

მოლეკულათაშორისი ძალები: თერმოდინამიკური და სტატისტიკური ასპექტები

გია დაღელაშვილი

ელ. ფოსტა: gia.daghelashvili111@ens.tsu.edu.ge

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, ქიმიის დეპარტამენტი, ილია ჭავჭავაძის გამზირი 3. თბილისი, საქართველო.

მოლეკულათაშორისი ძალები საკვანძო როლს ასრულებს მოლეკულური სისტემების ქცევის განსაზღვრაში, რაც გავლენას ახდენს მოლეკულური სისტემების როგორც თერმოდინამიკურ თვისებებზე, ასევე სტატისტიკურ განაწილებებზე. ეს ნაშრომი განიხილავს თერმოდინამიკისა და სტატისტიკური მექანიკის ფარგლებში ამ ძალების აღწერის მექანიზმებს და სიღრმისეულ წარმოდგენას გვაძლევს მათ მნიშვნელობაზე, როგორც წონასწორულ, ასევე დინამიკურ სისტემებში.

ნაშრომი იწყება მოლეკულური ურთიერთქმედებების ანალიზით თავისუფალ სივრცეში და გარემოში, რაც ხაზს უსვამს თვითენერჯისა და გაწყვილების პოტენციალების წვლილს მოლეკულურ ქცევაში. შემოტანილია ბოლცმანის განაწილება და ქიმიური პოტენციალი როგორც ძირითადი ინსტრუმენტები, რომლებიც აკავშირებს მიკროსკოპულ ურთიერთქმედებებს მაკროსკოპულ თერმოდინამიკურ თვისებებთან და გვთავაზობს მოლეკულური მდგომარეობების სტატისტიკურ ხედვას.

წარმოდგენილია მოლეკულათაშორისი ძალების და წყვილი პოტენციალების სისტემური კლასიფიკაცია, რაც განასხვავებს ახლო და შორეულ ურთიერთქმედებებს. თეორიული მოსაზრებები გავრცობილია მრავალმოლეკულურ სისტემებზე. გამოთვლითი ტექნიკა, როგორცაა მონტე კარლოს (MC) მეთოდი და მოლეკულური დინამიკის (MD) მოდელირება, წარმოდგენილია როგორც საიმედო მეთოდები რთული ურთიერთქმედებების ანალიზისთვის.

ორი სხეულის შეჯახების ასახსნელად გამოყენებულია ნიუტონის კანონები, ისინი მიესადაგა მრავალჯერადი შეჯახების პროცესების კინეტიკურ და სტატისტიკურ ასპექტებს, ამასთან ენერჯის გადანაწილება შეჯახების პროცესებში ისევ ბოლცმანის განაწილებით აიხსნა.

ნაშრომში აქცენტირებულია თერმოდინამიკისა და სტატისტიკური მექანიკის რთული ურთიერთდამოკიდებულება მოლეკულათაშორისი ძალების ახსნისთვის. მკაფიოდაა ნაჩვენები, თუ რამდენად მნიშვნელოვანია მიკროსკოპულ ურთიერთქმედებებსა და მაკროსკოპულ მოვლენებს შორის კავშირის დამყარება მოლეკულური სისტემების ღრმად გასაგებად [1].

ლიტერატურა:

[1] Jacob N. Israelachvili, (2011), Intermolecular and Surface Forces, UNIVERSITY OF CALIFORNIA SANTA BARBARA, CALIFORNIA, USA. 23-51.