

MEĐUMOLEKULSKE POTENCIJALNE FUNKCIJE

Da bismo kvalitativno opisali međudejstvo realnih molekula, posmatraćemo izdvojeni molekulski par i pratiti promenu potencijalne energije sa rastojanjem. Međumolekulska interakcija je složena i može se aproksimirati različitim modelima, koji u manjoj ili većoj meri odgovaraju konkretnim eksperimentalnim uslovima. Najveću primenu ima Lenard-Džonsov potencijal:

$$V(r) = 4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right) \quad (1)$$

Parametri Lenard-Džonsovog potencijala za neke sisteme su dati u tabeli:

Molekul/Atom	σ [Å]	ε/k [K]
He	2.63	6.03
Ne	2.74	35.70
Kr	3.61	190.00
Xe	4.05	230.00
H ₂	2.92	37.02
N ₂	3.72	94.50
O ₂	3.58	117.50
CH ₄	3.82	148.00

Uočite da je u tabeli data vrednost ε/k , pa se njenim korišćenjem zapravo dobija potencijal podeljen Bolcmanov konstantom.

Za određeni međumolekulski potencijal, pomoću statističke mehanike možemo dobiti drugi virijalni koeficijent. Koristeći Lenard-Džonsov potencijal dobijamo:

$$B(T) = 2\pi N_A \int_0^{\infty} \left(1 - e^{-\frac{V(r)}{kT}}\right) r^2 dr \quad (2)$$

ZADATAK

- Izabrati jedan molekul/atom i sa njim povezane parametre za Lenard-Džonsov potencijal. Nacrtati grafik Lenard-Džonsovog potencijala u programu **Matlab**.
- Numeričkom integracijom izračunati drugi virijalni koeficijent $B(T)$ za sledeće temperature: 273, 350, 400, 500, 700 K.
- Nacrtati grafik zavisnosti $B(T)$ od T .
- Prodiskutovati rezultate.
- Da li plemeniti gasovi mogu da grade dimere u osnovnom elektronskom stanju? Zašto?