

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық Университеті

Оңғарбаев Е.Қ., Төрешева Г.О.

МАТЕРИАЛТАНУ

Оқу құралы

Алматы  
«Қазақ университеті»  
2011  
**КІРІСПЕ**

## **Материалтану. Пәнді оқыту мақсаты**

Қазіргі таңдағы технологияның дамуы мен жүзеге асуы жаңа материалдардың алынуы мен енуінсіз мүмкін емес. Техникалық материалдардың құрылысы мен қасиеттері туралы ғылым материалтану деп аталады. Оның міндеті материалдардың құрамы, құрылымы және қасиеттері арасындағы байланысты анықтау болып табылады.

Материалтанудың ғылыми және техникалық маңызы.

Қазіргі таңда жоғары температураларда жұмыс жасайтын материалдар дайындауға көп көңіл бөлінуде. Келесі бағыттар жүзеге асырылуы тиіс:

1. Құрылымы реттелген интерметалдық құймалар алу.
2. Қыш арнайы материалдар алу. Қыш қыздырғанда ақпайды және металдар сияқты кішкентай ақаулар мен жарықшақтарды бітей алмайды. Сондықтан ақаулары өте аз қыш материалдар алу міндеті жолға қойылуда.
3. Қатты денелер негізінде композициялық материалдар алу.

Үш бағыт та қатты дене физикасы мен химиясының зерттеу нысаны - қатты дене құрамы мен құрылымындағы ақаулардың қасиеттерін зерттеуге негізделген.

Жаңа энергия көздерін іздеу және жүзеге асыру болашағы зор міндеттердің бірі. Оларға ең алдымен ядролық энергия және жартылай өткізгіштердің көмегімен күн энергиясын түрлендіру жатады. Ядролық энергияны пайдалану ядролық реакторлардың жеткілікті сенімді еместігімен (Чернобыль, Қазақстан) және радиобелсенді қалдықтарды көму мәселерімен (Қазатомпром) де байланысты. Бұл радиацияға төзімді және кез келген бұзушы әсерге тұрақты ұзаққа шыдайтын материалдарды қажет етеді.

Жартылай өткізгіш материалдар көмегімен күн энергиясын тікелей түрлендірудің маңызы зор. Бірақ бүгінде күнді түрлендірушілер үшін жартылай өткізгіш материалдардың ПӘК төмен, мысалы Si үшін 11-16%; GaAg - 22-28%. Жартылай өткізгіш материалдар қымбат. Олар химиялық қоспалардан терең таза болуды, кристалдық құрылымы жетілген монокристалдар өндірісін талап етеді. Аморфты кремнийден жасалған күн батареялары жартылай өткізгіш түрлендіргіштер көмегімен электр энергиясын өндіру құнын 100 есе төмендетті.

Сонымен ПӘК-ті жоғарылату және энергияның жаңа көздерін пайдалану белгілі материалдарды жетілдіру және жаңа материалдар алумен анықталады. Осылайша, жаңа материалдар алу ең қажет іс. Материалдардың қасиеттерін қалыптастыру үшін қарапайым қыздырудан басқа радиациямен, лазермен әсер ету керек, затты магнитпен өндеу қажет, аса жоғары қысымдар пайдалану керек. Бұл бағыттағы жұмыстар енді ғана басталуда. Олардың дамуына қатты денелердегі физикалық және химиялық құбылыстарды терең зерттеу мүмкіндік береді.

## **1-бөлім. ХИМИЯ, ФИЗИКА ЖӘНЕ ФИЗИКАЛЫҚ ХИМИЯДАН КЕЙБІР МӘЛІМЕТТЕР**

## 1.1. Негізгі химиялық түсініктер

Химия қандай да бір агрегаттық күйдегі әртекті химиялық заттардың жиынтығын зерттейді. Қоршаған ортадан ойша бөлініп алынған және оқшау түрде қарастырылатын әрбір осындай жиынтық химиялық жүйе деп аталады. Химиялық жүйені құрайтын заттар химиялық компоненттер деп аталады. Жүйелер бір немесе көп компонентті болуы мүмкін. Әрбір компонент қандай да бір агрегаттық күйде (газтәрізді, сұйық, қатты) бола алады, оны химия және материалтануда фаза деп атайды.

Мысал ретінде бір ғана компонент суды алайық. Оның бір күйден екінші күйге ауысуы химиялық құрамын өзгертпейді. Сондықтан ол бір компонентті жүйеге жатады. Бірақ үш агрегаттық күйден тұратын жүйе үш фазалы болып табылады.

Бір ғана фазадан тұратын жүйе толық біртекті болады және гомогенді деп аталады. Бірден артық фазалардан тұратын жүйе – гетерогенді. Фазаның мұндай анықтамасы толық емес. Себебі, ол тек агрегатты мағынадағы фаза түсінігін бейнелейді. Бірақ қатты дененің бір үлгісінде, мысалы мыс пен мырыштың құймасында таза мыс, таза мырыш және нағыз CuZn құймасының учаскелері болуы мүмкін. Үш компонент те қатты фазаға жатады, бірақ әрқайсысының өз химиялық құрамы, кристалды құрылымы және физикалық қасиеттері бар. Сондықтан біз Cu, Zn және жез (CuZn) фазалары бар деп айтамыз.

Сонымен фаза дегеніміз – жүйедегі басқа бөліктерден бөліну беті арқылы бөлінген барлық гомогенді бөліктердің жиынтығы. Бұл бөліну беті арқылы ауысқанда химиялық құрам немесе құрылым және қасиеттер секірмелі түрде өзгереді.

Құрамы ауыспалы фазалар – ерітінділер. Олар барлық үш агрегатты күйде – газтәрізді, сұйық және қатты күйлерде түзіле алады.

Белгілі бір тұрақты құрамы бар ерітінділер – химиялық қосылыстар.

Кейбір жүйелер бір немесе одан көп фазалардың механикалық қоспасы болып табылады. Мұндай қоспаларды әртүрлі жолдармен алады:

- 1) белгілі бір құрамы бар сұйық фазадан кристалдану арқылы алынатын қоспалар – эвтектикалар;
- 2) қатты фазалардың араласуы арқылы алынатын қоспа – эвтектоидтар;
- 3) сұйық фазадан кристалданған бір фаза қалған сұйықтықпен әрекеттескенде басқа фаза кристалданады. Алынатын қатты қоспа – перитектика.

Кез келген жүйеде және жүйелер арасында өзгерістер өтеді. Бұл кезде фазалардың химиялық құрамы өзгереді немесе өзгермейді. Құрам өзгеру арқылы өтетін түрлендірулер химиялық реакциялар, ал құрам өзгермей өтетін түрлендірулер – фазалық айналулар деп аталады. Химиялық реакцияны сипаттайтын сандық көрсеткіш – оның жылдамдығы.

Сандық түрде химиялық реакцияның жылдамдығы  $v = \frac{\Delta C}{\Delta t}$  түрінде жазылады, яғни реакцияға қатысатын заттың бірінің концентрациясының

уақыт бірлігінде өзгеруі. Концентрация  $C = \frac{n}{V}$ , мұндағы  $n$  – заттың моль саны,  $V$  - жүйенің көлемі.

Гомогенді жүйелерде химиялық реакция жүйенің бүкіл көлемінде жүреді, ал гетерогенді жүйелерде – жүйені құрайтын фазалардың бөліну бетінде ғана жүреді.

Бөлшектер (атомдар, иондар, молекулалар) арасында химиялық реакцияның жүруіне қажет физикалық шарт – олардың кездесуі немесе соқтығысуы. Бөлшектер соқтығысқанда ғана электрондар алмасады және атомдар (иондар) қайта топтасады, демек химиялық реакция жүреді.

Әрекеттесуші заттардың бөлшектерінің соқтығысуы көбейген сайын, реакция жылдамдығы да жоғарылайды. Соқтығысулар саны әрбір бастапқы заттың концентрациясы өскен сайын өседі.

$A + B \rightarrow C$  типті химиялық реакцияның жылдамдығын  $v = k [A]^a [B]^b$  түрінде жазуға болады, мұндағы  $[A]$ ,  $[B]$  – концентрация, ал  $k$  – жылдамдық константасы.

Гомогенді жүйеде өтетін реакция жылдамдықтарының әрекеттесуші заттардың молярлық концентрацияларының көбейтіндісіне пропорционалдығын 1867 ж. К.М.Гульдберг пен П.Вааге және тәуелсіз Н.Н.Бекетов анықтаған, ол әсерлесуші массалар заңы деп аталады.

Реакцияны  $aA + bB \rightleftharpoons dD + eE$  түрінде жазайық, яғни мұнда тура реакциямен қатар кері реакция бар. Әсерлесуші массалар заңы бойынша тура  $v_1$  және кері  $v_2$  реакциялардың жылдамдықтары  $v_1 = k_1 [A]^a [B]^b$ ;  $v_2 = k_2 [D]^d [E]^e$ .

Жылдамдық константалары  $k_1$  және  $k_2$  әрекеттесуші заттардың табиғатына, температураға және басқа да факторларға тәуелді, бірақ реакция компоненттерінің концентрацияларына тәуелді емес.

1.1- суретте  $v_1$  және  $v_2$  - нің уақытқа тәуелділігі бейнеленген.



1.1 -сурет. Тура  $v_1$  және кері реакция  $v_2$  жылдамдықтарының уақытқа тәуелділігі

Процесс басында  $v_1$  максимал, бірақ уақыт өткен сайын  $A$  және  $B$  концентрациялары  $D$  мен  $E$  ауысқан сайын  $v_1$  кемиді де азаяды.  $v_2$ , керісінше, көбейеді. Қандайда бір  $t_c$  уақытта  $v_1 = v_2$  тепе-теңдігі орнайды. Реакция тоқтамайды, бірақ уақыт бірлігінде әрбір заттың қанша молекуласы түзілсе, соншасы жұмсалады. Тепе-теңдік жағдайында  $k_1/k_2 =$

$$\frac{[D]^d [E]^e}{[A]^a [B]^b} = K_c$$

$K_c$ - химиялық тепе-теңдік константасы. Осылайша тепе-теңдік константасы – тура және кері химиялық реакциялардың жылдамдық константаларының қатынасы. Тұрақты температурада  $K_c$  да тұрақты. Химиялық реакцияның жүруінің қажет шарты – бөлшектердің соқтығысуы, бірақ соқтығысатын бөлшектердің энергиялары бастапқы заттардың атомдары арасындағы химиялық байланысты үзуге жеткілікті болу керек, әйтпесе соқтығысу болады, бірақ химиялық айналу жүзеге аспайды.

Соқтығысуы жаңа заттың түзілуіне алып келетіндей бөлшектердің артық энергиясы осы процестің (реакцияның) активтену энергиясы деп аталады.

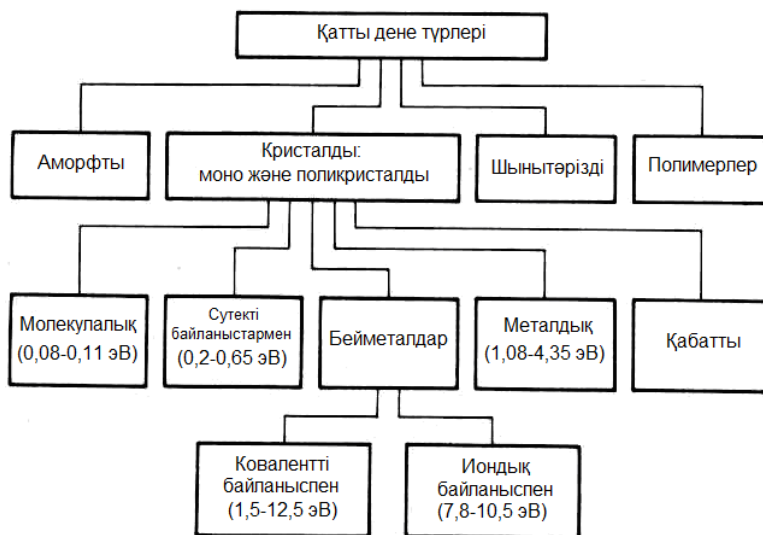
Химиялық реакцияны сипаттау үшін оның ретін білу керек. Бір уақытта әрекеттесуге түсетін молекула түрлерінің саны реакция ретін анықтайды: 1-рет – бір түрлі молекулалар, 2-рет – екі түрлі молекулалар. Мұндай реакциялар дәлірек моно-, бимолекулалы-, үшмолекулалы деп аталады.

Үшмолекулалы немесе одан да күрделі реакциялар өте сирек жүреді.

## 1.2. Қатты денелердің жіктелуі

«Қатты» ұғымы заттың бізге белгілі төрт агрегаттық күйлерінің: газтәрізді (бу тәрізді), сұйық, қатты және плазмалық күйдің біріне қатысты айтылады. Алғашқы үшеуі үшін заттың пішіні мен көлемінің өзгерістері тән. «Қатты» ұғымына жиі ғылыми емес, тұрмыстық мағына береді. Мысалы, қатқан шайырды қатты денелерге жатқызады, шын мәнінде ол – аса сұйық және құрылымы бойынша қаттыға емес, сұйыққа жақын.

Тұрмыстық жіктеуге сәйкес қатты денелерге моно- және поликристалдармен қатар аморфты және шынытәрізді заттар, сондай-ақ полимерлер жатады (1.2-сурет).

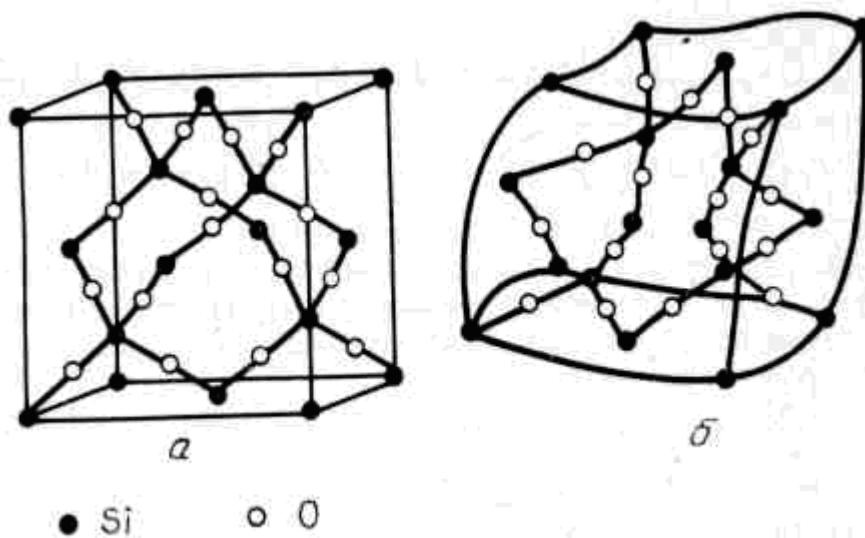


1.2-сурет. Қатты денелердің түрлері. Жақшаның ішінде – байланыс энергиясы.

Аморфты денелерде атомдардың орналасуы толық реттелмеген. Бұл шынытәрізді қатты денелерге де тән. Егер  $SiO_2$  балқытып, баяу суытса, онда

кристаллит кристалдары алынады, егер балқыманы тез суытса, онда силикат шынысы алынады. Әрбір екі кремний атомдарының арасында оттектің атомы орналасады. Әрқайсысында алты кремний атомы бар үш сақина төрт кремний атомы бар екі және сегіз кремний атомы бар бір сақинаға айналады. Кристалда қатты дененің берілген фрагментінің құрылымы қатаң екенін көреміз. Мұндай фрагмент қарапайым кристалл ұяшық деп аталады (1.3-сурет).

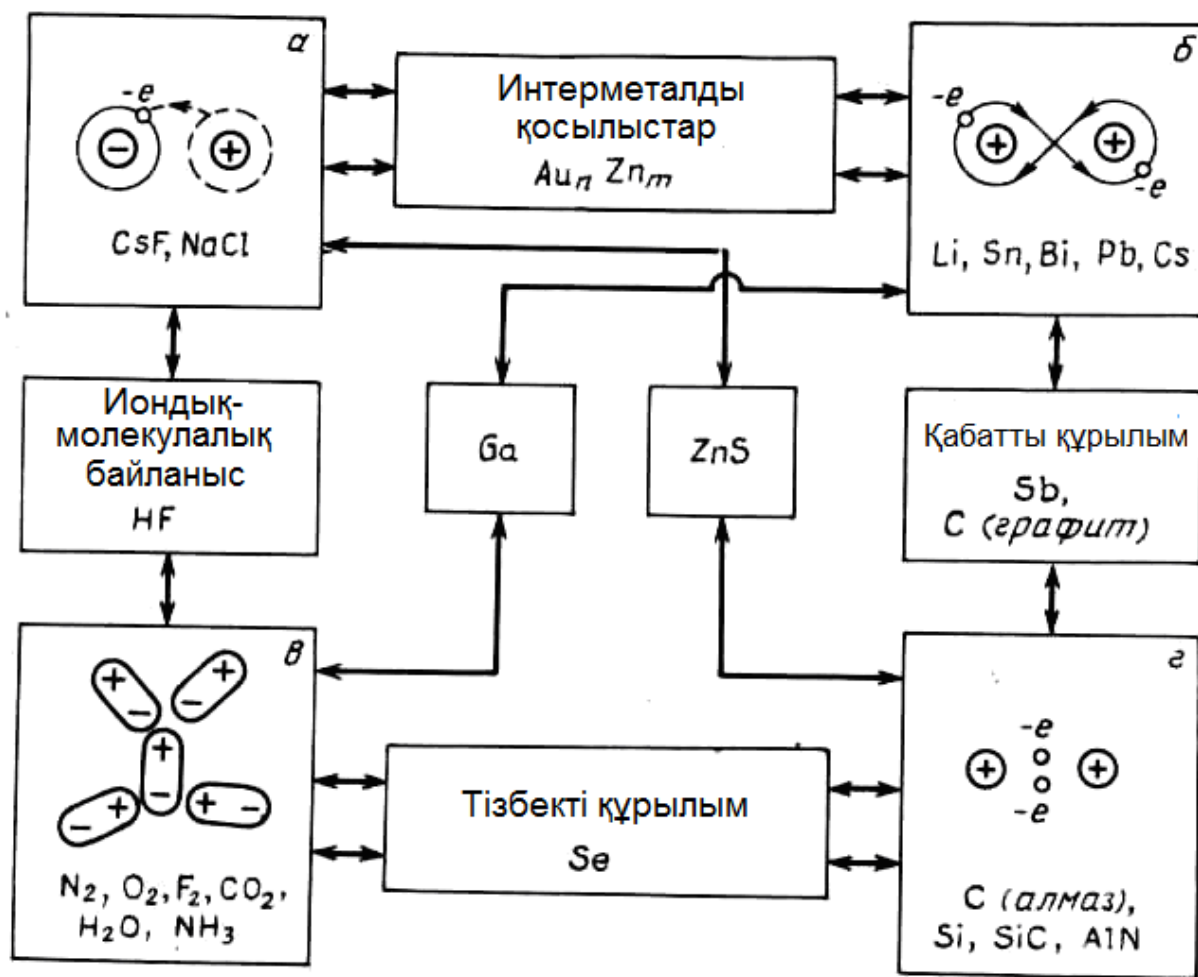
Полимерлер – ұзындығы және молекулалық массасы әртүрлі көптеген молекулалардан тұратын органикалық қатты заттар. Поликристалдар – жеке, жиі өте ұсақ кристалдардың атомаралық және молекуларалық күштерімен біріккен біртұтас қатты денелер. Жеке кристалдар – дәндер әртүрлі бағытталады. Монокристалдар – ешқандай бөліну шекаралары жоқ жеке кристалдар. Монокристалдарға әртүрлі бағыттарда қасиеттерінің анизотропиясы (бірдей еместігі) тән. Бұл векторлық қасиеттерге: электр-және жылу өткізгіштік, жылулық ұлғаю, механикалық беріктік, еру жылдамдығы және т.б. қатысты. Кейбір скаляр қасиеттер (мысалы, жылу сыйымдылығы, тығыздық) бағытқа тәуелсіз. Поликристалдарда жеке дәндердің әртүрлі бағытталуы әр бағыттағы қасиеттердің орташа мәніне алып келеді, сондықтан поликристалл – изотропты.



1.3-сурет. Кремнезем (а) мен  $SiO_2$ -ден жасалған шынының (б) кристалдық формасы - кристаллиттің кристалдық құрылымдары

Қатты дене атомдары арасындағы химиялық байланыс типі бойынша да кристалдарды жіктеуге болады (1.4-сурет). *Молекулалық кристалдарда* атомдар ең әлсіз байланысқан. Мұндай кристалдардағы атомдар арасындағы байланыс Ван-дер-Ваальс күштері деп аталатын әлсіз электростатикалық күштер көмегімен түзіледі. Бұл күштердің пайда болуы көрші атомдардың диполь моментінің электр өрісінің әсерінен атомдарда дипольдік электр моментінің индукциялануымен анықталады. Ал оларда бастапқы момент атомда электрон орнының лезде өзгеруі нәтижесінде пайда болады. Ара

кашықтық артқан сайын әсерлесу энергиясының тез азаюы байланыстың әлсіз екендігін көрсетеді. Сондықтан молекулалық кристалдардың балқу және қайнау температуралары төмен, тез сығылады. Мысалы: қатты  $CH_4, CO_2, CCl_4$ , асыл газдар  $Ar, Ne$  және т.б. *Сутектік байланыстармен* байланысқан кристалдардың байланыс энергиясының мәндері жоғарырақ. Бір ғана электрон бар сутек атомы бір ғана химиялық байланыс түзуге қабілетті. Бірақ бұл кезде түзілетін оң зарядты қасындағы электртерістілігі жоғары атом өзіне тартып екінші байланыс түзуі мүмкін. Мұндай электртеріс атом оттегі, фтор болуы мүмкін. Мысалы,  $H_2O$  (мұз). Мұз кристалдарында сутек атомы бір оттегі атомына өз электронының беріп жұп электронды байланыс түзеді, бірақ  $O-H$  жұбының құрамында тұрып, ол басқа оттегі атомымен электростатикалық күшпен әсерлеседі. Сутектік байланыс  $HF, NH_4F, HCN$  қосылыстары полимерленгенде маңызды роль атқарады. Байланыс энергиясы жоғары келесі кристалдар – *металдар*. Металл моделі – бүкіл қатты денені толтырып тұрған электронды газға ендірілген ретті орналасқан металл иондары. Бұл жағдайда химиялық байланыс металл атомдарының иондық қалдықтары мен бос электрондар арасындағы электростатикалық әсерлесумен анықталады. Бұл модель Друде теориясының негізін құрайды. Бұл теория бойынша валентті электрондар немесе олардың бір бөлігі делокализацияланған, яғни металл атомдарымен абсолютті байланыспаған. Егер осындай қатты денеге сырттан электр өрісімен әсер етсе, онда делокализацияланған электрондар кристалда еркін қозғала бастайды да, электр тогын туғызады. Мұндай электрондар өткізгіштік электрондары деп аталады. Друде теориясы осылайша металдардың жоғары электр- және жылу өткізгіштігін түсіндіреді. Көптеген бейметалл қатты денелерге *ковалентті немесе гомеополусты байланыс* тән. Мұнда электрондар жұбы екі атомға да жатады. Нәтижесінде кеңістікте осы екі атомдар арасында электр зарядының тығыздығы жоғары болады. Мысалы, сутек молекуласы. Ковалентті байланысқан қатты денелерге көптеген органикалық қосылыстар, галоген, азот, сутек және оттегі атомдар жұбы арасында байланыс бар заттар, *IV* топ атомдарынан тұратын заттар (алмаз, германий, кремний), *V* топ (пішінсізденген  $As$ ), *VI* топ ( $Te$ ) және т.б. Жақын көршілер саны координациялық сан деп аталады. Коваленттіден басқа бейметалл кристалдар *ионды химиялық* байланысқан. Мұндай байланыс қарама-қарсы зарядталған иондар әсерлескенде түзіледі. Мысалы,  $NaCl$  кристалы. Электрон  $Na$ -дан  $Cl$ -ға ауысады. Нәтижесінде  $Na^+$  және  $Cl^-$  пайда болады. Идеал ионды заттарға сілтілік металдардың галогенидтері жатады, оларда да иондық дәрежесі 70-90%.



1.4-сурет. Химиялық байланыс түрлерінде атомдардың әрекеттесу сызбанұсқалары мен әртүрлі байланыстары бар заттарға мысалдар:  
 а – иондық байланыс; б – металдық байланыс; в – молекулалық байланыс;  
 г – ковалентті байланыс.

Демек, көптеген бейметалл кристалдар аралас химиялық байланыс тән. Бұл байланыс – зарядтардың иондық және ковалентті конфигурациялары арасындағы резонанс нәтижесі. Кристалл қатты денелерде ең типті байланыс түрі – аралас.

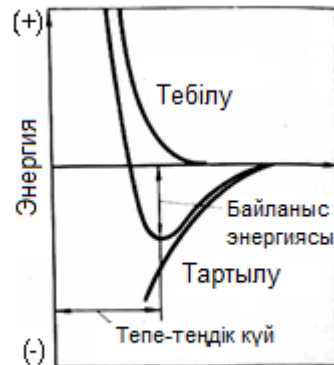
Қабатты кристалдарда атомдар қабатпен орналасады. Мысалы, графит. Оларда химиялық байланысты валентті электрондар жүзеге асырады, бірақ қабат ішінде және қабаттар арасында әртүрлі: қабаттар арасында байланыс әлсіз – ван-дер-ваальс, қабат ішінде – жай ковалентті байланыс. Қабаттар арасындағы байланыстың «әлсіздігі» төмен беріктікті және құрылымның «қабыршақтығын» анықтайды. Қабатты қатты денелерге *Te, As, Sb, Bi, CdI<sub>2</sub>, MoS<sub>2</sub>* және т.б. жатады (1.5-сурет).

Сонымен, химиялық байланыстың кез келген түрі атомдар арасындағы тартылу және тебілу күштерінің ара қатынасын көрсетеді. Әрекеттесуші атомдардың толық потенциалды энергиясы:  $U = -A/r^n + B/r^m$ , мұндағы бірінші қосынды – тартылу энергиясы, екінші – тебілу энергиясы,  $r$  – атомдар ара қашықтығы,  $A, B$  – коэффициенттер,  $n, m$  – тән мәндер (1.6-сурет).





1.5-сурет. Графиттің қабатты құрылымы



1.6-сурет. Энергияның атомаралық қашықтыққа тәуелділігі

### 1.3. Статистикалық физика және химиялық термодинамика негіздері

Кез келген қатты дене бөлшектер жүйесі электрондық және атомдық бөліктерден тұрады. Оларды бөлек қарастырайық. Электронды бөліктен бастаймыз.

Электрондар термодинамикалық тепе-теңдік жағдайындағы кез келген бөлшектер сияқты статистикалық заңдылықтарға бағыну керек. Олардың кәдімгі газдағы атомдық және молекулалық бөлшектерден айырмашылығы олар квант сандарына бағынады.

Олардың энергияларының мәндері кез келген емес, тек дискретті ғана бола алады. Бір күйде бірден артық электрон бола алмайды.

Бөлшектердің  $x, y, z, p_x, p_y, p_z$  алты өлшемді кеңістіктегі қозғалысын қарастырайық. Осы кеңістіктің көлем элементі

$$\Delta\gamma = \Delta X \Delta Y \Delta Z \Delta P_x \Delta P_y \Delta P_z$$

Координаттары  $X \div X + \Delta X$ ,  $Y \div Y + \Delta Y$ ,  $Z \div Z + \Delta Z$  аралықтарында жататын бөлшектердің жалпы саны бар. Ал импульстің құраушылары:

$$P_x \div P_x + \Delta P_x, P_y \div P_y + \Delta P_y, P_z \div P_z + \Delta P_z \text{ мәндерінің аралығында жатады.}$$

Бөлшектің координаттары және импульстері көрсетілген аралықтарда жатады деген ықтималдықты  $W$  енгізейік. Онда  $\Delta X \Delta Y \Delta Z$  және  $\Delta P_x \Delta P_y \Delta P_z$  аралықтарының өзгеруіне пропорционал  $W$  өседі (немесе кемиді). Яғни пропорционалдық коэффициенті де  $w$  координаталар мен импульстердің функциясы болып табылады:

$$W = w(\Delta X \Delta Y \Delta Z \Delta P_x \Delta P_y \Delta P_z) \Delta \gamma$$

Осылайша  $w$  қарапайым физикалық мәні – бөлшектің алты өлшемді кеңістіктің берілген  $\Delta \gamma$  көлем элементінде жату ықтималдығының тығыздығы.

Қарастырылып отырған кеңістіктің кез келген элементінде жату ықтималдығы бірге тең болатындықтан,  $w$  функциясы нормалау шартын қанағаттандыру керек:

$$\int_{\gamma} w d\gamma = 1$$

Мұнда интегралдау бүкіл алты өлшемді көлем  $\Gamma$  бойынша жүргізіледі.

$W$  функциясы бөлшектердің күйлер бойынша таралуын сипаттайды, күйлер ретінде аралықтар алынады. Сондықтан  $w$  - таралу функциясы. Егер алты өлшемді кеңістіктің орнына  $\Delta N$  өлшемді кеңістікті қарастырсақ, мұндағы  $N$  жүйедегі бөлшектер саны, онда бұл көп бөлшектерден тұратын тұйық жүйе үшін де орындалады. Алдында біз жеке бөлшекті қарастырғанбыз.

Егер жүйе, яғни барлық бөлшектер жиыны ілгерілемелі де, айналмалы да қозғалыс жасамаса, онда қозғалыс мөлшері  $P=0$ , қозғалыс мөлшерінің моменті  $\delta=0$ , сонда келесі таралуды аламыз:

$$w = e^{-\beta(\Omega - E + \mu N / \theta)}$$

мұндағы  $E$  - дененің толық энергиясы. Бұл – үлкен канондық таралу немесе бөлшектер саны айнымалы Гиббс таралымы.

Осы өрнекке кіретін шамалардың физикалық мәні:  $\Theta$ -энергетикалық бірліктермен өрнектелген температура, ол абсолюттік температурамен келесі қатынаспен байланысқан:  $\Theta=kT$ , мұндағы  $k$  - Больцман тұрақтысы.

$\Omega$ - термодинамикалық потенциал, ол жүйенің еркін энергиясының өзгеру мүмкіндігін сипаттайды.

$\mu$ - химиялық потенциал, бөлшектер саны бір бөлшекке өзгергенде еркін энергия өзгерісінің бөлігі болып табылады немесе бөлшекті сыртқы ортамен немесе басқа жүйемен алмастыру жолымен жүйенің еркін энергиясының өзгеру мүмкіндігін көрсетеді.

Электрондардың таралуының статистикалық заңдарына көшеміз.

Бастапқыда бөлшектердің әрекеттесуі ескерілмеген. Бұл жеке бөлшекті тұйық жүйе ретінде қарастыруға мүмкіндік береді.

Электрондар Паули принципіне бағынады, яғни әрбір кванттық күйде тек бір ғана электрон бола алады. Сондықтан электрондарды әрекеттеспейтін бөлшектер ретінде қарастыруға болмайды. Бұл жағдайда тұйық жүйе ретінде кванттық күй қарастырылады, себебі әртүрлі кванттық күйдегі бөлшектер арасында әрекеттесу жоқ. Осылайша, әрбір кванттық күйге Гиббс таралымы орындалады.

Электрондардың химиялық потенциалын толтыру ықтималдығы жартысына тең Ферми деңгейі (энергиясы) деп аталатын қандайда бір  $E_f$  энергиямен тұжырымдауға болады. *Ферми-Дирактың таралу функциясы:*

$$f = \frac{1}{1 + e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}}}$$

Егер  $e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} \gg 1$  болса, онда Больцман таралуының функциясы

орындалады:  $e^{-\frac{\epsilon - \mu}{kT}} = A e^{-\frac{E}{kT}}$ .

Спин саны бүтін сан немесе нольге тең кванттық бөлшектер Бозе – Эйнштейн таралу функциясына бағынады:

$$f = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} - 1}$$

мысалы, жарық кванттары Бозе-Эйнштейн

статистикасына бағынады.

Енді заттың атомдық бөлігіне көшейік. Оған термодинамиканың барлық ережелері мен қорытындылары қатысты болады.

*Термодинамика* – жүйеге әртүрлі әсер бергенде немесе жүйелер арасында энергияның бір түрден екіншісіне ауысуын зерттейтін ғылым. Немесе термодинамика зат түрленулері мен энергия түрленулерінің арасындағы байланысты зерттейді. *Химиялық термодинамика* - жалпы термодинамиканы физика-химиялық өзгерістерге қатысты зерттейді. Физика-химиялық түрленулер – түзілген фазалардың бастапқы фазалармен салыстырғанда химиялық құрамы өзгермей өтетін фазалық ауысулар. Мұндай ауысуларда фазалардың физикалық құрылымы (пішіні) немесе агрегаттық күйі өзгереді. Химиялық термодинамика қандай да бір нақты химиялық реакциялар жүре ме, жүрмей ме деген сұраққа жауап береді. Мұнда процестер кинетикасы қарастырылмайды. Екінші ерекшелігі – процестің жүру механизмін қарастырмайды. Ол жүйенің тек бастапқы және соңғы күйлерін ғана зерттейді. Бірақ соңғы күйге ауысу әртүрлі жолдармен жүруі мүмкін және ол маңызды, себебі адам жүйенің аралық күйін соңғы тепе-теңдік күйге жеткізбей жасанды түрде тежеуі мүмкін. Егер процестің әрі қарай жүру жылдамдығы аз болса, онда мұндай тежелген күй ұзақ бола алады. Сондықтан оны біз соңғы тепе-теңдік күй деп қарастыруымыз мүмкін. Бұл нағыз тепе-теңдіктен айырмашылығы жалған тепе-теңдік болады. Нағыз тепе-теңдіктегі жүйелер –стабильді, ал жалған тепе-теңдіктегі жүйелер – метастабильді деп аталады.

Сандық есептеулер үшін термодинамикалық жүйенің күйін сипаттайтын шамалармен жұмыс жасайды. Оларға температура  $T$ , қысым  $P$  және көлем  $V$  жатады. Іс жүзінде бір күйден екіншісіне ауысулар параметрлердің біреуі немесе кейде екеуі ғана өзгергенде, ал қалғандары тұрақты болғанда жүзеге асады. Осыған сәйкес келесі процестер бар:

1) *изотермиялық* – ( $T = \text{const}$ ). Температураны тұрақты ұстап тұру үшін жүйе қоршаған ортамен энергия алмасады - не береді, не алады;

2) *адиабаталық* ( $T \neq \text{const}$ ) ортамен энергия алмасу жоқ, жүйеде жылу бөлінеді немесе сіңіріледі,  $T$  өсуі немесе төмендеуі мүмкін;

3) *изобаралық* – ( $P = \text{const}$ );

4) *изохоралық* – ( $V = \text{const}$ ).

*Термодинамикалық функциялар* – жүйе күйінің сипаттамалары. Оларға ішкі және еркін энергия, энтальпия және энтропия жатады.

*Ішкі энергия*  $E$  – берілген жүйенің барлық энергия түрлерінің қосындысы (жүйенің кеңістікте орын ауыстыру механикалық энергиясынан басқа). Ол процестің жүру жолына тәуелсіз. Ішкі энергия изохоралық процестерді сипаттайды.

*Энтальпия және жылу мөлшері*  $H$ -изобаралық процестерде энергия өзгерісін сипаттайды. Тұрақты қысымда жылу мөлшері  $Q_p$  ішкі энергияның өсуіне және жүйенің  $V_1$  көлемнен  $V_2$  көлемге ұлғаю жұмысын жасауға жұмсалады. Энтальпия да процесс жолына тәуелсіз, себебі тұрақты қысымда көлемнің өзгеруі жүйенің тек бастапқы және соңғы күйлерімен ғана анықталады.

*Еркін энергия*  $G$  немесе  $F$  ішкі энергияның жұмысқа айналуға қабілеті бөлігін ғана сипаттайды.  $(E-G)$  айырымы жұмысқа айналмайтын байланысқан энергия болып табылады. Егер  $T$  және  $V$  тұрақты болса онда *Гельмгольцтың еркін энергиясы*  $F$  пайдаланылады. Көп жағдайларда қатты денелердегі өзгерістер тұрақты температура және қысымда өтеді. Бұл кезде *Гиббстің еркін энергиясын*  $G$  қолдану қажет.

*Байланысқан энергия*  $\Delta L = E - G$  температураның күйдің тағы бір функциясының өзгерісіне  $\Delta S$  көбейтіндісі түрінде өрнектеледі:  $\Delta L = T \Delta S$ , мұндағы  $S$  функциясы жүйенің энтропиясы деп аталады. *Энтропия* – дененің жылулық жұмыс жасай алмау қабілетінің шамасын көрсететін жүйенің термодинамикалық күй функциясы. Дененің әрбір күйі үшін энтропияның белгілі бір мәні тән.  $\Delta S$  көп болса, дене энергиясының көп бөлігі байланысқан күйде қалады, яғни жұмысқа айналуға қабілетті емес. Жұмыспен кез келген машинаның ПӘК ұғымы байланысты. Энтропия аз болса, ПӘК шамасы да аз.

Больцман энтропияның  $W$  ықтималдықпен байланысын тапты:

$$S = k \ln W$$

Яғни, табиғатта барлық процестер күй ықтималдылығының өсуіне алып келетін бағытқа қарай жүреді. Демек, жүйенің ең ықтимал күйінд