
Л. А. РОТТ,
доц., канд. физ.-мат. наук,
В. Б. НЕМЦОВ,
доц., канд. техн. наук,
В. С. ВИХРЕНКО,
ст. препод., канд. физ.-мат. наук
(Белорусский технологический институт
им. С. М. Кирова)

ПОСТРОЕНИЕ КУРСА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ ДЛЯ ИНЖЕНЕРОВ-ХИМИКОВ

«Кто не знаком с законами движения, тот не может понять природу»

Г. Галилей

Современные требования к подготовке инженеров-химиков вызывают необходимость значительно улучшить их физико-математическую подготовку. Составной частью этой подготовки является освоение курса теоретической механики. Студент должен получить такие знания, которые позволили бы ему успешно изучать не только традиционные общинженерные и специальные технические дисциплины, но и сугубо химические курсы.

Именно для понимания природы химических и химико-технологических процессов знания в области теоретической механики так же необходимы, как и для освоения методов расчета механического оборудования химических производств.

Основная особенность курса теоретической механики для химических и химико-технологических специальностей состоит в том, что он находит применение в самом широком диапазоне. Требования к изучению курса самые разнообразные, что не может не учитываться при его построении.

При этом, конечно, перед преподавателями кафедр теоретической механики возникают большие трудности. Однако усилия, затрачиваемые на их преодоление, окупаются с большой отдачей. Возрастает интерес к курсу со стороны студентов, повышается их успеваемость.

Учебные планы химико-технологических специальностей наряду с традиционными общинженерными дисциплинами вклю-

чают и новые технические дисциплины, а также большое число химических дисциплин. Все изучаемые дисциплины так или иначе связаны с курсом теоретической механики. Знание и понимание этой связи сделают читаемый курс теоретической механики более плодотворным, а значит, и более интересным и нужным студентам.

Все изучаемые химические дисциплины (курсы неорганической, физической и органической химии) опираются на основы теоретической физики и теоретической химии. Так, значительный раздел программы, например, курса неорганической химии, изучаемого на первом году обучения, посвящен элементам квантовой механики и на ее основе подразумевается изучение природы химических сил (типы химической связи и физические свойства соединений). Поэтому возникают большие трудности в изучении и преподавании этих дисциплин.

«Физические» запросы химических дисциплин видны уже из того, насколько они нуждаются в тесной связи с классическим курсом теоретической механики. Рассмотрим назначение теоретической механики, исходя из запросов других дисциплин, изучаемых на химико-технологическом факультете. Взять, например, программу курса «Физическая химия», выделяющегося своим значением и объемом (около 200 ч). Программа состоит из двух больших частей: «Элементы учения о строении вещества» и «Химическая термодинамика». В первой части раздел «Химическая связь» включает основные понятия волновой механики и их применение в теории атома и молекулы.

Далее в этой же первой части программы два раздела «Строение молекул» и «Междучастичные взаимодействия и агрегатные состояния» (ср. с упомянутой выше программой курса неорганической химии). Совершенно ясно, что усвоение этих разделов требует достаточно широких знаний основ классической механики. Покажем это на целом ряде примеров.

Современная химия все более связывает физико-химические свойства вещества с его внутренней структурой, характером межмолекулярного взаимодействия. Здесь для курса механики — область многочисленных иллюстраций (примеры вандерваальсовских, кулоновских сил, конкретных потенциальных функций). Естественно, что студент-химик впервые должен освоиться с понятием силового потенциального поля в курсе теоретической механики.

В программы для механических и ряда других специальностей неизменно включаются такие вопросы, как понятие о силовом поле, потенциальном силовом поле и силовой функции. Приводятся примеры потенциальных силовых полей. Подсчитывается потенциальная энергия и т. п.

Все это не в меньшей мере, если не в большей, должен усвоить студент-химик. Иначе будущий инженер-химик не пой-

мет, например, смысл потенциального барьера, который сейчас является повседневным рабочим понятием, языком учебной и научной литературы.

В самом начале курса теоретической механики (уже на первой лекции), вводя понятие силы, следует сослаться на примеры межмолекулярного взаимодействия. Для многих веществ справедливо представление об атомах как о материальных точках (молекулярные неполярные вещества, как, например, инертные газы, азот, кислород, бензол и др.).

Возьмем неон в любом агрегатном состоянии (газообразном, жидком, твердом). Любая пара молекул находится в постоянном взаимодействии. Допустим, между ними расстояние $2,5 \text{ \AA}$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$). Возникают огромные силы отталкивания. Но на расстоянии $3,5 \text{ \AA}$ действуют уже силы притяжения. А на расстоянии 5 \AA практически силы притяжения равны нулю. Силы взаимодействия двух точечных молекул зависят только от расстояния между ними и не зависят от их ориентации в пространстве. Изложение понятия пары сил целесообразно также проиллюстрировать молекулярным примером. Молекулы полярных веществ (вода, аммиак, двуокись серы) представляются в виде жестких образований (диполей). На каждую молекулу-диполь со стороны остальных молекул действует сила, приложенная к ее центру тяжести, и пара сил, вызывающая вращение вокруг центра тяжести.

Ниже, при рассмотрении потенциальной энергии, снова вернемся к межмолекулярным силам.

Представляет большой интерес для студентов-химиков рассмотреть применимость классической механики при расчете разрыва химической связи молекул (явление диссоциации). Рассмотрим двухатомную молекулу (система двух материальных точек). В первом приближении считаем, что атомы совершают гармонические колебания (гармоническое приближение).

Механической моделью, в известной мере адекватной рассматриваемому приближению, являются два шарика с одинаковой массой, соединенных пружиной, имеющей коэффициент жесткости c . Натуральная длина пружины r_0 . Пусть при увеличении ее длины на 2δ пружина обрывается. Легко определить минимальную необходимую скорость каждого из шаров, чтобы они смогли разорвать пружину. Конечные скорости шаров равны нулю.

Применяя теорему об изменении кинетической энергии, находим:

$$2 \frac{mv_0^2}{2} = 2c\delta^2. \quad (1)$$

Отсюда следует, что потребная скорость

$$v_0 = \omega\delta,$$

где собственная частота колебаний $\omega = \sqrt{\frac{2c}{m}} \left(\frac{m}{2} - \text{приведенная масса} \right)$.

С другой стороны, энергия разрыва и частота колебаний известны из физических (спектроскопических) данных. Тогда можно определить удлинение δ . Так, для молекулы кислорода O_2

$$\frac{mv_0^2}{2} = 4,06 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}; c = 1,18 \cdot 10^6 \text{ дн/см}; r_0 = 1,2 \text{ \AA}.$$

Тогда

$$\delta = \sqrt{\frac{m}{2c}} v_0 = 0,185 \text{ \AA}.$$

Следовательно, для разрыва пружины (связи) необходимо удлинить ее на $2\delta = 0,37 \text{ \AA}$, а потребная скорость $v_0 = 5,5 \cdot 10^3 \text{ м/сек}$. Это и есть по порядку характерная тепловая скорость молекулы. Отсюда видно, что столкновение молекул (удар) может привести к диссоциации. Познавательная сторона примера для студента очевидна.

Рассмотрим теперь возможность разрыва за счет вращательного движения молекулы. В механической модели имеется вращение с угловой скоростью ω вокруг оси, проходящей через середину пружины. Разрыв происходит, если максимальная упругая сила пружины станет равной равной центробежной силе, т. е.

$$2c\delta = \frac{mv_{\text{вр}}^2}{\frac{r_0}{2} + \delta}. \quad (2)$$

Из (1) и (2) составим отношение

$$\frac{v_{\text{вр}}^2}{v_{\text{кол}}^2} = 1 + \frac{r_0}{2\delta} \text{ или } \frac{v_{\text{вр}}^2}{v_{\text{кол}}^2} > 1. \quad (3)$$

Отсюда видно, что потребная вращательная скорость намного больше колебательной скорости. Это значит, что диссоциация скорее происходит за счет возбуждения колебательных степеней свободы (при одной и той же температуре), чем за счет вращения.

Вычисление термодинамических функций состояния молекулярной системы — одна из важнейших задач в курсе физической химии. Обратимся, например, к известной монографии И. Н. Годнева «Вычисление термодинамических функций по молекулярным данным». В аннотации к книге указано, что она предназначена, в частности, и для инженеров.

В современных методах вычисления термодинамических функций широко пользуются представлением о молекуле как

о твердом теле. Приходится вычислять моменты инерции молекулы. Почему бы уже в курсе механики студенту не «ощутить» момент инерции молекулы с пространственной конфигурацией?

В данном случае к микроскопическим объектам применяются понятия классической механики. Необходимо ли это студентам-химикам? Безусловно, да. Иллюстрация применимости классической механики к микромиру лишь подчеркивает и убеждает студента во всеобъемлющем характере теоретической механики.

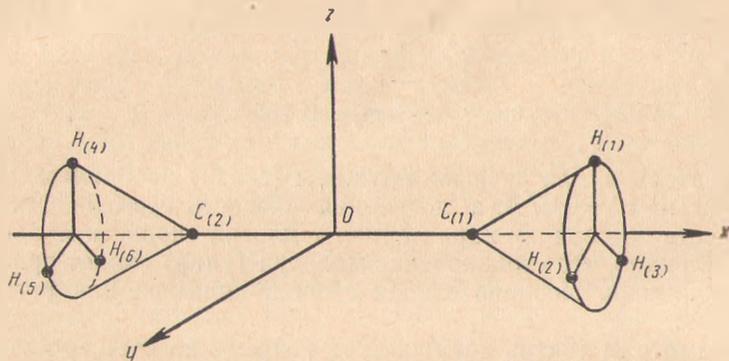


Рис. 1. Пространственная молекула этана C_2H_6 при комнатной температуре и нормальном давлении: углы С—Н тетраэдрические

В качестве примера приведем молекулу этана C_2H_6 . На рис. 1 молекула изображена в виде квазитвердой конфигурации материальных точек (атомов) (два симметрично расположенных волчка). Система координат выбрана так, что ось x проходит через атомы углерода, а ось z расположена так, что два атома водорода оказываются главными центральными осями инерции. Имея все необходимые размеры (расстояние С—С, равное $D=1,55 \text{ \AA}$; С—Н, соответственно $d=1,09 \text{ \AA}$, косинус угла между направлениями С—С и С—Н равен $-1/3$), легко найти координаты атомов и затем вычислить моменты инерции.

Момент инерции молекулы относительно оси x

$$J_{xx} = \sum_i m_i (y_i^2 + z_i^2) = 10,61 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2.$$

Соответственно и другие моменты инерции

$$J_{yy} = J_{zz} = 42,26 \cdot 10^{-40}.$$

Как легко проверить, центробежные моменты инерции

$$\sum_i m_i x_i y_i; \quad \sum_i m_i x_i z_i; \quad \sum_i m_i y_i z_i.$$

равны нулю.

Момент инерции группы CH_3 относительно собственной оси вращения равен $\frac{8}{3} m_{\text{H}} d^2$, т. е. в два раза меньше I_{xx} .

Заметим, что если два главных центральных момента инерции равны, как в приведенном примере, то такую молекулу называют молекулой типа симметричного волчка. Эллипсоид инерции представляет собой эллипсоид вращения. К этому же типу молекул относятся и CH_3Cl , CHCl_3 , AsCl_3 .

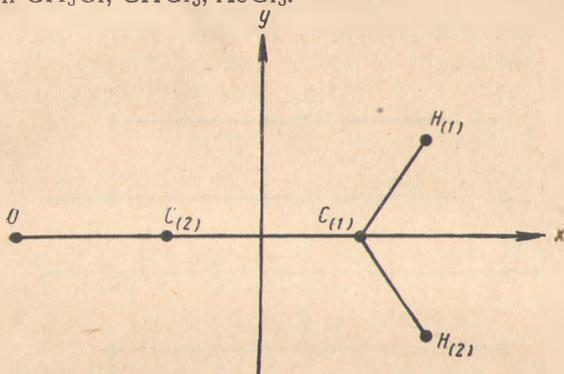


Рис. 2. Плоская молекула кетена $\text{C}_2\text{H}_2\text{O}$. Начало координат посередине между атомами углерода

Если квазитвердая молекула имеет три равных главных момента инерции, она называется сферическим волчком (CH_4 , CCl_4 , SF_6). Напротив, если все три момента различны, то молекула типа асимметричного волчка (например, молекула этилена C_2H_4). Многие квазитвердые молекулы имеют линейную конфигурацию (CO_2 , C_2H_2 , BeCl_2).

Квазитвердыми молекулами называют такие молекулы, в которых отсутствуют внутренние движения с большими амплитудами. Они практически обладают единственной устойчивой конфигурацией. В рассмотренной выше молекуле этана одна группа CH_3 вращается относительно другой. Но и это вращение весьма ограниченное.

В качестве упражнения можно предложить молекулу кетена $\text{C}_2\text{H}_2\text{O}$ плоской конфигурации (рис. 2):

$$d_1(\text{C}-\text{C})=1,35\text{\AA}; \quad d_2(\text{C}-\text{H})=1,07\text{\AA}; \quad d_3(\text{C}-\text{O})=1,17\text{\AA};$$

$$\angle \text{HCH}=118^\circ.$$

Начало координат выбрано посередине между атомами углерода. Помимо подсчета моментов инерции ($J_{xx}=2,82 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2$; $J_{yy}=84,74 \cdot 10^{-40}$; $J_{zz}=87,55 \cdot 10^{-40}$), можно предложить отыскать положение центра инерции молекулы (координаты центра инерции $x_c=-0,643 \text{\AA}$; $y_c=z_c=0$).

В программе курса «Физическая химия» записано: «...Колебания атомов в молекуле. Собственная частота колебаний. Гармонические и ангармонические колебания. Вычисление колебательного движения».

Совершенно ясно, что все эти требования программы подразумевают наличие у студентов четких представлений из классической теории колебаний, определений и понятий.

В качестве примера колебаний атомов в молекуле рассмотрим трехатомную линейную молекулу (например, BeCl_2 ; рис. 3, а).

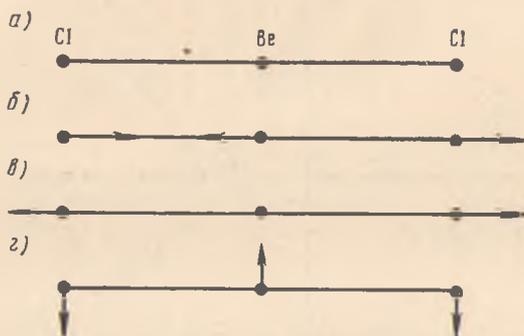


Рис. 3. Линейная трехатомная симметричная молекула BeCl_2 :

а — равновесное положение атомов; б — продольное антисимметричное колебание атомов относительно центра инерции молекулы; в — продольное симметричное колебание; г — симметричное колебание изгиба

Система трех материальных точек имеет всего девять степеней свободы. Но пять из них связаны с поступательным и вращательным движениями любой линейной молекулы как квазитвердого тела. Тогда только четыре степени свободы связаны с колебательным движением.

Для линейной молекулы следует различать продольные и поперечные колебания. В первом случае линейная форма сохраняется. Для трехатомной молекулы две степени свободы связаны с продольными колебаниями и две — с поперечными.

Для произвольной линейной молекулы из n атомов число колебаний, не нарушающих линейную конфигурацию, $n-1$. Тогда $3n-5-(n-1)=2n-4$ — число колебаний, выводящих атомы с прямой.

Найдем сначала частоты продольных колебаний. Пусть равновесное (устойчивое) положение молекулы совпадает с осью x . В равновесное положение атома бериллия поместим начало координат. Координаты атомов в порядке их расположения обозначим x_1, x_2, x_3 . Так как заведомо поступательное движение мо-

лекулы как твердого тела исключается, то центр инерции системы остается неподвижным и можно получить равенство

$$m_1(x_1 + x_3) + m_2x_2 = 0, \quad (4)$$

где m_1 — масса атома хлора, m_2 — масса атома бериллия.

Отсюда видно, что только две независимые координаты (пусть x_1 и x_3) описывают продольные колебания атомов. Предполагается, что взаимодействуют между собой только соседние атомы и сила взаимодействия пропорциональна расстоянию между ними. Тогда дифференциальные уравнения движения атомов хлора по оси x имеют вид:

$$m_1\ddot{x}_1 = -k(x_1 - x_2) \text{ и } m_3\ddot{x}_3 = -k(x_3 - x_2), \quad (5)$$

где k — параметр,

$$m_1 = m_3.$$

Перейдем к новым координатам, которые, как увидим, окажутся нормальными координатами,

$$x_s = x_1 - x_3 \text{ и } x_a = x_1 + x_3.$$

Действительно, получим два независимых уравнения движения гармонических колебаний. Исключив из (5) с помощью равенства (4) координату x_2 , получим:

$$m_1\ddot{x}_s = -kx_s; \quad (6)$$

$$m_1\ddot{x}_a = -k \frac{2m_1 + m_2}{m_2} x_a. \quad (7)$$

Собственные частоты колебаний

$$\omega_s = \sqrt{\frac{k}{m_1}}; \quad \omega_a = \sqrt{\frac{2m_1 + m_2}{m_1 m_2} k}. \quad (8)$$

Координата x_a отвечает антисимметричному колебанию (относительно середины молекулы; см. рис. 3, б). Координата x_s отвечает симметричному колебанию (рис. 3, в).

Если продольным колебаниям соответствуют две различные частоты, то поперечным колебаниям изгиба (рис. 3, г) отвечают две одинаковые частоты (дважды вырожденная частота), так как поперечные колебания могут происходить независимо в двух взаимно перпендикулярных плоскостях и соображения симметрии убеждают в вышесказанном.

Фундаментальное понятие, с которым знакомится студент в курсе теоретической механики и которое затем проходит красной нитью через все его физико-химическое образование, — это понятие о потенциальной энергии.

Начнем с примера о разрыве молекулы. Потенциал гармонического осциллятора имеет квадратичную форму. Для груза,

подвешенного на пружине и совершающего гармонические колебания, потенциальная энергия равна $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Атом, совершающий гармонические колебания в решетке кристалла вокруг узла решетки (равновесного положения), имеет потенциальную энергию $U = \frac{kx^2}{2}$ (одномерное движение). Потенциальная энергия в том и другом примерах отсчитывается от ее минимального значения (равного нулю) в положении статического равновесия.

Но если при каком-то удлинении пружины она обрывается, это означает, что потенциал такого осциллятора имеет несколько иной вид (модифицированный потенциал, допускающий процесс диссоциации). Аналитически его можно представить в виде

$$U = \begin{cases} \frac{c}{2} (r - r_0)^2 & r \leq r_0 + 2\delta; \\ C & r > r_0 + 2\delta. \end{cases} \quad (9)$$

Здесь постоянная $C = 2c\delta^2$, т. е. равна энергии разрыва связи, которая рассматривалась выше.

И для системы точек, например, трех атомов молекулы, совершающих продольные колебания, потенциальная энергия имеет вид квадратичной зависимости от координат

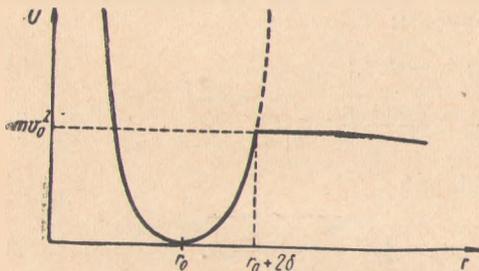


Рис. 4. Модифицированный потенциал гармонического осциллятора, допускающий разрыв

$$U = \frac{k}{2} [(x_1 - x_2)^2 + (x_3 - x_2)^2]. \quad (10)$$

Или в новых (нормальных) координатах

$$U = \frac{kM^2}{4m_2^2} x_a^2 + \frac{k}{4} x_s^2, \quad (11)$$

где M — масса всей системы (молекулы).

Функция Лагранжа соответственно равна:

$$L = \frac{m_1 M}{4m_2} \dot{x}_a^2 + \frac{m_1}{4} \dot{x}_s^2 - U. \quad (12)$$

Отклонение атома от узла решетки (груза от положения статического равновесия) приводит к возникновению силы, стремящейся вернуть материальную точку в устойчивое положение и равной $-\frac{dU}{dx}$ (рассматриваем малые колебания с одной сте-

пению свободы). Принятое выше квадратичное выражение для потенциальной энергии (потенциала) означает, что в разложении ее в ряд по степеням малых отклонений от равновесия ограничиваемся лишь первым квадратичным членом (линейный член в разложении отсутствует). Это и есть гармоническое приближение. Тогда уравнения движения точки получаются линейными.

Учет следующих членов разложения (ангармоническое приближение) позволил бы, например, ту же задачу о разрыве молекулы решить с лучшим приближением к действительным данным.

Рассмотрим теперь межмолекулярный потенциал для неполярных веществ (система материальных точек).

Выше описывались силы взаимодействия двух точечных электрически нейтральных молекул. Эти силы зависят только от величины расстояния между частицами. Тогда силу, действующую на одну частицу $\vec{F}(r)$ со стороны другой, можно выразить через потенциал $\Phi(r)$, т. е.

$$\vec{F}(r) = -\text{grad } \Phi(r)$$

или

$$\vec{F}(r) = -\frac{\Phi'(r)}{r} \vec{r}. \quad (13)$$

Для многих указанных систем справедлив так называемый потенциал Леннард—Джонса, и он имеет вид (см. также рис. 5)

$$\Phi(r) = 4\epsilon \left(\frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma^6}{r^6} \right). \quad (14)$$

Отсюда видно, что при $r > \sqrt[6]{2} \sigma$ возникают силы притяжения, так как $\Phi'(r) > 0$. Силы притяжения определяются вторым членом в выражении для потенциала. Силы притяжения обратно пропорциональны седьмой степени расстояния. Видно, что эти силы действуют эффективно на очень коротких расстояниях. Поэтому силы взаимодействия двух молекул короткодействующие (они называются еще вандерваальсовскими по имени известного физика-химика Ван-дер-Ваальса). На расстояниях $r \leq \sqrt[6]{2} \sigma$ становится существенным первый член в выражении для потенциала. Тогда $\Phi'(r) < 0$ и возникают силы отталкивания. Они становятся огромными (обратно пропорциональны 13-й степени). Практи-

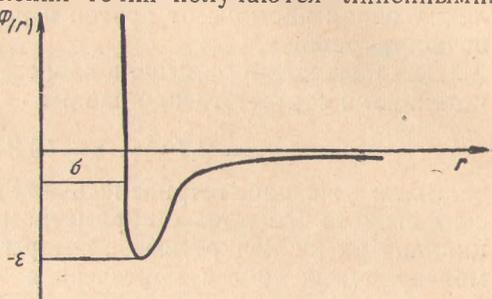


Рис. 5. Межмолекулярный потенциал Леннард-Джонса для молекул с центральным взаимодействием

чески сближение двух частиц на расстояние намного меньше σ становится невозможным; при этом как бы возникает непроницаемая стенка.

Параметр ε из (14) равен глубине потенциальной ямы, т. е. значению потенциала при $r = \sqrt[6]{2\sigma}$. Работа, необходимая для удаления одной частицы от другой с расстояния $r = \sqrt[6]{2\sigma}$ на бесконечность, равна ε .

Для приведенного выше в качестве примера неона параметры потенциала соответственно равны:

$$\sigma = 2,79 \text{ \AA}; \quad \varepsilon = 49,3 \cdot 10^{-16} \text{ эрг.}$$

Выше уже рассматривалось наличие связи физико-химических свойств вещества с параметрами межмолекулярного потенциала. Как на конкретные примеры можно указать, что у всех молекулярных систем критическая температура тем выше, чем больше ε . Сдвиговая вязкость вещества также пропорциональна глубине потенциальной ямы.

Для сравнения с короткодействующими силами укажем на кулоновские силы, называемые иначе дальнедействующими. Для последних потенциал обратно пропорционален первой степени расстояния (кулоновские силы взаимодействия двух ионов — электрически заряженных частиц — обратно пропорциональны второй степени расстояния и значительно медленнее спадают с удалением одного иона от другого).

Если учесть лишь парные взаимодействия, то потенциальная энергия всей системы

$$U = \sum_{i < j} \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \quad \left. \begin{array}{l} i = 1, 2, \dots, N-1; \\ j = 2, \dots, N, \end{array} \right\} \quad (15)$$

где r — радиус-вектор частицы.

Полная энергия системы (гамильтониан системы) равна сумме кинетической и потенциальной энергий, т. е.

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j} \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|). \quad (16)$$

Как происходит образование молекулы? Почему система атомов устойчива? Это — кардинальные вопросы теории химической связи. Без нее, как уже упоминалось, не обходится ныне курс органической химии. Хотя теория химической связи основана на квантовой механике, общий критерий устойчивого образования системы частиц (атомов) дает классическая механика. Это следует рассмотреть более подробно.

Поясним суть дела на примере двухатомной молекулы. Допустим, что с достаточно большого расстояния ($R \rightarrow \infty$) начинают

сближаться два атома водорода. При значительном удалении друг от друга их можно считать невзаимодействующими. Тогда энергия системы двух атомов равна $2E_1$ (E_1 — энергия отдельного изолированного атома).

При сближении атомов энергия системы $E \neq 2E_1$, и разность $\Delta E = E - 2E_1$ обусловлена взаимодействием атомов. Ясно, что ΔE является функцией расстояния R .

Теперь можно выдвинуть критерий, позволяющий выразить устойчивость или неустойчивость системы. Допустим, что ΔE

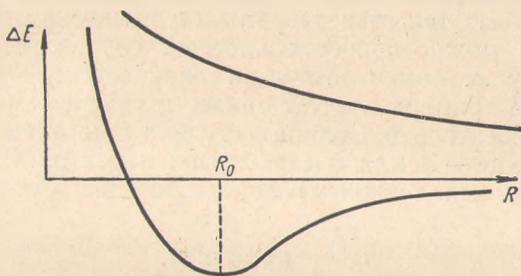


Рис. 6. Энергия химической связи для двухатомной молекулы

является монотонно убывающей функцией R (при $R \rightarrow \infty \Delta E \rightarrow 0$; рис. 6). Хотя непосредственное нахождение ΔE — задача квантовой механики, можно утверждать, исходя из представлений классической механики, что устойчивого образования при монотонном характере изменения $\Delta E(R)$ не происходит. Так как $d\Delta E/dR < 0$, то возникают силы отталкивания и молекула не может образоваться.

Иное происходит, если функция $\Delta E(R)$ не является монотонной и имеет вид нижней кривой (рис. 6). Тогда при $R < R_0$ возникают силы отталкивания, а при $R > R_0$ — силы притяжения. Только при таком характере зависимости ΔE от R возможно образование устойчивой конфигурации двухатомной молекулы. Укажем, что для молекулы водорода $R_0 = 0,7395 \text{ \AA}$ а $\Delta E(R_0) = 4,74 \text{ эв}$.

Фундаментальным разделом химической термодинамики является учение о термодинамическом равновесии. Но, как известно, условия термодинамического равновесия, как их сформулировал Гиббс (см., например, книгу И. Р. Кричевского «Понятия и основы термодинамики»), являются расширением принципа возможных перемещений. В курсе физической химии снова применяется классическая механика.

Эти примеры можно еще продолжить. Укажем лишь в связи с запросами термодинамики необходимость введения понятий обобщенных координат и обобщенных сил.

Как известно, одна из важных задач курса механики состоит в том, чтобы раскрыть студенту смысл интегралов движения (законов сохранения). В этом заключается важный этап подготовки к дальнейшему освоению начал квантовой механики. Тогда изучение квантовой механики не будет искусственным, как это непременно случится, если не воспользоваться указанием на соответствие классической механике и их различие.

При весьма ограниченном объеме времени ознакомление с понятиями интегралов движения (законов сохранения) можно начинать с конкретных примеров движения материальной точки. Так, после доказательства теоремы об изменении момента импульса точки можно привести частный случай, когда момент силы равен нулю. Момент импульса сохраняется.

В качестве примера следует привести задачу Кеплера. Земля движется относительно Солнца (студент уже знает, что центр инерции Солнце — Земля очень близок к центру Солнца и его можно считать неподвижным). На землю действует центральная сила. Итак,

$$\vec{l}_0 = [\vec{r} \vec{p}] = \text{const.}$$

Из этого следует, что траектория движения Земли относительно Солнца — плоская кривая. Это же относится к системе Земля — Спутник. Затем из выражения для момента импульса получим, что

$$vr \sin \alpha = \text{const.},$$

где r — модуль радиуса-вектора, направленного от Солнца к Земле, v — модуль скорости земли, $\alpha = (\vec{r}, \vec{v})$.

В различных точках траектории различны все три величины r , v , $\sin \alpha$, но их произведение постоянное. Получена функция трех переменных, сохраняющая при движении точки свое значение. Это и есть интеграл движения, который получен в результате интегрирования дифференциального уравнения движения точки.

Применение теоремы об изменении кинетической энергии на примере движения точки в постоянном потенциальном поле дает возможность получить закон сохранения энергии, как иллюстрирует пример: где бы ни был спутник в поле тяжести Земли, сумма его кинетической и потенциальной энергий сохраняется. Получен еще один интеграл движения.

Итак, студент понимает, что у спутника, как материальной точки, импульс не сохраняется, но зато неизменен вектор момента импульса и полная энергия (четыре интеграла движения).

Когда студент-химик начинает изучать теоретическую механику, он уже «наслышался» о квантовых числах. Известно, что в модели Бора электрон вращается по орбите вокруг ядра (допустим, один электрон атома водорода) и его движение характери-

зуется главным квантовым числом n , орбитальным (побочным) квантовым числом l , магнитным квантовым числом m . Но студент не подозревает их «классическое происхождение» и не представляет, что квантовые числа — это интегралы движения. И вот, затратив совсем немного времени, лектор курса теоретической механики может (и должен) оказать студенту в этом неоценимую помощь, объяснив суть.

Что общего и различного между движением спутника и электрона? Обе материальные точки находятся в потенциальном поле и на них действуют центральные силы. Спутнику, задавая те или иные начальные условия, можно придать любое значение полной энергии $E = T + U$ (он может двигаться по любому эллипсу). Электрон, двигаясь также по эллипсу, сохраняет полную энергию E . Но значения E не могут быть любыми. Допускаемым значениям полной энергии (в соответствии с законами квантовой механики) соответствует набор целых чисел $n = 0, 1, 2, \dots$. Эти числа и называются главными квантовыми числами. Движение электрона, в отличие от движения спутника, квантуется. Набор возможных значений полной энергии будет дискретным ($E_0, E_1, \dots, E_n, \dots$), в отличие от непрерывного энергетического спектра спутника.

По современным представлениям квантовой механики электрон не отождествляется с материальной точкой, однако полная энергия его является интегралом движения.

Теперь опять рассмотрим момент импульса. У спутника при соответствующем выборе начальных условий он может принять любое значение по модулю и направлению. На данной траектории, как уже отмечалось, то и другое сохраняется. Спутник можно запустить по эллипсу с любыми параметрами, и наклон эллипса к какому-то избранному направлению (допустим, к вертикали) может быть любым.

У электрона момент импульса и его проекция на вертикаль сохраняются, но принимают уже не непрерывные значения, а дискретные. Электрон не может перейти с данного эллипса на любой другой. И наклон эллипса не может быть произвольным.

Модуль момента импульса l принимает только избранные значения (в безразмерных единицах все целые положительные числа, включая нуль; l и есть орбитальное квантовое число). Проекция момента импульса на вертикаль l_z (эту проекцию обозначают также m и называют магнитным квантовым числом) принимает дискретные значения $l, l - 1, \dots, -l$. Это означает, что плоскость траектории с моментом импульса l , перпендикулярным к этой плоскости, не может иметь произвольный наклон к вертикали.

Можно дать классическую интерпретацию и квантовому числу — спину.

Если учесть собственное вращение спутника, то он обладает собственным кинетическим моментом. По величине и направлению он может быть произвольным.

Электрон также обладает собственным кинетическим моментом (спином). Но его величина и направление не могут быть произвольными. Дискретные значения у проекции кинетического момента на избранное вертикальное направление (проекция спина имеет два значения $\pm \frac{1}{2}h$). Постоянная Планка h имеет размерность момента импульса.

Программа курса физической химии, утвержденная в 1967 г. для высших учебных заведений по химико-технологическим специальностям, включает основы статистической термодинамики. Этот новый раздел программы заслуживает полной поддержки. В программе говорится: «Статистическая сумма состояний... Вычисление поступательной, вращательной и колебательной сумм состояния...».

Требования программы не могут быть качественно реализованы без знаний курса классической механики, в котором имеются основополагающие сведения для построения основных понятий статистической механики. Для построения статистической суммы требуется знание гамильтониана системы.

Гамильтониан системы представляет мгновенное значение ее полной энергии. Допустим, рассматривается двухатомная молекула (движением электронов в атомах пренебрегаем). Простейшей моделью двухатомной молекулы будет сочетание жесткого ротатора и гармонического вибратора. Модель так и называют «жесткий ротатор — гармонический вибратор». В первом приближении это означает, что колебательные и вращательные движения молекулы считаются независимыми друг от друга, т. е. полная энергия системы E является аддитивной величиной

$$E = E_{\text{кол}} + E_{\text{вращ.}} \quad (17)$$

Под жестким ротатором понимается вращение молекулы в целом. Момент инерции относительно оси, проходящей через центр инерции и перпендикулярной линии, соединяющей атомы (материальные точки),

$$J = \mu r^2; \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (18)$$

где μ — приведенная масса молекулы; r — расстояние между атомами (точнее — ядрами атомов).

В классической механике кинетическая энергия ротатора имеет вид:

$$T = \frac{L^2}{2J}. \quad (19)$$

Здесь $L=2\pi J\nu$ — кинетический момент ротатора, ν — частота (циклическая частота $\omega=2\pi\nu$).

Вращательная энергия ротатора, согласно квантовой механике, пробегает дискретные значения и равна

$$E_{\text{вр}} = \frac{h^2 j(j+1)}{8\pi^2 J}, \quad (20)$$

где J — момент инерции молекулы относительно ее центра инерции.

Квантовое число j , называемое соответственно вращательным квантовым числом, принимает значения 0, 1, 2, ... Оно определяет кинетический момент молекулы, равный

$$\frac{h}{2\pi} \sqrt{j(j+1)} \simeq \frac{h}{2\pi} j. \quad (21)$$

Так как постоянная Планка h имеет размерность момента импульса (кинетического момента), то аналогия между (19) и (20) очевидна.

Согласно оценкам вращательная энергия молекулы составляет примерно одну сотую часть энергии колебаний ядер. Это означает, что вращательное движение является более медленным по сравнению с колебательным движением ядер. Приближение (17) оправдывается.

Механическое описание колебаний атомов в двухатомной молекуле сводится к решению задачи о движении одной материальной точки с приведенной массой μ . В гармоническом приближении, когда предполагается, что сила, возвращающая ядра атомов в их положение равновесия, пропорциональна смещению, частота колебаний ν (в физико-химической литературе реже пользуются циклической частотой $\omega=2\pi\nu$) равна:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \quad (22)$$

где k — силовой параметр, введенный уже выше [см. уравнение (5)].

Для гармонического осциллятора в квантовой механике дискретные значения энергии определяются в виде

$$E_{\text{кол}} = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (23)$$

Дальнейшего уточнения теории можно достигнуть на модели «жесткий ротатор — ангармонический вибратор». При учете ангармоничности колебаний, как уже указывалось, для выражения потенциальной энергии наряду с квадратичным учитывается и кубический член, т. е.

$$U = k(r - r_0)^2 - d(r - r_0)^3, \quad (24)$$

где r_0 — равновесное расстояние между ядрами. Постоянная d , учитывающая ангармоничность, намного меньше k .

Интерес представляет и модель «нежесткий ротатор — ангармонический вибратор». Сейчас предполагается ротатор с изменяющимся расстоянием (изменяется момент инерции молекулы).

Во введении к программе по механике обычно указывается: «Механика как научная база современной техники», однако ее значение для химических наук не всегда отмечается. Программа не должна обеднять и суживать назначение теоретической механики. Она подготавливает студента как к изучению традиционных инженерных дисциплин, так и к усвоению химических наук. Это необходимо учитывать при составлении программ по теоретической механике для химиков.

В современной программе по теоретической механике для химиков рассматривается приведение системы сил к данному центру, но нет упоминания о межмолекулярном потенциале. В ней также рекомендуется изучать «аналитические равенства, определяющие главный вектор и главный момент сил», или «теорему о проекции скоростей точек фигуры на прямую, проходящую через эти точки», но не рекомендуется рассматривать закон сохранения энергии, понятие о диссипации энергии.

Опыт, накопленный в Белорусском технологическом институте им. Кирова, показывает, что интерес к изучаемой дисциплине значительно возрастает, если студент ощущает непосредственную связь механики с химией. Методически оправданное определение доли «микроскопического» и «макроскопического» в отведенном объеме курса является неотложной и важной задачей. Решить ее вполне возможно в самые кратчайшие сроки.

Имеющаяся для технических вузов учебная литература иллюстрирует общие законы механики на макроскопических объектах. В то же время крайне необходимо показать студенту-химику применимость механики к микроскопическому миру.

Такие понятия, как силы взаимодействия частиц, межмолекулярный потенциал, молекула как твердое тело, моменты инерции молекул, колебания молекул, полная энергия молекулярной системы, должны быть непременно включены в программу классической механики даже при сохранении объема часов, отводимых на курс.

Специфическая особенность курса классической механики для химических специальностей не ограничивается только связью с общими химическими дисциплинами.

Во всех химико-технологических вузах видное место занимает курс «Процессы и аппараты химической технологии». Он основан на элементах механики сплошных сред. В связи с химией высокомолекулярных соединений все шире входит в вузовские программы курс ньютоновской механики.

Базовой дисциплиной для всех этих курсов является теоретическая механика.

Уже первый раздел «Гидромеханические процессы» курса «Процессы и аппараты» основан на законах сохранения. К пониманию их смысла студент должен быть подготовлен по курсу теоретической механики. То же относится и к разделу «Массообменные процессы» (основы массопереноса). Здесь от студента потребуется понимание языка дифференциальных уравнений — языка теоретической механики.

Но не только в связи с механикой сплошных сред курс «Процессы и аппараты» и еще в большей мере курс «Машины и аппараты», который читается иногда в виде специального курса, например, «Оборудование заводов неорганических веществ», требуют знаний основ теоретической механики.

Большое внимание в указанных курсах уделяется расчету потребных мощностей для различных технологических процессов. Вот, например, программа расчета автоматической фильтрующей центрифуги. В ней явно выражены динамические задачи: подсчет работы, затрачиваемой на сообщение кинетической энергии обрабатываемой суспензии, работ, затрачиваемых на преодоление трения в подшипниках и на срез осадка (центрифуга с ножевым съемом осадка). По ходу расчета затрагиваются вопросы динамической неуравновешенности вращающихся масс (возникают значительные динамические реакции в подшипниках). Неуравновешенность вызывается неравномерным распределением осадка. Безусловно, важная и далеко не простая динамическая задача. Для ее решения студенту предлагается воспользоваться понятием условного эксцентриситета вращающихся масс и по готовой формуле подсчитать динамическую нагрузку.

Но если применять формулы, не зная их происхождения, т. е. заранее не изучив их в курсе теоретической механики, нельзя в нужной мере понять суть задачи курса его прямой специализации.

Подобных примеров немало. Можно было указать и на расчет типовых мешалок. Студент должен быть подготовлен и к расчету на основе знаний теории колебаний вибротельницы, барабанных качающихся и вибрационных грохотов и многого другого.

Связи теоретической механики со всеми учебными дисциплинами химико-технологических факультетов самые непосредственные. Но, к сожалению, нередко эти связи получаются зауженными, неполными. В действительности практика требует, чтобы эти связи как можно глубже и конкретнее выявлялись, отвечая тем самым сути программированного обучения.

Зауженный, односторонний взгляд на теоретическую механику в инженерно-химическом образовании неизбежно приводит к отрицательным выводам и рекомендациям. Именно этим сле-

дует объяснить бытующую недооценку раздела «Динамика». Такой подход вызывает решительное возражение.

Перед преподавателем, ведущим курс теоретической механики на химико-технологических факультетах, открыты большие возможности. От того, как они будут использованы, зависит очень многое. Своей повседневной практической деятельностью преподаватель утверждает предназначение механики в общем плане инженерно-химического образования. Все должно подтверждать, что «Механика описывает в совершенном согласии с опытом процессы движения звезд... и движение ультрамикроскопических частиц... она сохраняет свое значение для части наших опытов, касающихся движения молекул, атомов... Поэтому она стала основой кинетической теории газов и физической статистики Больцмана — Гиббса. Так механика превратилась в храм величественной архитектоники и поразительной красоты» (см. М. Л а у э. История физики. ГИТТЛ, 1956).