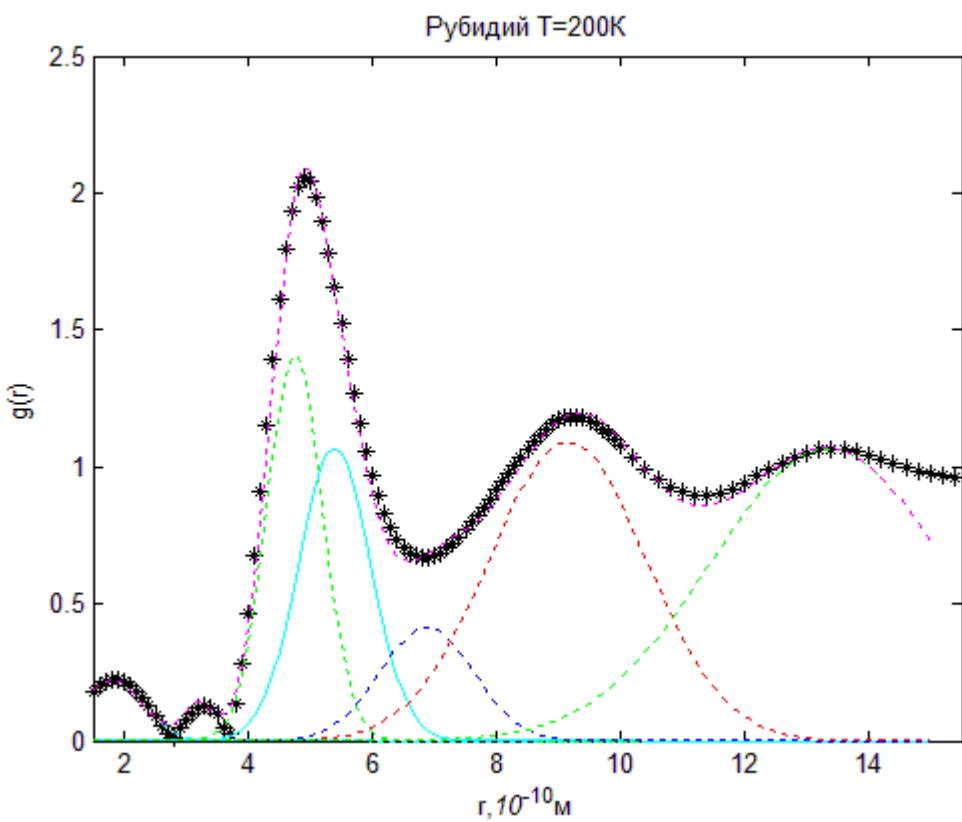


Рисунок 41. Функция радиального распределения рубидия, T=200 К

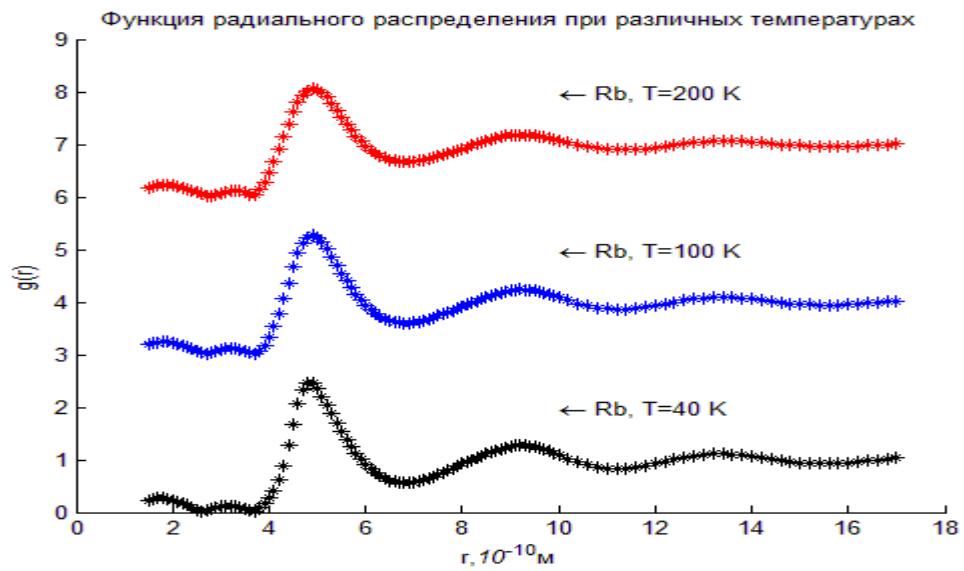


Рисунок 42. Функция радиального распределения при различных температурах рубидия, T=40, 100, 200 К

Рассматривая третий элемент Рубидий, который находится также в первой группе таблицы Менделеева, только чуть ниже по вертикали, с порядковым номером 37, можно сказать что максимальное значение пика при трех разных температурах остается примерно одинаковым. И с увеличением температуры увеличивается ksi (уширение), что свидетельствует о том, что при нагревании жидкости обычно увеличивают свой объем (расширяются), но уменьшается высота пика. Чем больше температура, тем больше расстояние r (тепловое движение частиц- чем больше температура, тем большее скорость движения частиц. В результате увеличивается и объем тела). В отличие от Лития первый максимум (при $i=1$) в радиальном распределении воспроизводится комбинацией из трех гауссианов вида(5).

i -обозначает порядковый номер максимума ($i=1,2,3,4$)

Следующий пример химического элемента, это Кальций при температуре $T=850K$, элемент второй группы .

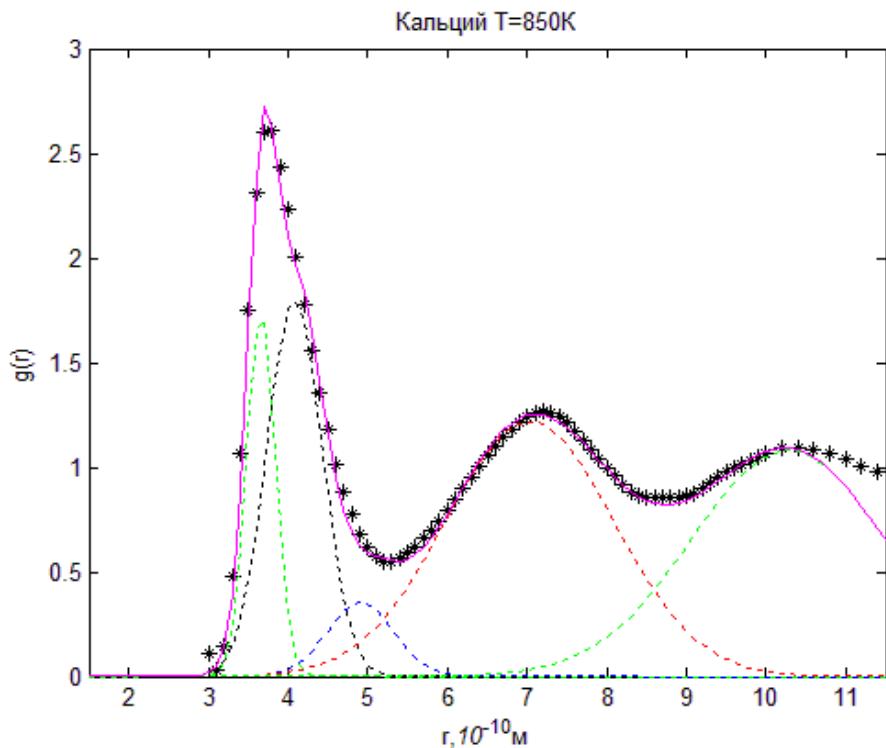


Рисунок 43. Функция радиального распределения Кальция, Т=850К

Как видно из рисунка, по всем параметрам, что этот элемент более сложен для нашей программы, и первый пик воспроизводится двумя гауссианами.

Рассмотрим элемент главной подгруппы второй группы Магний, элемент второй группы.



Рисунок 44. Металлический магний[36]

Магний — элемент главной подгруппы второй группы, третьего периода периодической системы химических элементов Д. И. Менделеева, с атомным номером 12.

Обозначается символом **Mg** (лат. *Magnesium*). Простое вещество **магний** — лёгкий, ковкий металл серебристо-белого цвета.

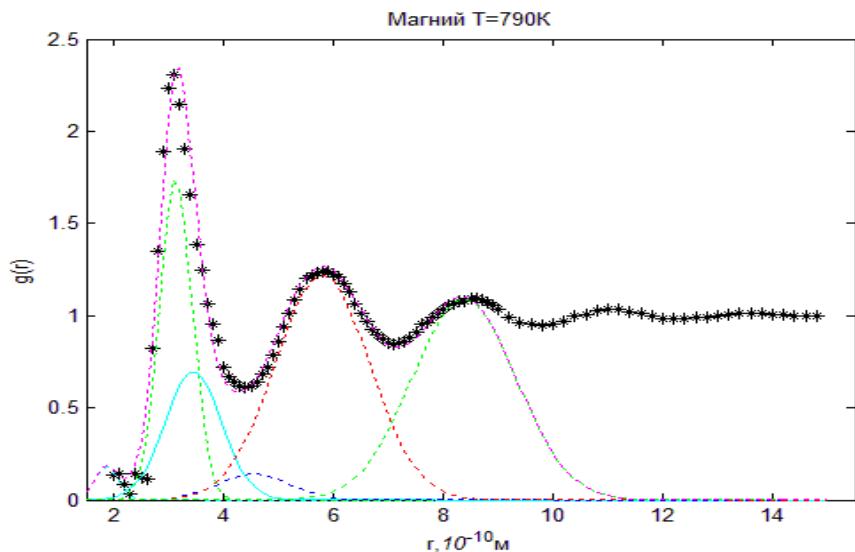


Рисунок 46. Функция радиального распределения магния, T=790 К

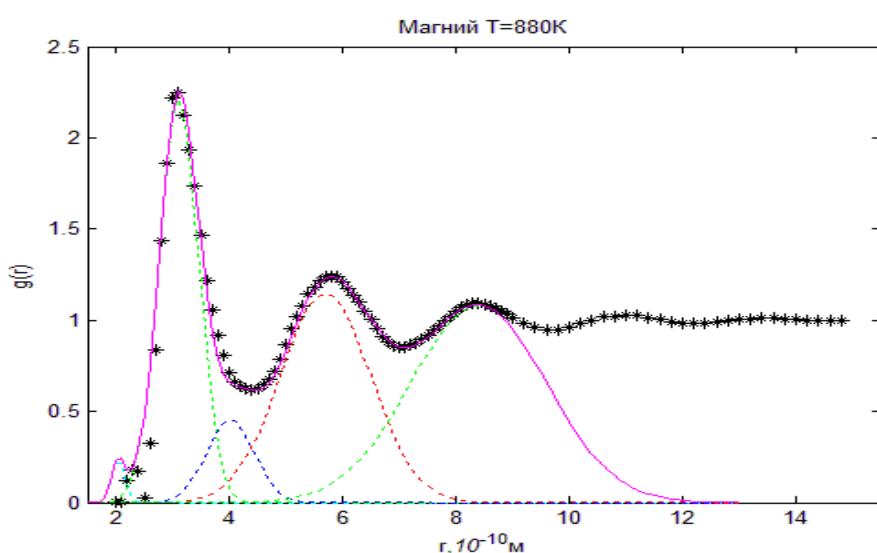


Рисунок 47. Функция радиального распределения магния, T=880 К

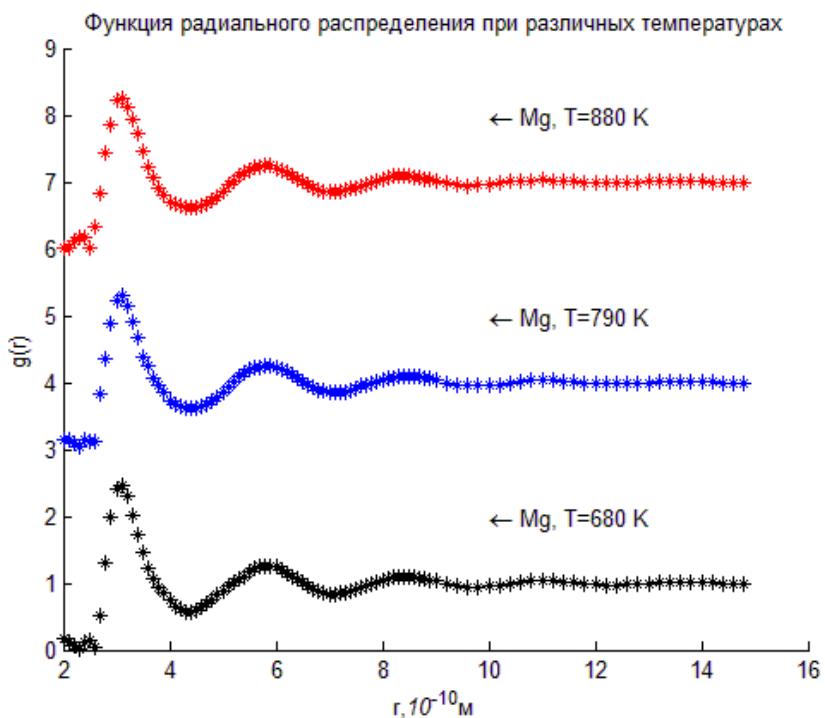


Рисунок 48. Функция радиального распределения магния при различных температурах, $T=680, 790, 880$ К

По данным графикам видно, что чем дальше первой группы мы уходим, тем «сложнее» функция радиального распределения . Теперь перейдем к элементам третьей подгруппы таблицы Менделеева. Рассмотрим на примере Алюминий и Индий.

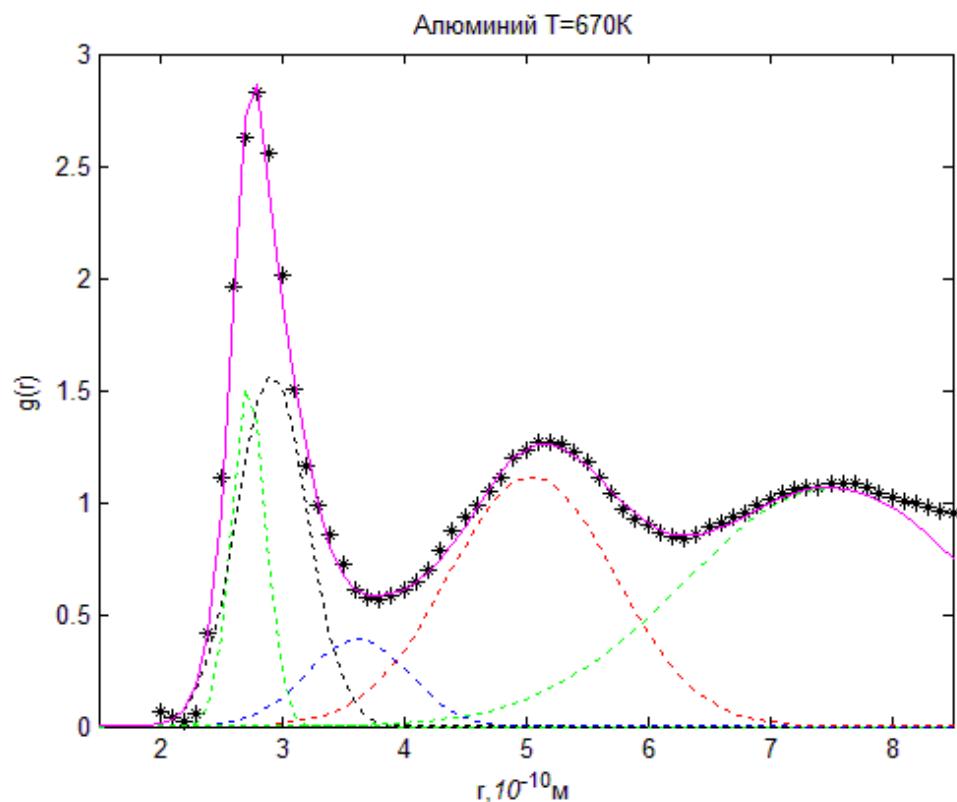


Рисунок 49. Функция радиального распределения алюминия при $T=670$ К

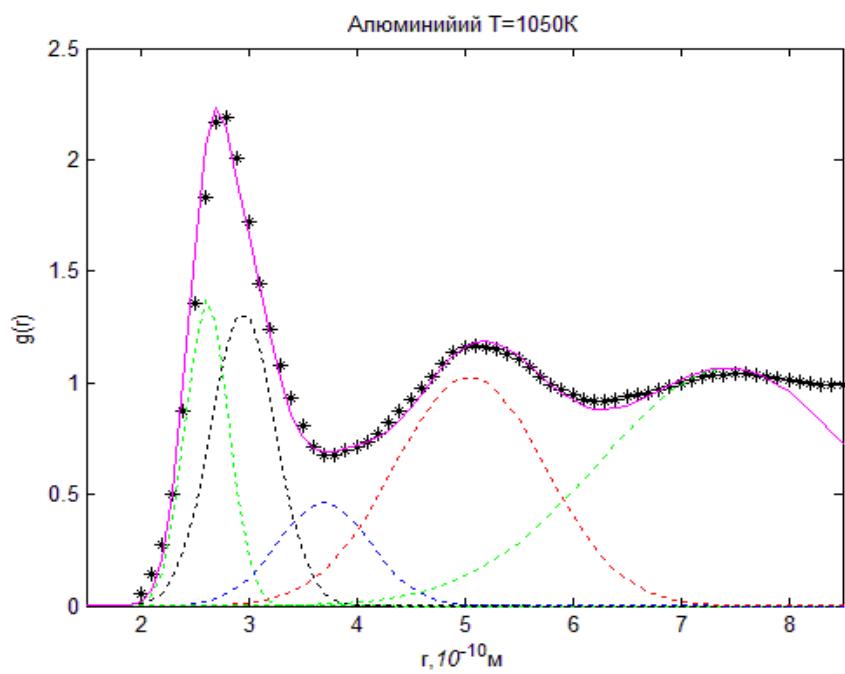


Рисунок 50. Функция радиального распределения алюминия
при T=1050 К

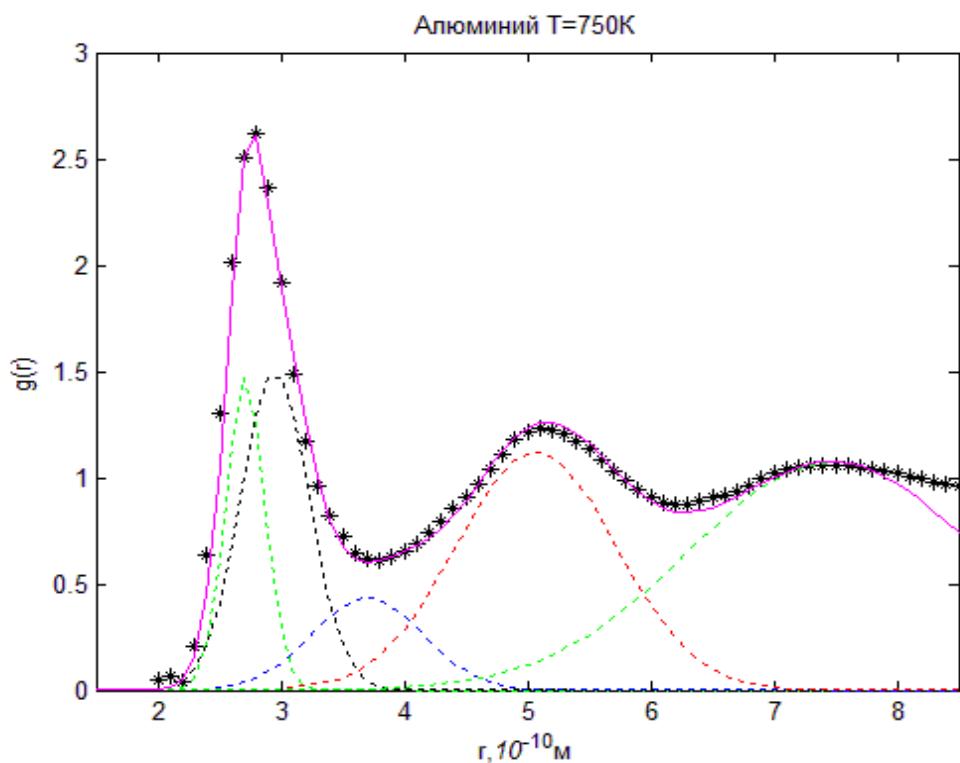


Рисунок 51. Функция радиального распределения алюминия T=750 К

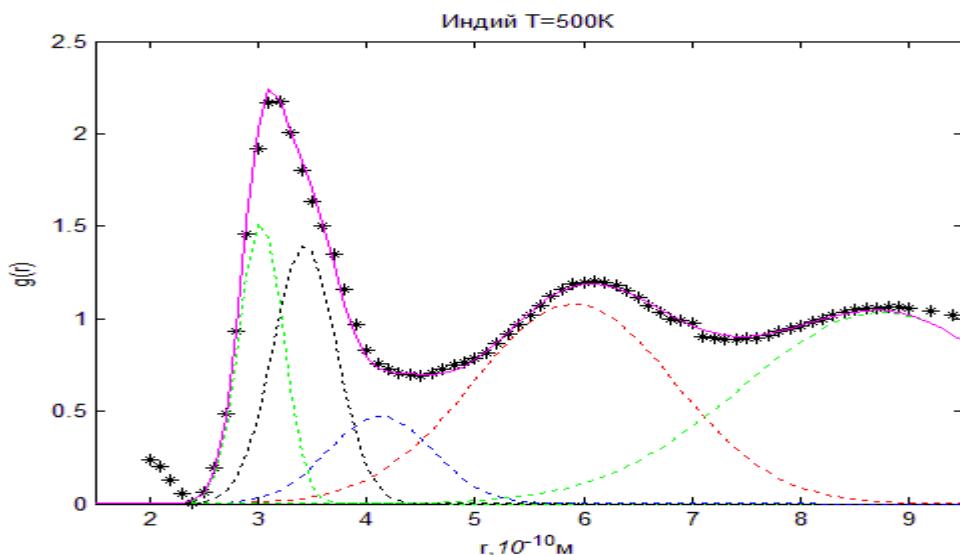


Рисунок 52. Функция радиального распределения индия при $T=500$ К

По всем графикам, изображенным выше, видно, что функция $g(r)$ имеет затухающий, осцилирующий около единичного значения, $g(r)=1$, характер [31]. При этом стоит отметить, что визуально различимыми являются первые три максимума, а иногда и четыре. Это касается простой равновесной жидкости. Положения максимумов в $g(r)$ соответствуют характерным корреляционным длинам ближнего и среднего порядка, которые в случае кристаллических систем указывают на размеры координационных сфер (первой r_1 , второй r_2 , третьей r_3 и т.д.).

Также данные графики показывают, что: с увеличением температуры, функция распределения смещается вправо. Выраженный максимум в $g(r)$ с увеличением расстояния (r) сменяется быстро затухающими осцилляциями. Далее высота главного максимума увеличивается при уменьшении температуры.

Чем правее в таблице Менделеева лежит элемент, тем он сложнее, тем больше в одном максимуме воспроизводится комбинаций гауссианов (например, первый максимум в наших примерах в радиальном

распределении, в случае алюминия и индия, воспроизводится комбинацией из трех гауссианов).

Если пойти по таблице Менделеева в правую часть и спускаться все ниже и ниже, то сам химический элемент усложняется, тем самым максимум первого простого элемента воспроизводится одним гауссианом, если спуститься ниже то воспроизводится комбинацией из нескольких гауссианов и так далее.

На этом этапе учитель демонстрирует компьютерные модели изучаемых объектов, процессов, явлений и фундаментальных опытов. Их главной отличительной чертой от предыдущего представления является возможность учащихся наблюдать за микропроцессами, что позволяет им расширить и дополнить своё представление об исследуемом объекте.

Далее учитель совместно с учащимися обсуждает увиденное, выявляет основные свойства и характеристики компьютерной модели путём изменения её параметров. Всё это позволяет создать у учащихся динамический образ модели.

В конце работы с компьютерной моделью учитель рассматривает вопрос о границах применимости идеальной модели и соответствия между компьютерной моделью и физическим процессом, явлением, фундаментальным опытом. Такое обсуждение препятствует отождествлению учащимися компьютерных моделей и самих объектов моделирования.

§ 2.6 Занятие №4

Тема: «Самостоятельная работа»

Цель этого занятия заключается в том, чтобы ученики самостоятельно продемонстрировали понимание пройденного (выше изложенного материала, заключенного в 1-3 занятие включительно).

Опираясь на данную цель вытекают следующие задачи:

1. Овладение учащимися методикой интерпретации экспериментальных данных по структуре простых жидкостей.
2. Формирование у учащихся навыков и умений делать обоснованные выводы по микроскопической структуре жидкости.
3. Овладение учащимися навыками выполнения самостоятельной работы, связанной с обработкой вещества, явлений, процессов.

Ученики самостоятельно на основе предложенного метода рассматривают предложенный нами элемент таблицы Менделеева, и описывают его. Перечень элементов следующий: K (70 K, 105K, 200K), Ba (730 K), Sr (730K, 780 K), Ga (200 K, 550 K).

Процесс самообучения требует от человека не только умения организовывать свою деятельность, но и умения работать с литературой и другими источниками информации, в том числе с компьютером, оснащённым лазерными дисками, или в сети Интернет.

На третьем этапе основной акцент делается на самостоятельную работу учащихся с компьютерной моделью. Для повышения эффективности данной работы, а так же для дальнейшего развития образного и теоретического мышления учащихся и их исследовательских умений оптимально организовать работу учащихся в виде ученического исследования.

Основными этапами исследования компьютерной модели являются:

1. Формулировка вопроса, который может раскрыть какую-либо характеристику модели.

2. Создание проблемной ситуации.

3. Выдвижение гипотезы, решающей данную проблемную ситуацию.

4. Обсуждение с учащимися выдвинутой гипотезы и составление плана по её проверке.

5. Проверка гипотезы на компьютерной модели.

6. Выдвижение следующей гипотезы и т.д.

В зависимости от уровня подготовки учащихся данный вид работы может осуществляться либо частично с помощью учителя, либо с помощью описания работы с моделью, либо полностью самостоятельно.

Независимо от того, что является объектом для построения компьютерной модели (идеальная модель, физический процесс, явление или фундаментальный опыт), способ её построения всегда будет один - рассмотрение физического объекта (процесса, явления), создание математической модели, отображение этой модели на экране компьютера с помощью различных программных средств. Все компьютерные модели отображаются в виде графиков. Работа с используемыми компьютерными моделями основана на изменении и измерении параметров модели и наблюдении за происходящим.

Использование компьютерных моделей идеализированных объектов, физических явления, процессов и фундаментальных опытов позволяет использовать их на протяжении всего изучения раздела "Молекулярная физика", что способствует созданию у учащихся более полного представления о процессе моделирования и развитии у них

исследовательских умений. Кроме того, постоянное использование позволяет выработать у учащихся серьезного отношения к данному виду работы.

Осуществление работы с компьютерными моделями в соответствии с вышеперечисленными моментами даёт учителю возможность на протяжении изучения всего раздела "Молекулярная физика" развивать у учащихся умения раскрывать закономерности явлений, рассуждать, обобщать и систематизировать знания, а всё это способствует развитию теоретического мышления учащихся.

Кроме того, при работе с компьютерными моделями учитель вовлекает учащихся в обсуждение и организует исследовательскую деятельность по изучению их свойств и характеристик, что не только повышает активность учащихся на уроках и уровень их знаний, но также способствует развитию наглядно-образного и теоретического мышления учащихся.

Заключение

В настоящей работе решалась задача, связанная с разработкой методики углубленного изучения школьного раздела «Молекулярной физики». Создан программный комплекс, с которым ученики могут работать самостоятельно. Важным является то, что данный программный комплекс разработан на основе современных методов статистической физики, позволяющий выполнить интерпретацию экспериментальных данных по дифракции нейтронных и рентгеновских лучей в простых однокомпонентных системах (в частности простых жидкостях). В результате изучения программы обучающиеся должны применять приобретенные знания и умения для решения задач.

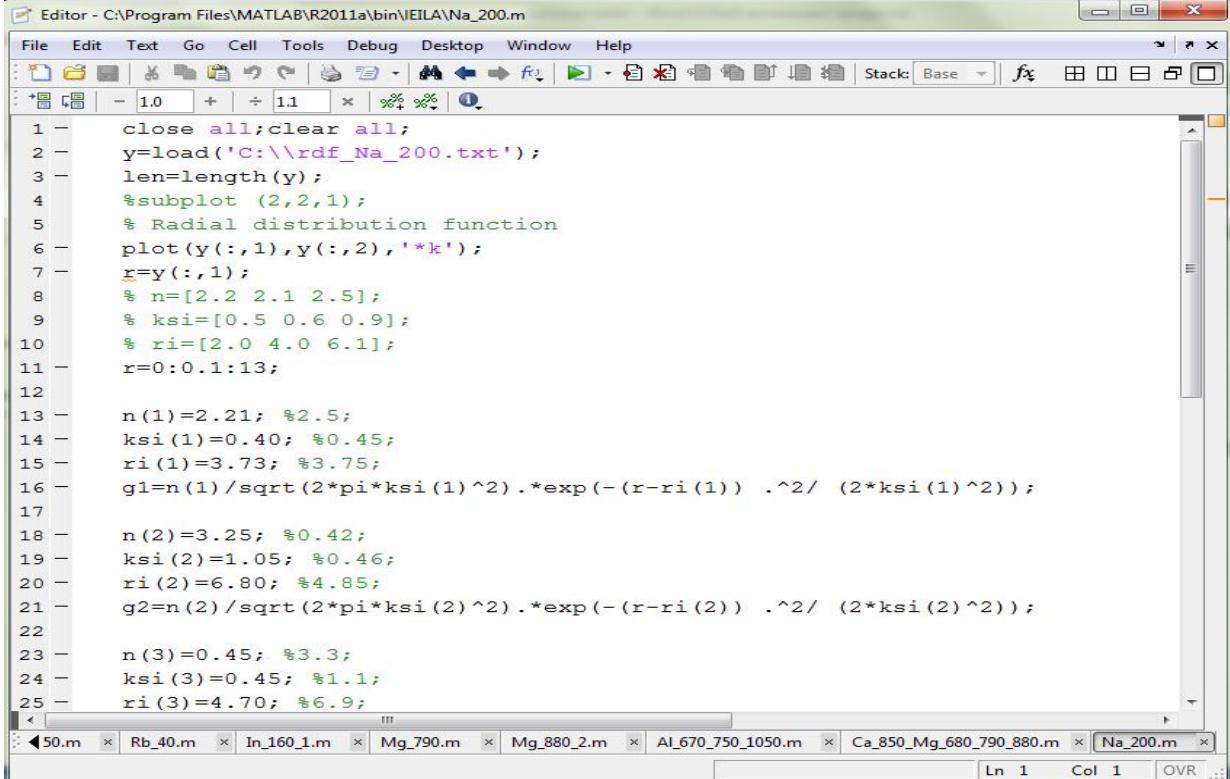
Как мы и говорили, есть определенные проблемы при изучении молекулярной физики в школе, т.к. недостаточно времени предоставлено и второй момент уровень недостаточен. Современные знания развиваются, поэтому возникает потребность введения дополнительных занятий для усвоения раздела физики.

Таким образом, в работе было выполнено следующее:

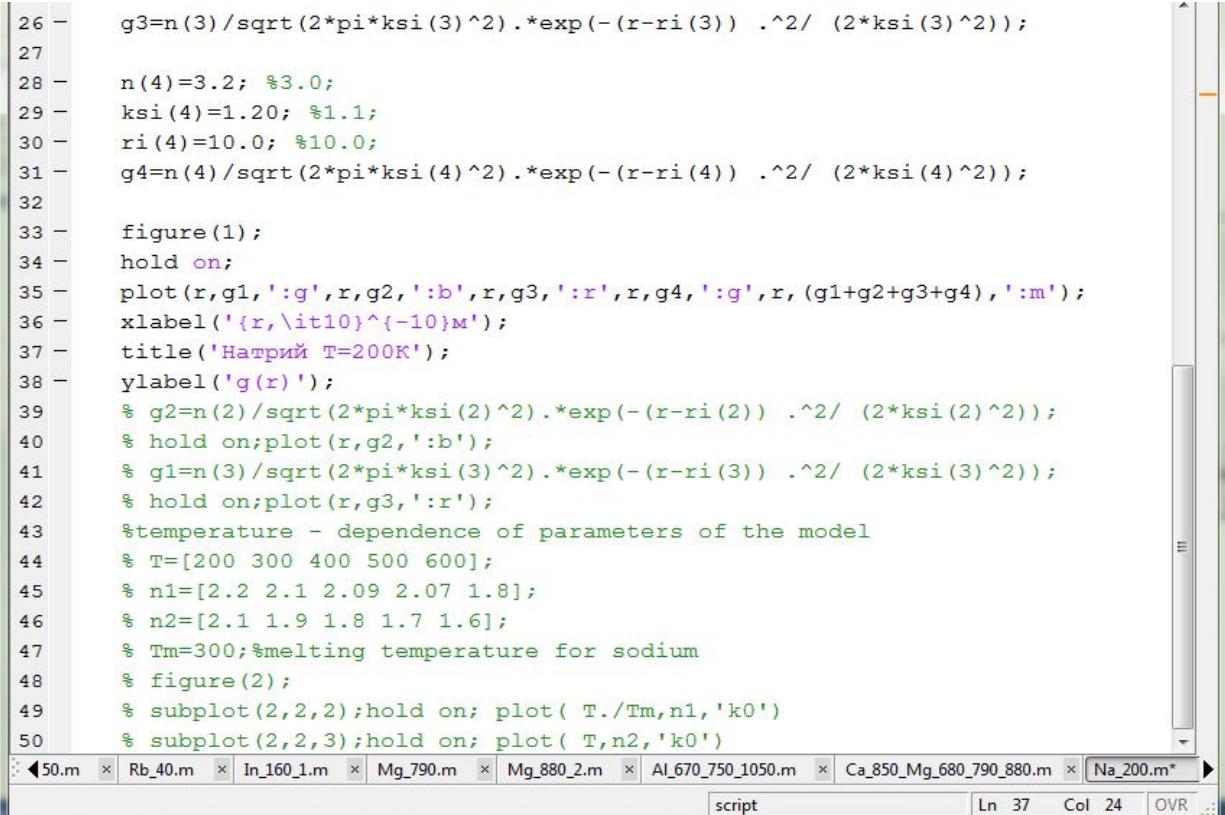
1. Разработан факультатив, который позволяет углубить знания учеников раздела молекулярной физики; предполагается организация при помощи четырех занятий;
2. Создан программный продукт, с помощью которого ученики могут самостоятельно выполнить интерпритацию экспериментальных данных по дифракции;
3. Успешное овладение материалами данного факультатива позволяет ученикам рассматривать другие разделы физики как квантовая физика, ядерная физика.

Приложение 1. Листинг программы Матлаб 2011:

C:\Program Files\MATLAB\R2011a\bin\lEILA.

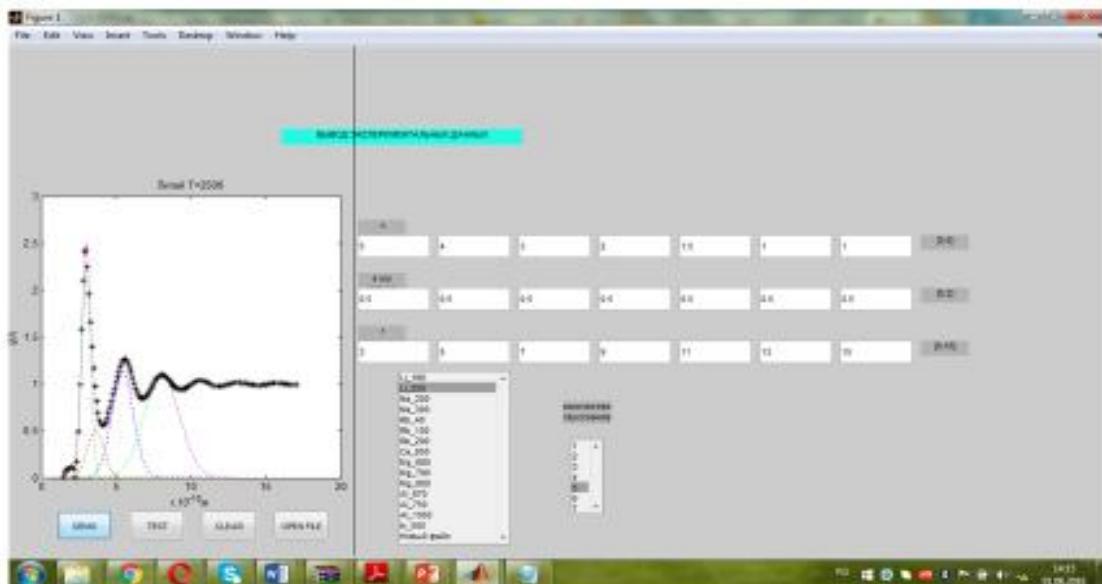


```
Editor - C:\Program Files\MATLAB\R2011a\bin\lEILA\Na_200.m
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
1 - close all;clear all;
2 - y=load('C:\\\rdf_Na_200.txt');
3 - len=length(y);
4 - %subplot (2,2,1);
5 - % Radial distribution function
6 - plot(y(:,1),y(:,2),'*k');
7 - r=y(:,1);
8 - % n=[2.2 2.1 2.5];
9 - % ksi=[0.5 0.6 0.9];
10 - % ri=[2.0 4.0 6.1];
11 - r=0:0.1:13;
12 -
13 - n(1)=2.21; %2.5;
14 - ksi(1)=0.40; %0.45;
15 - ri(1)=3.73; %3.75;
16 - g1=n(1)/sqrt(2*pi*ksi(1)^2).*exp(-(r-ri(1)).^2/ (2*ksi(1)^2));
17 -
18 - n(2)=3.25; %0.42;
19 - ksi(2)=1.05; %0.46;
20 - ri(2)=6.80; %4.85;
21 - g2=n(2)/sqrt(2*pi*ksi(2)^2).*exp(-(r-ri(2)).^2/ (2*ksi(2)^2));
22 -
23 - n(3)=0.45; %3.3;
24 - ksi(3)=0.45; %1.1;
25 - ri(3)=4.70; %6.9;
```



```
26 - g3=n(3)/sqrt(2*pi*ksi(3)^2).*exp(-(r-ri(3)).^2/ (2*ksi(3)^2));
27 -
28 - n(4)=3.2; %3.0;
29 - ksi(4)=1.20; %1.1;
30 - ri(4)=10.0; %10.0;
31 - g4=n(4)/sqrt(2*pi*ksi(4)^2).*exp(-(r-ri(4)).^2/ (2*ksi(4)^2));
32 -
33 - figure(1);
34 - hold on;
35 - plot(r,g1,:g',r,g2,:b',r,g3,:r',r,g4,:g',r,(g1+g2+g3+g4),:m');
36 - xlabel('r,\u00b5m');
37 - title('Натрий T=200K');
38 - ylabel('g(r)');
39 - % g2=n(2)/sqrt(2*pi*ksi(2)^2).*exp(-(r-ri(2)).^2/ (2*ksi(2)^2));
40 - % hold on;plot(r,g2,:b');
41 - % g1=n(3)/sqrt(2*pi*ksi(3)^2).*exp(-(r-ri(3)).^2/ (2*ksi(3)^2));
42 - % hold on;plot(r,g3,:r');
43 - %temperature - dependence of parameters of the model
44 - % T=[200 300 400 500 600];
45 - % n1=[2.2 2.1 2.09 2.07 1.8];
46 - % n2=[2.1 1.9 1.8 1.7 1.6];
47 - % Tm=300;%melting temperature for sodium
48 - % figure(2);
49 - % subplot(2,2,2);hold on; plot( T./Tm,n1,'k0')
50 - % subplot(2,2,3);hold on; plot( T,n2,'k0')
```

Приложение 2. Компьютерная программа, являющаяся основой для воспроизведения радиальной функции распределения



Один из файлов программы выглядит примерно таким образом:

```
close all;clear all;
y=load('C:\\rdf_Na_200.txt');
len=length(y);
%subplot (2,2,1);
% Radial distribution function
plot(y(:,1),y(:,2),'*k');
r=y(:,1);
% n=[2.2 2.1 2.5];
% ksi=[0.5 0.6 0.9];
% ri=[2.0 4.0 6.1];
r=0:0.1:13;

n(1)=2.21; %2.5;
ksi(1)=0.40; %0.45;
ri(1)=3.73; %3.75;
g1=n(1)/sqrt(2*pi*ksi(1)^2).*exp(-(r-ri(1)).^2/(2*ksi(1)^2));
```

```

n(2)=3.25; %0.42;
ksi(2)=1.05; %0.46;
ri(2)=6.80; %4.85;
g2=n(2)/sqrt(2*pi*ksi(2)^2).*exp(-(r-ri(2)).^2/ (2*ksi(2)^2));

n(3)=0.45; %3.3;
ksi(3)=0.45; %1.1;
ri(3)=4.70; %6.9;
g3=n(3)/sqrt(2*pi*ksi(3)^2).*exp(-(r-ri(3)).^2/ (2*ksi(3)^2));

n(4)=3.2; %3.0;
ksi(4)=1.20; %1.1;
ri(4)=10.0; %10.0;
g4=n(4)/sqrt(2*pi*ksi(4)^2).*exp(-(r-ri(4)).^2/ (2*ksi(4)^2));

figure(1);
hold on;
plot(r,g1,'g',r,g2,'b',r,g3,'r',r,g4,'g',r,(g1+g2+g3+g4),'m');
xlabel('r, 10^{-10} м');
title('Натрий T=200K');
ylabel('g(r)');

```

Приложение 3. Федеральный перечень учебников, рекомендуемых к использованию при реализации имеющих государственную аккредитацию образовательных программ начального общего, основного общего, среднего общего образования

Федеральный перечень учебников, рекомендуемых к использованию при реализации имеющих государственную аккредитацию образовательных программ начального общего, основного общего, среднего общего образования

1. Учебники, рекомендуемые к использованию при реализации обязательной части основной образовательной программы

Порядковый номер учебника	Автор/Авторский коллектив	Наименование учебника	класс	Наименование издателя учебника
1.2. Основное общее образование				
1.2.4.				
1.2.4.1				
1.2.4.1.1.1	Белага В.В., Ломаченков И.А., Панебратцев Ю.А.	Физика	7	ОАО "Издательство" Просвещение"
1.2.4.1.1.2	Белага В.В., Ломаченков И.А.,	Физика	8	ОАО "Издательство"

1.2.4.1.1.3	Панебратцев Ю.А. Белага В.В., Ломаченков И.А., Панебратцев Ю.А.	Физика	9	Просвещение" ОАО "Издательство" Просвещение" ООО "ИОЦ Мнемозина"
1.2.4.1.2.1	Генденштейн Л.Э., Кайдалов А.Б. под ред. Орлова В.А., Ройзена И.И.	"Физика" 7 класс, в 2 ч.	7	
1.2.4.1.2.2	Генденштейн Л.Э., Кайдалов А.Б. под ред. Орлова В.А., Ройзена И.И.	"Физика" 8 класс, в 2 ч.	8	ООО "ИОЦ Мнемозина"
1.2.4.1.2.3	Генденштейн Л.Э., Кайдалов А.Б. под ред. Орлова В.А., Ройзена И.И.	"Физика" 9 класс, в 2 ч.	9	ООО "ИОЦ Мнемозина"
1.2.4.1.3.1	Грачёв А.В., Погожев В.А., Селиверстов А.В.	Физика. 7 класс.	7	ООО Издательский центр ВЕНТАНА- ГРАФ
1.2.4.1.3.2	Грачёв А.В., Погожев В.А., Вишнякова Е.А.	Физика. 8 класс.	8	ООО Издательский центр ВЕНТАНА- ГРАФ
1.2.4.1.3.3	Грачёв А.В., Погожев В.А., Боков П.Ю.	Физика. 9 класс. Учебник для учащихся общеобразовательных организаций	9	ООО Издательский центр ВЕНТАНА- ГРАФ
1.2.4.1.4.1	Кабардин О.Ф.	Физика	7	ОАО "Издательство" Просвещение"
1.2.4.1.4.2	Кабардин О.Ф.	Физика	8	ОАО "Издательство" Просвещение"
1.2.4.1.4.3	Кабардин О.Ф.	Физика	9	ОАО "Издательство" Просвещение"
1.2.4.1.5.1	Кривченко И.В.	Физика	7	ООО "БИНОМ. Лаборатория знаний"
1.2.4.1.5.2	Кривченко И.В.	Физика	8	ООО "БИНОМ. Лаборатория знаний"
1.2.4.1.5.3	Кривченко И.В., Пентин А.Ю.	Физика	9	ООО "БИНОМ. Лаборатория знаний"
1.2.4.1.6.1	Перышкин А.В.	Физика	7	ООО "ДРОФА"
1.2.4.1.6.2	Перышкин А.В.	Физика	8	ООО "ДРОФА"
1.2.4.1.6.3	Перышкин А.В., Гутник Е.М.	Физика	9	ООО "ДРОФА"
1.2.4.1.7.1	Пурышева Н.С., Важеевская Н.Е.	Физика	7	ООО "ДРОФА"
1.2.4.1.7.2	Пурышева Н.С., Важеевская Н.Е.	Физика	8	ООО "ДРОФА"
1.2.4.1.7.3	Пурышева Н.С., Важеевская Н.Е., Чаругин В.М.	Физика	9	ООО "ДРОФА"
1.2.4.1.8.1	Хижнякова Л.С., Синявина А.А.	Физика. 7 класс.	7	ООО Издательский

1.2.4.1.8.2	Хижнякова Л.С., Синявина А.А.	Физика. 8 класс.	8	ООО Издательский центр ВЕНТАНА- ГРАФ
1.2.4.1.8.3	Хижнякова Л.С., Синявина А.А.	Физика. 9 класс.	9	ООО Издательский центр ВЕНТАНА- ГРАФ
1.3.5.1.		Физика (базовый уровень) (учебный предмет)		
1.3.5.1.1.1	Генденштейн Л.Э., Дик Ю.И. под ред. Орлова В.А.	"Физика" 10 класс (базовый и углубленный уровни)	10	ООО "ИОЦ Мнемозина"
1.3.5.1.1.2	Генденштейн Л.Э., Дик Ю.И. под ред. Орлова В.А.	"Физика" 11 класс (базовый и углубленный уровни)	11	ООО "ИОЦ Мнемозина"
1.3.5.1.2.1	Грачёв А.В., Погожев В.А., Салецкий А.М., Боков П.Ю.	Физика. 10 класс: базовый уровень, углублённый уровень.	10	ООО Издательский центр ВЕНТАНА- ГРАФ
1.3.5.1.2.2	Грачёв А.В., Погожев В.А., Салецкий А.М., Боков П.Ю.	Физика. 11 класс: базовый уровень, углублённый уровень.	11	ООО Издательский центр ВЕНТАНА- ГРАФ
1.3.5.1.3.1	Касьянов В.А.	Физика. Базовый уровень	10	ООО "ДРОФА"
1.3.5.1.3.2	Касьянов В.А.	Физика. Базовый уровень	11	ООО "ДРОФА"
1.3.5.1.4.1	Мякишев Г.Я., Буховцев Б.Б., Сотский Н.Н. / Под ред. Парфентьевой Н.А.	Физика (базовый уровень)	10	ОАО "Издательство" Просвещение"
1.3.5.1.4.2	Мякишев Г.Я., Буховцев Б.Б., Чаругин В.М. / Под ред. Парфентьевой Н.А.	Физика (базовый уровень)	11	ОАО "Издательство" Просвещение"
1.3.5.1.5.1	Пурышева Н.С., Важеевская Н.Е., Исаев Д.А.	Физика. Базовый уровень	10	ООО "ДРОФА"
1.3.5.1.5.2	Пурышева Н.С., Важеевская Н.Е., Исаев Д.А., Чаругин В.М.	Физика. Базовый уровень	11	ООО "ДРОФА"
1.3.5.1.6.1	Тихомирова С.А., Яворский Б.М.	"Физика" 10 класс (базовый и углубленный уровни)	10	ООО "ИОЦ Мнемозина"
1.3.5.1.6.2	Тихомирова С.А., Яворский Б.М.	"Физика" 11 класс (базовый и углубленный уровни)	11	ООО "ИОЦ Мнемозина"
1.3.5.1.7.1	Тихомирова С.А., Яворский Б.М. 10 кл.	"Физика" 10 класс (базовый уровень)	10	ООО "ИОЦ Мнемозина"
1.3.5.1.7.2	Тихомирова С.А., Яворский Б.М.	"Физика" 11 класс (базовый уровень)	11	ООО "ИОЦ Мнемозина"
1.3.5.1.8.1	Хижнякова Л.С., Синявина А.А.,	Физика. 10 класс: базовый уровень,	10	ООО Издательский

1.3.5.1.8.2	Холина С.А., Кудрявцев В.В. Хижнякова Л.С., Синявина А.А., Холина С.А., Кудрявцев В.В.	углублённый уровень. Физика. 11 класс: базовый уровень, углублённый уровень.	11	центр ВЕНТАНА- ГРАФ ООО Издательский центр ВЕНТАНА- ГРАФ
1.3.5.2.		Физика (углубленный уровень) (учебный предмет)		
1.3.5.2.1.1	Кабардин О.Ф., Орлов В.А., Эвенчик Э.Е. и др. / Под ред. Пинского А.А., Кабардина О.Ф.	Физика (углубленный уровень)	10	ОАО "Издательство" Просвещение"
1.3.5.2.1.2	Кабардин О.Ф., Глазунов А.Т., Орлов В.А. и др. / Под ред. Пинского А.А., Кабардина О.Ф.	Физика (углубленный уровень)	11	ОАО "Издательство" Просвещение"
1.3.5.2.2.1	Касьянов В.А.	Физика. Углубленный уровень	10	ООО "ДРОФА"
1.3.5.2.2.2	Касьянов В.А.	Физика. Углубленный уровень	11	ООО "ДРОФА"
1.3.5.2.3.1	Мякишев Г.Я., Синяков А.З.	Физика. Механика. Углубленный уровень	10	ООО "ДРОФА"
1.3.5.2.3.2	Мякишев Г.Я., Синяков А.З.	Физика. Молекулярная физика. Термодинамика. Углубленный уровень	10	ООО "ДРОФА"
1.3.5.2.4.1	Мякишев Г.Я., Синяков А.З.	Физика. Электродинамика. Углубленный уровень	10-11	ООО "ДРОФА"
1.3.5.2.4.2	Мякишев Г.Я., Синяков А.З.	Физика. Колебания и волны. Углубленный уровень	11	ООО "ДРОФА"
1.3.5.2.4.3	Мякишев Г.Я., Синяков А.З.	Физика. Оптика. Квантовая физика. Углубленный уровень	11	ООО "ДРОФА"

Источник использованной литературы

- [1]<https://edu.tatar.ru/upload/images/files/федеральный%20перечень%20учебников%202015-2016.pdf>.
- [2] <http://minobrnauki.ru/документы/2365>
- [3]<http://potential.org.ru/Home/ArtDt200504230944PH9J4>
- [4]Н.Ф.Романцова, С.А.Осяк «Педагогическая практика студентов на 4 курсе пофизике».Учебно-методические рекомендации. Лесосибирск:ЛПИ- филиал СФУ, 2010. – 31 с.
- [5] Н.Ф.Романцова, С.А.Осяк «Педагогическая практика студентов на 4 курсе пофизике».Учебно-методические рекомендации. Лесосибирск:ЛПИ- филиал СФУ, 2010. –10-53 с.
- [6]<http://www.kakprosto.ru/imageboard/211536-kartinka-po-teme-chto-takoe-molekula>.
- [7]<http://multiring.ru/course/physicspart1/content/chapter3/section/paragraph1/theory.html#.V2HKd9RkjIU>.
- [8]Габриелян О.С. Периодический закон и Периодическая система химических элементов Д.И.Менделеева: Химия 9 класс/ О.С. Габриелян. –Москва: 18-е изд., стер. Дрофа, 2011. – 270, [2] с.
- [9]<http://www.yaklass.ru/materiali?mode=lsntheme&themeid=127>
- [10] <http://900igr.net/kartinki/fizika/Zakony-molekuljarnoj-fiziki/029-Brounovskoe-dvizhenie.html>
- [11]<http://interest-travel.ru/albert-ejnshtejn-fakty/html>
- [12]The 10 Greatest Scientist You've Never Heard Of/ Posted in Technology|

1 Comment/<http://winarticles.net/the-10-greatest-scientist-you've-never-heard-of/2012>

[13]Касьянов В. А.Агрегатные состояния вещества: Учебник по физике 10 класс / В.А.Касьянов.— Москва: Дрофа, 2000. — 420 с.

[14] https://ru.wiki2.org/wiki/Файл:States_of_matter_Ru_svg

[15]<http://studfiles.ru/preview/2201372>

[16]Буховцев Б.Б. Молекулярно – кинетическая теория: Учебник Физика. 9 класс/Б.Б.Буховцев,Ю.Л.Климонтович, Г.Я. Мякишев. -М.: «Просвещение», 1982.-272 с.

[32]Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей / Я.И. Френкель — Ленинград: Изд-во «Наука», 1975. — 592 с.

[17]Егоров-Тисменко Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия: Учебник / Ю. К. Егоров – Тисменко, под ред. академика В. С. Урусова. — Москва: КДУ, 2005. —с 22.: ил . ISBN 5-98227-095-4.

[18] <http://poxe.ru/other/1166333860-kristally.html>

[19]Кузьмичева Г.М.Основные разделы кристаллографии: Учебное пособие/ Г.М. Кузьмичева. – Москва: МИТХТ, 2002. – 80 с.

[20]<http://class-fizika.spb.ru/index.php/10-11cl/902-td8>

[21]Tosi M.P. Atomic dynamics in liquids / M.P. Tosi, N.H. March // Dover.: New York, 1991.

[22]Мокшин А.В. Микроскопическая динамика и структурообразование в неупорядоченных конденсированных средах: диссертация на соискание ученой степени док. физ.-мат.наук./А.В. Мокшин// -К.-2014, с.257

[23]Галимзянов Б.Н. Исследование формирования локального порядка в неупорядоченных конденсированных средах/ Б.Н.Галимзянов // Выпускная квалификационная работа.- Казань. – 2011, с.98

[24] Мокшин А. В. Ближний порядок и динамика атомов в жидким галлии/ А. В. Мокшин, Р. М. Хуснутдинов, А. Г. Новиков, Н. М. Благовещенский, А. В. Пучков // ЖЭТФ.-К. - 2015. - т.148, вып.5(11). - с.947-965.

[25]Сдобняков Н.Ю. Применение локально–координационного приближения термодинамической теории возмущений к расчету избыточной свободной энергии малых капель инертных газов/ Н.Ю.Сдобняков, В.М.Самсонов //Вестник ТвГУ. Серия: Физика (1), №4(6). –Тверь, 2004. – с.163-168.ISSN 1995-0128.

[26]http://www.trkterra.ru/news/news_world/uchenye-iskusstvennyy-fotosintez-skoro-zamenit-neft-i-gaz/16092015-1529.

[27]<http://sciencelearn.org.nz/index.php/Science-Stories/ObservingWater/Alternative-conceptions-about-water-s-states-of-matter>.

[28]Антошкина А.И. Модельные представления о строении жидкостей, газов и кристаллов: Реферат. РГУ/А. И. Антошкина.–Пенза, 2012.- 9 с.

[29]<http://for-schoolboy.ru/Molekulyarnaya-fizika-i-termodinamika-938.html>.

[30]<http://www.nalkho.com/information/xrd/>.

[31]Мокшин А. В. Ближний порядок и динамика атомов в жидким галлии / А. В. Мокшин, Р. М. Хуснутдинов, А. Г. Новиков, Н. М. Благовещенский, А. В. Пучков // ЖЭТФ.-К. - 2015. - т.148, вып.5(11). - с.947-965.

[32]Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей / Я.И. Френкель — Ленинград: Изд-во«Наука», 1975. — 592 с.

[33]<http://fakty-pro.ru/wp-content/uploads/2016/05/himicheskie-elementy.jpg>

[34] http://www.chitai-gorod.ru/catalog/book/405478/?utm_campaign=9266&utm_content=9267&utm_medium=cpc&utm_source=ymarket&utm_term=405478&ymclid=66635548458025583610002

[35] http://bruma.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/NATRI.html

[36] <http://wiki.3001online.ru/Article/64/Элементы>.