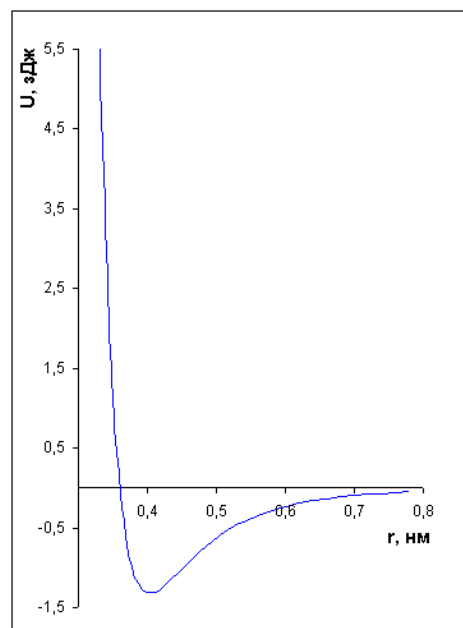


8. Межмолекулярные взаимодействия (12 баллов)

При моделировании свойств наночастиц, необходимо уметь рассчитывать силы, действующие на наномасштабах. Для этих целей широко используются парные потенциалы, описывающие взаимодействие двух незаряженных атомов или молекул. Такие потенциалы можно описать следующим уравнением:

$$U(r) = -\frac{A}{r^x} + \frac{B}{r^y} \quad (1)$$

где r – расстояние между молекулами, x и y – натуральные числа, а A и $B > 0$.



1. В таблице приведены расчетные значения $U(r)$ для некоторого вещества. Используя эти данные, найдите значения степеней x , y и коэффициентов A , B в уравнении (1), применив при этом только ручку, бумагу, линейку и калькулятор. (5,5 баллов)

r , нм	0,32	0,34	0,35	0,37	0,68	0,70	0,72	0,74
U , зДж	10,9	3,01	1,14	-0,676	-0,113	-0,095	-0,081	-0,069

(1 зДж = 10^{-12} нДж = 10^{-21} Дж)

2. На каком расстоянии r_u энергия $U(r)$ минимальна? (2 балла)

3. Сила межмолекулярного притяжения равна $F(r) = U'(r) = \frac{dU}{dr}$. На каком расстоянии r_f

сила притяжения $F(r)$ максимальна? (2 балла)

4. Запишите $U(r_u)$ и $F(r_f)$ через коэффициенты A и B . Рассчитайте значения $U(r_u)$ и $F(r_f)$. (2,5 балла)