

частотой релаксации. Величина дисперсии скорости звука и значение коэф. поглощения на частоте ω_r зависят от того, какие именно степени свободы возбуждаются под действием звука, а время релаксации τ связано со скоростью обмена энергией между разл. степенями свободы. Измеряя скорость и поглощение звука в зависимости от частоты, можно судить о характере молекулярных процессов и о том, какой из этих процессов вносит осн. вклад в релаксацию. Методы М. а. позволяют исследовать возбуждение колебат. и вращат. степеней свободы в газах и жидкостях, характер столкновений молекул в смесях разл. газов, процесс установления равновесия при хим. реакциях, структурную релаксацию в жидкостях, процессы сдвиговой релаксации в очень вязких жидкостях и полимерах, разл. процессы взаимодействия звука с электронами проводимости, магнонами, фононами и др. элементарными возбуждениями в твёрдых телах (см. *Спин-фононное взаимодействие, Акустическое электронное взаимодействие*). Методы М. а. могут использоваться также для исследования кинетики молекулярных процессов в растворах и смесях, в критич. области при фазовых переходах, в расслаивающихся полимерных системах. Эти методы позволяют исследовать свойства стёкол в твёрдом и жидком состоянии, включая область стеклования. В жидкости с пузырьками газа по характеру зависимостей скорости и поглощения от частоты можно определить размеры пузырьков и концентрацию газовой фазы, в биополимерах — характер межмолекулярных взаимодействий и перестройку молекул биополимеров в растворе.

Область релаксации для жидкостей лежит, как правило, в диапазоне более высоких частот, чем для газов. В очень вязких жидкостях, полимерах и нек-рых др. веществах в поглощение и дисперсию может давать вклад целый набор релаксац. процессов с широким спектром времён релаксации. Изучение влияния темп-ры и давления на частотные зависимости скорости и поглощения звука позволяет разделить вклад разл. релаксац. процессов.

В М. а. для исследований обычно применяется УЗ- и гиперзвуковые волны: в газах — в диапазоне частот 10^4 — 10^6 Гц, а в жидкостях и твёрдых телах — в диапазоне 10^6 — 10^{10} Гц. Использование оптич. методов, а именно: измерение смещения и ширины компонент *Манделштама* — *Бриллюэна* рассеяния и определение по ним скорости и коэф. поглощения звука, позволило расширить диапазон применяемых частот вплоть до десятков ГГц.

Методы М. а. могут использоваться также для исследования веществ, в к-рых взаимодействие звука с элементарными возбуждениями не ограничивается простейшими релаксац. процессами. Напр., исследование поглощения звука в металлах и полупроводниках при разл. темп-рах, магн. полях и др. воздействующих факторах позволяет получить информацию о поведении электронов, о структуре *ферми-поверхностей* и об особенностях электрон-фононного взаимодействия. Измерение затухания звука в диэлектриках, напр. в кварце, в зависимости от темп-ры и при разных условиях предварит. обработки позволяет судить о наличии тех или иных примесей или дефектов.

Лит.: Михайлов И. Г., Соловьев В. А., Сырников Ю. П., Основы молекулярной акустики, М., 1964; Физическая акустика, под ред. У. Мэсона, пер. с англ., т. 2; Ч. А. М., 1968; т. 4, ч. А — Б, М., 1969—70; т. 5, 7, М., 1973—74; Такер Д. Ж., Рамптон В., Гиперзвук в физике твёрдого тела, пер. с англ., М., 1975; Крассильников В. А., Крылов В. В., Введение в физическую акустику, М., 1984.

МОЛЕКУЛЯРНАЯ МАССА — значение массы молекулы, выраженное в атомных единицах массы. Практически М. м. равна сумме масс входящих в неё атомов (см. *Атомная масса*).

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРБИТАЛЬ (МО) — одноэлектронная многоцентровая волновая функция, описывающая состояние отд. электрона молекулы, движущегося

в усреднённом поле остальных электронов и в поле её ядерного остова. МО включает пространственную $\varphi(r)$ и спиновую $\theta(s_2)$ компоненты и часто наз. спин-орбиталью:

$$\varphi(r, s_2) = \varphi(r) \cdot \theta(s_2),$$

где r — вектор, описывающий положение электрона в пространстве, s_2 — значение спина электрона. Каждая МО характеризуется своим ср. значением энергии ϵ_i отд. электрона в состоянии с волновой ф-цией φ_i . Физ. смысл МО состоит в том, что $|\varphi_i|^2$ описывает пространство, распределение электрона с энергией ϵ_i . Полная электронная энергия молекулы равна сумме энергий электронов на всех занятых МО. Впервые понятие МО введено Р. Малликоном (R. Mulliken, 1932).

Обозначения МО отличны от обозначений атомных орбиталей; так, для двухатомных и линейных молекул при значениях орбитального квантового числа $l = 0, 1, 2, \dots$ вводят σ -, π -, δ -, ... орбитали, а если молекула имеет центр симметрии, то символы σ , π , δ , ... помечают индексами g и u (напр., σ_g , π_u , ...). Для нелинейных молекул МО классифицируют по типам симметрии. Напр., МО молекулы H_2O обозначают с помощью неприводимых представлений группы C_{2v} : a_1 , a_2 , b_1 , b_2 . Т. к. молекула может иметь неск. МО данного типа, МО обозначают дополнит. коэф. 1, 2, 3, ..., указывающими порядок расположения МО по энергиям (МО $2a_1$ лежит выше, чем $1a_1$, и т. д.).

Для нахождения МО применяют один из методов *квантовой химии*. напр. для двухатомных молекул используется метод Х. Хартри — Фока, к-рый позволяет получать числ. значения МО. В общем случае многоатомных молекул с числом N атомов в ней для нахождения МО используют приближение, в к-ром каждая МО φ представляется в виде линейной комбинации атомных орбиталей χ_n (метод МО—ЛКАО) атомов, образующих молекулу, т. е. $\varphi = \sum_{n=1}^N c_n \chi_n$ (c_n — коэф. МО φ).

МО, найденные методом Хартри — Фока, могут описывать энергетич. состояние молекулы, в к-рых находится электрон (заполненная МО) и в к-рых отсутствует электрон (вакантная МО); для заполненных МО

$$\int_V \varphi^* \varphi dV = 1 \quad (dV — \text{элемент объёма}), \text{ а для вакантных —}$$

$$\int_V \varphi^* \varphi dV = 0.$$

Представления о МО используются при интерпретации разл. видов электронных молекулярных спектров. При этом учитывают след. приближённые результаты теории МО: энергия ионизации молекулы при удалении электрона с орбитали φ_i есть энергия электрона на этой орбитали — ϵ_i ; энергия сродства к электрону при добавлении электрона на вакантную МО φ_a есть — ϵ_a ; энергия электронного возбуждения, связанная с переходом электрона с заполненной МО φ_i на вакантную МО φ_a , есть $\epsilon_a - \epsilon_i$.

МО используют как нулевое приближение для нахождения точных решений адиабатич. нерелятивистского *Шрёдингера уравнения* для молекул. Корреляц. диаграммы МО реагентов и продуктов хим. реакций используют для предсказания реакционной способности хим. соединений.

Лит. см. при ст. *Молекула, Квантовая химия*.
М. Р. Алиев, А. И. Болдырев.

МОЛЕКУЛЯРНАЯ РЕФРАКЦИЯ (R) — связывает электронную поляризуемость $\alpha_{эл}$ вещества (см. *Поляризуемость атомов, ионов и молекул*) с его *преломляющим показателем n*. В пределах применимости выражений для М. р. она, характеризуя, как и n , способность вещества преломлять свет, отличается от n тем, что практически не зависит от плотности, темп-ры и агрегатного состояния вещества.