Министерство образования Российской Федерации

Красноярский государственный университет

Кафедра общей физики

ОБЩАЯ ФИЗИКА

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ФИЗИКА

План-конспект семинарских занятий
Часть 1

Красноярск 2006

Составители О.И. Москвич, О.Ю. Селиверстова

Общая физика. Молекулярная физика: План-конспект семинарских занятий /Краснояр. гос. ун-т; сост. О.И.Москвич, О.Ю.Селиверстова. Красноярск: РИО КрасГУ, 2006. – 41 с. (Экспресс-издание)

Печатается по решению редакционно-издательского совета Красноярского государственного университета

Введение

Молекулярная физика преподается студентам физических специальностей как курс современной физики, демонстрирующий возможности таких универсальных методов, как термодинамический и статистический. Эти методы находят широкое применение не только в различных областях физики, но также в химии, биологии, биофизике, медицине, экономике и сфере гуманитарных наук. Раскрытие сущности статистического подхода на материале собственно молекулярной физики и примерах-аналогах из других областей реальной жизни является одной из главных задач семинарских занятий первой половины семестра.

Молекулярная статистика требует определенной математической подготовки студентов. Если в области дифференциального и интегрального исчисления стартовые знания, умения и навыки обнадеживают, то в области теории вероятностей они полностью отсутствуют. Поэтому основные понятия, аксиомы и правила теории вероятностей включены в «План-конспект»а кроме того в тексте приведены ссылки на дополнительные источники информации.

Многие задачи молекулярной физики имеют формализованные решения. Способ решения – действие по процедуре. Знание процедуры и умение ее выполнять позволяют с вероятностью, близкой к единице, решить задачу. И наоборот, незнание делает задачу для студента неразрешимой. План-конспект по каждой из восьми тем раздела «Статистический подход к описанию молекулярных явлений» содержит установочную теоретическую часть (физические идеи, проблематика, список определений и процедур), методические указания и набор задач.

Целевое назначение данного методического пособия – обеспечить максимальную согласованность содержания лекционного курса и семинарских занятий.

«Насаждение» общей идеологии предполагает мягкий вариант прокрустова ложа и оставляет для коллег-преподавателей относительную свободу и самостоятельность, как в области методики преподавания предмета, так и в расширении содержания базы задач.

Семинар 1. Элементы теории вероятности и физической статистики: вероятность, плотность вероятности, условие нормировки вероятности

Большинство событий в системе многих частиц (молекулярной системе) являются случайными. Закономерности, связанные со случайными величинами, изучаются теорией вероятности и математической статистикой. В теории вероятности [1,4] основным определением является частотное определение вероятности P случайного события A:

$$P(A) = \lim_{N\to\infty}\frac{N_i}{N}, \qquad (1.1)$$

где N_i – количество случаев, в которых наблюдается интересующий результат, N – общее число всех возможных случаев. Вероятность достоверного события $(N_i = N)$ равна единице. Вероятность невозможного события равна нулю.

В статистической физике вероятностью макроскопического состояния α системы называется величина P_α [3,4]:

$$P_\alpha = \frac{\Gamma_\alpha}{\Gamma_0}; \qquad \Gamma_0, \Gamma_\alpha >> 1, \qquad (1.2)$$

где Γ_0 – общее число микросостояний, доступных для системы, Γ_α - число микросостояний, приводящих к данному макросостоянию α. Γ_α называют термодинамической вероятностью макроскопического состояния. Величины Γ_0 и Γ_α в ряде задач могут быть вычислены с помощью методов комбинаторики. Подробный вывод основных формул элементарной комбинаторики приведен в [3].

Основные формулы элементарной комбинаторики

Число способов размещения m различных предметов по n местам:

$$\Gamma_1(n, n-m) = \frac{n!}{(n-m)!}. \quad (1.3)$$

Число способов размещения n различных предметов по n местам (число перестановок):

$$\Gamma_2 = n! \quad (1.4)$$

Число способов размещения m неразличимых предметов по n местам:

$$\Gamma_3(n, m) = \frac{n!}{m!(n-m)!}. \quad (1.5)$$

Число способов, которыми можно выбрать m различных предметов из n различных предметов, называется числом сочетаний и определяется выражением

$$C(n, m) = \frac{n!}{m!(n-m)!}. \quad (1.6)$$

Непрерывное распределение вероятности. Плотность вероятности. Условие нормировки вероятности

Если состояние физической системы характеризуется параметром φ, случайно принимающим любые значения от φ_0 до φ_1, то определение вероятности (1.1) лишено смысла, поскольку множество значений параметра не является счетным. В этом случае вероятность определяется в дифференциальной форме:

$$dP(\varphi) = f(\varphi)d\varphi, \quad (1.7)$$

Утверждается, что $dP(\varphi)$ пропорциональна величине достаточно малого интервала изменений переменной $d\varphi$, а коэффициент пропорциональности $f(\varphi)$ не зависит от величины этого интервала и называется плотностью вероятности [1,5]:

$$f(\varphi) = \frac{dP(\varphi)}{d\varphi}, \quad (1.8)$$

Знание плотности вероятности позволяет найти вероятность для любой области, в которой определена плотность.

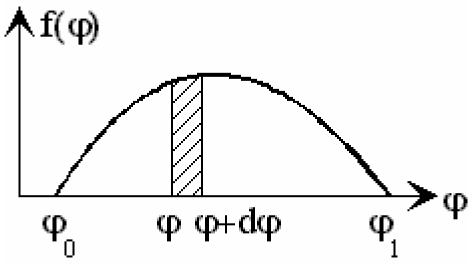


Рис.1

На рис.1 представлен пример графического изображения плотности вероятности. Площадь заштрихованной полоски на рисунке равна вероятности $dP(\varphi)$ нахождения величины φ в интервале $[\varphi;\ \varphi+d\varphi]$. Площадь под всей кривой $f(\varphi)$ есть вероятность нахождения величины φ в интервале $[\varphi_0;\varphi_1]$, которая всегда постоянна, равна 1 или 100% и определяет условие нормировки плотности вероятности.

$$\int_{\varphi_0}^{\varphi_1} dP(\varphi) = \int_{\varphi_0}^{\varphi_1} f(\varphi)d\varphi = 1. \quad (1.9)$$

Часто условие нормировки записывают для интервала значений φ $[0, \infty)$ или $(-\infty, +\infty)$, полагая, что за пределами конечного интервала $[\varphi_0,\varphi_1]$ плотность вероятности равна нулю.

Условие нормировки вероятности дискретно изменяющейся переменной φ, которая может принимать n различных значений φ_i с соответствующей вероятностью P_i, записывается так:

$$\sum_{i=1}^{n} P_i = 1. \quad (1.10)$$

Выражения (1.9) и (1.10) являются следствием теоремы сложения вероятностей для несовместных событий [1,4].

Условие нормировки есть математическая запись утверждения, что если физическая система существует, то она находится в каком-либо из доступных ей состояний, характеризующихся параметром φ. Это событие является достоверным и его вероятность равна единице.

З а д а ч и

1.1. В сосуде находятся 5 молекул газа. Мысленно разобьем сосуд на две равные части. Каждая из молекул может находиться в выделенной половине объема или не находиться в ней. Рассмотреть "макроскопическое" состояние, когда m молекул газа находятся в выделенной половине сосуда, и найти число микроскопических состояний Γ_m, с помощью которых оно реализуется. Принять m равным 0, 1, 2, 3, 4, 5. Определить также общее число микросостояний Γ_0 и частоту реализации всех рассмотренных «макросостояний». Термин «макроскопическое состояние» здесь использован условно, поскольку в системе всего 5 частиц, и она, строго говоря, не является статистической. По этой же причине вместо «вероятность» употребляется термин «частота».

1.2. В системе из n частиц со спином 1/2 в отсутствии внешнего магнитного поля спин каждой частицы может быть равновероятно ориентирован либо вверх, либо вниз.

а) Найти вероятность $P_n(m)$ реализации состояния, когда m спинов направлены вверх.

б) Построить гистограмму зависимости $P(m)$ для n=6. Как будет изменяться вид распределения $P(m)$ при увеличении чисел n и m? Чему равно наивероятнейшее значение m?

1.3. Состояние системы характеризуется случайной величиной x с известным распределением вероятности:

а) $dP = Adx, \quad x \in [a,b]$; б) $dP = Axdx, \quad x \in [0,1]$;

в) $dP = Ax^2dx, \quad x \in [-1,1]$; г) $dP = A\frac{1}{x}dx, \quad x \in [2,4]$.

Найти нормировочную константу A для каждого случая. Построить соответствующие графики плотности вероятности.

1.4. Проверить выполнение условия нормировки вероятности в задаче 1.1.

1.5. Представим себе тонкую медную проволоку, натянутую вдоль оси X. Несколько атомов меди, расположенных вблизи x=0, сделали "мечеными" (радиоактивными). При увеличении температуры нити подвижность атомов возрастает. При этом каждый атом может перескочить на соседнее место в кристаллической решетке либо направо, либо налево. Параметр решетки равен l.

Предположим, что в момент времени t=0 температура нити быстро возрастает до некоторого большого значения и в дальнейшем остается неизменной, т.е. до момента t=0 атомы "не прыгали", а покоились в узлах решетки, в том числе и "меченые" атомы в окрестности x=0.

Вероятность того, что радиоактивный атом будет обнаружен по истечении времени t при условии, что $t>>\tau$ (τ - время нахождения атома в узлах решетки), в интервале $[x, x+dx]$ определяется плотностью вероятности $f(x)$, $dP(x) = f(x)dx$. Изобразить на графике примерный ход плотности вероятности в зависимости от x, исходя из соображений симметрии и условия нормировки, для следующих трех случаев:

а) вскоре после t=0,

б) по прошествии относительно большого времени t,

в) по прошествии очень большого времени t.

О т в е т ы

1.1. Γ_m=1; 5; 10; 10; 5; 1. Γ_0= 32. $P_m = \frac{1}{32};\frac{5}{32};\frac{10}{32};\frac{10}{32};\frac{5}{32};\frac{1}{32}$.

1.2. а) $P_n(m)=\frac{n!}{m!(n-m)!}\left(\frac{1}{2}\right)^n$;

б) $P_6(m) = \frac{1}{64};\frac{6}{64};\frac{15}{64};\frac{20}{64};\frac{15}{64};\frac{6}{64};\frac{1}{64}$ $m_н = 3$.

С ростом числа частиц в системе *n* гистограмма переходит в график непрерывного распределения вероятности. Кривая представляет собой очень высокий и узкий пик, максимум которого находится при $m_н = n/2$.

1.3. а) $A = \frac{1}{b-a}$; б) А=2; в) $A = \frac{3}{2}$; г) $A = \frac{1}{\ln 2}$.

1.5. Площади под кривыми *f(x)* во всех случаях одинаковы и равны единице. Это условие нормировки плотности вероятности.

Семинар 2. Средние значения физических величин и их флуктуации [1,4]

Среднее значение непрерывно изменяющейся случайной величины φ определяют по формуле

$$\langle\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi\, dP(\varphi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi \cdot f(\varphi)\, d\varphi, \tag{2.1}$$

здесь φ может принимать значения в интервале (+∞, –∞) (смотри примечание к формуле (1.8)).

Среднее значение дискретно изменяющейся случайной величины

$$\langle\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{n} P(\varphi_j) \cdot \varphi_j. \tag{2.2}$$

Абсолютной мерой флуктуации является дисперсия – средний квадрат отклонения случайной величины от ее среднего значения:

$$\sigma^2 = \left\langle (\varphi - \langle\varphi\rangle)^2 \right\rangle = \left\langle \varphi^2 \right\rangle - (\langle\varphi\rangle)^2 . \tag{2.3}$$

Формула (2.3) может быть расписана более подробно:

а) для непрерывно изменяющейся случайной величины

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (\varphi - \langle\varphi\rangle)^2\, dP = \int_{-\infty}^{+\infty} (\varphi - \langle\varphi\rangle)^2 f(\varphi)\, d\varphi ; \tag{2.4}$$

б) для дискретно изменяющейся случайной величины

$$\sigma^2 = \sum_j (\varphi_j - \langle\varphi\rangle)^2 P_j \tag{2.5}$$

Корень квадратный из дисперсии σ называется стандартным (среднеквадратичным) отклонением.

Мерой относительной величины флуктуации является α (относительное стандартное отклонение):

$$\alpha = \frac{\sigma(\varphi)}{\langle\varphi\rangle}. \tag{2.6}$$

З а д а ч и

2.1. Получить формулу (2.3) для вычисления дисперсии.

2.2. Фильтр радиотехнического устройства пропускает шумы в полосе частот от ν_1 до ν_2. Считая, что шум равномерно распределен по частотам, построить график плотности вероятности. Найти значения $\langle\nu\rangle$, $\langle\nu^2\rangle$ и $\sigma^2(\nu)$.

2.3. Рассмотрим одиночный спин, равный ½, в магнитном поле. Его магнитный момент μ с вероятностью *p* может быть направлен по полю и с вероятностью *q=(1 - p)* – против поля. В первом случае проекция магнитного момента на направление поля равна μ_0, во втором $-\mu_0$. Определить $\langle\mu\rangle$, $\langle\mu^2\rangle$, $\sigma^2(\mu)$.

2.4. Рассмотрим ядро со спином 1. Проекция магнитного момента этого ядра вдоль направления магнитного поля может иметь три возможных значения, а именно $+\mu_0$, 0 и $-\mu_0$. Пусть вероятность того, что $\mu = +\mu_0$ будет p, и вероятность того, что $\mu = -\mu_0$, также p.

а) Из условия нормировки определить вероятность того, что $\mu = 0$.

б) Вычислить $\langle\mu\rangle$, $\langle\mu^2\rangle$, $\sigma^2(\mu)$.

2.5. Пусть F – какая-либо аддитивная физическая величина, характеризующая систему N молекул идеального газа, так что $F = \sum_{i=1}^{N} f_i$, где f_i значение f для i-ой частицы газа. Выразить абсолютную и относительную меры флуктуаций (σ и α) величины F через средний квадрат флуктуации величины f.

Примечание: Величины f и g называют статистически независимыми, если $\langle\Delta f \cdot \Delta g\rangle = 0$. Для них справедливо равенство $\langle f \cdot g\rangle = \langle f\rangle\langle g\rangle$.

2.6. Предположим, что твердое тело содержит N ядер, удовлетворяющих условию задачи 2.3, и их взаимодействием с другими ядрами можно пренебречь. Обозначим через M полную проекцию магнитного момента вдоль заданного направления. Выразить $\langle M\rangle$ и его стандартное отклонение через N, р и μ_0, используя результаты задачи 2.5. В случае затруднения адресуем к [4].

2.7. Используя условие задачи 1.5,

а) определить, на какое среднее расстояние $\langle x\rangle$ от начала координат смещается радиоактивный атом за время t;

б) получить формулу для стандартного отклонения смещения $\sigma(x)$ радиоактивного атома за время t.

Ответы

2.2. $\langle\nu\rangle = \dfrac{\nu_2 + \nu_1}{2}$; $\langle\nu^2\rangle = \dfrac{1}{3}(\nu_1{}^2 + \nu_1\nu_2 + \nu_2{}^2)$;

$$\sigma^2 = \frac{(\nu_2 - \nu_1)^2}{12}.$$

2.3. $\langle\mu\rangle = (2p-1)\cdot\mu_0$; $\langle\mu^2\rangle = \mu_0{}^2$; $\sigma^2(\mu) = 4pq\mu_0{}^2$.

2.4. $\langle\mu\rangle = 0$, $\langle\mu^2\rangle = 2p\mu_0{}^2$.

2.5. $\sigma(F) = \sqrt{N}\sigma(f)$, $\alpha(F) = \dfrac{\sigma(f)}{< f >}\cdot\dfrac{1}{\sqrt{N}} \equiv \dfrac{\alpha(f)}{\sqrt{N}}$.

2.6. $\langle M\rangle = N(2p-1)\mu_0$, $\sigma(M) = 2\mu_0\sqrt{Npq}.$

2.7. а) $\langle x\rangle = 0$, б) $\sigma(x) = \left(\dfrac{t}{\tau}\right)^{1/2}\cdot l.$

Семинар 3. Биномиальное распределение

Если случайное событие имеет только два исхода, причем вероятность реализации p одного из исходов в единичном испытании постоянна, то распределение вероятностей называется биномиальным. Условие нормировки в этом случае отражает альтернативный характер исхода: $p + q = 1$, где q – вероятность того, что событие не произошло. Биномиальное распределение отвечает на вопрос: какова вероятность реализации m определенных исходов в n независимых испытаниях при известном значении p? В статистике этот вопрос часто формулируется так: Какова вероятность обнаружить у m объектов (частиц) из n определенный признак?

Биномиальное распределение справедливо для описания случайных событий, имеющих две возможности исхода, в различных областях повседневной жизни, медицине, науке:

производстве и имеет следующее математическое выражение:

$$P_n(m)=\frac{n!}{m!(n-m)!}p^m q^{n-m}, \qquad (3.1)$$

где $\dfrac{n!}{m!(n-m)!}=C_n^m$ – число способов, которыми можно выбрать m различных предметов из n различных предметов (число сочетаний).

Для расчета среднего значения m и дисперсии необходимо вычислить $<m^k>$, где k = 1, 2 согласно (2.3). В силу трудоемкости вычислений подобного рода, процедура суммирования заменяется эквивалентной по результату, но более простой по форме дифференциальной процедурой:

$$\left\langle m^k\right\rangle=\underbrace{p\frac{\partial}{\partial p}(p\frac{\partial}{\partial p}}_{k}(...(p+q)^n)\,. \qquad (3.2)$$

Существуют два важнейших предельных случая биномиального распределения.

Распределение Гаусса (другое его название - нормальное распределение). При $n\to\infty$ и $p=const$, распределение плотности вероятности имеет вид

$$f(m)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{m-\langle m\rangle}{\sigma}\right)^2}. \qquad (3.3)$$

В этом предельном случае m является непрерывно изменяющейся величиной ($\langle m\rangle$>>1). Примерами нормального распределения являются: закон ошибок в метрологии, распределение попаданий в мишень (прицельная стрельба), распределение молекул по компонентам скорости в состоянии теплового равновесия.

Распределение Пуассона (закон редких событий).

При $n\to\infty$ и np = const (p<<1)

$$P(m)=\frac{\left(\langle m\rangle\right)^m}{m!}e^{-\langle m\rangle} \qquad (3.4)$$

Распределение Пуассона описывает вероятности редких событий, когда $\langle m\rangle$ невелико по сравнению с 1. Такими событиями могут быть технические катастрофы, биологические мутации, молекулярное истечение - эффузия, вылет частиц при радиоактивном распаде ядра. Расчет флуктуаций в этом предельном случае упрощается:

$$\sigma(m)=\sqrt{\langle m\rangle},\ \alpha=\frac{1}{\sqrt{\langle m\rangle}}. \qquad (3.5)$$

З а д а ч и

3.1. Уровень технологии, используемый фирмой Кодак, при производстве фотопленки, гарантирует вероятность брака не выше 10^{-2} процентов. Каждый сотый житель города с миллионным населением раз в месяц покупает пленку Кодак. Рассчитать вероятность того, что в данном городе за месяц продадут m бракованных фотопленок Кодак (m = 0, 1, 2, 4, 10). Построить график *P(m)*.

3.2. Два одинаковых сосуда, в которых находится по молю одного и того же идеального газа при одинаковых условиях, сообщаются между собой через отверстие. Какое число молекул n должно перейти из одного сосуда в другой, чтобы возникшее состояние стало в $\alpha=e$ раз менее вероятным, чем исходное?

3.3. Воспользовавшись формулой (3.2), показать, что $<m>=pn$, $<m^2>=npq+n^2p^2$. Исходя из этого, определить стандартное отклонение и относительную флуктуацию величины m.

3.4. Жители города N очень любят домашних животных. В каждой семье живет либо кошка, либо собака. В городе на три кошки приходится одна собака. Сколько кошек проживает в стоквартирном доме?

3.5. Медленное истечение газа из сосуда в вакуум через отверстие, размеры которого много меньше длины свободного пробега молекул газа, называется эффузией. Газообразный водород вытекает из тонкостенного сосуда в вакуум. Принять температуру, при которой происходит эффузия, равной T=300 К, давление в сосуде $p=10^{-6}$атм, площадь отверстия S=0.1 мм^2.

а) Показать, что количество атомов N, покидающих сосуд за время $t = 10^{-3}$ с, подчиняется закону редких событий (p<<1).

б) Найти относительную флуктуацию потока атомов α.

Примечание: число частиц эффузионного потока определяется выражением $N = \frac{1}{4}\langle \upsilon \rangle nS\Delta t$, где $\langle \upsilon \rangle = 4.6\sqrt{T/\mu}$ – средняя скорость теплового движения молекул, μ - молярная масса газа. Давление водорода в сосуде остается постоянным.

О т в е т ы

3.1. $P(m) = \frac{1}{em!}$.

3.2. $n = \sqrt{N \ln \alpha} = \sqrt{N} = 7.8 \cdot 10^{11}$ (применимо распределение Гаусса)

3.4. $m = \langle m \rangle \pm \sigma(m) = 75 \pm 5$.

3.5. а) p=10^{-4}, если объем сосуда ~ 10^{-3}м^3;

б) $\alpha = \frac{1}{\sqrt{\langle N \rangle}} \approx 10^{-6}$, $\langle N \rangle = \frac{1}{4} Sn\langle v \rangle t \approx 10^{12}$.

Семинар 4. Распределение Гиббса

Одной из важных проблем молекулярной физики является распределение энергии ε_o между различными частями изолированной системы. Совокупность незамкнутых систем, имеющих возможность обмениваться энергией только между собой, называется каноническим ансамблем. На вопрос, какова вероятность того, что система имеет некоторую энергию ε_α, при условии что ε_α<<ε_o, отвечает распределение Гиббса, или каноническое распределение:

$$P(\varepsilon_\alpha) = A g_\alpha e^{-\beta \varepsilon_\alpha} \tag{4.1}$$

где A – нормировочная константа, g_α – число микросостояний системы с энергией ε_α (кратность вырождения), β - параметр, определяющий термодинамическую температуру:

$$\frac{1}{kT} = \beta = \frac{\partial \ln \Gamma_\alpha(\varepsilon_0)}{\partial \varepsilon_0}, \tag{4.2}$$

где $\Gamma_\alpha(\varepsilon_0)$– число доступных состояний канонического ансамбля, посредством которых осуществляется состояние с нулевой энергией у рассматриваемой системы. Формула (4.2) дает первичное статистическое определение температуры. В случае непрерывного распределения энергии вероятность того, что система находится в состоянии с энергией в интервале между ε и $\varepsilon + d\varepsilon$ равна

$$dP(\varepsilon) = Ae^{-\beta\varepsilon} dg = Ae^{-\beta\varepsilon}\rho(\varepsilon)d\varepsilon \tag{4.3}$$

где $dg=p(\ \varepsilon\ )d\varepsilon$ – число микросостояний, лежащих в интервале энергий между ε и $\varepsilon + d\varepsilon$. Величина

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dg}{d\varepsilon} \tag{4.4}$$

называется плотностью состояний системы в интервале [ε; $\varepsilon + d\varepsilon$].

Статистической суммой называется величина Z:

$$Z = \sum_\alpha g_\alpha e^{-\varepsilon_\alpha \beta} \tag{4.5}$$

В случае непрерывного распределения энергии:

$$Z = \int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_1} e^{-\varepsilon\beta} \rho(\varepsilon) d\varepsilon \tag{4.6}$$

здесь интегрирование ведется по всей области определения энергии системы.

Учитывая условие нормировки, получаем

$$A = \frac{1}{Z} \tag{4.7}$$

С помощью статистической суммы Z можно формализовать вычисление среднего значения энергии и ее дисперсии:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{\alpha} \varepsilon_\alpha e^{-\beta\varepsilon_\alpha}}{\sum_{\alpha} e^{-\beta\varepsilon_\alpha}} = -\frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \qquad (4.8)$$

$$\sigma^2(\varepsilon) = \frac{\partial}{\partial \beta}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right) = -\frac{\partial \langle \varepsilon \rangle}{\partial \beta}. \qquad (4.9)$$

З а д а ч и

4.1. Рассмотрим произвольную макроскопическую систему при комнатной температуре.

а) Воспользовавшись определением термодинамической температуры, найти процентное увеличение числа микроскопических состояний, доступных такой системе, при возрастании ее энергии на 10^{-3} эВ.

б) Система поглотила единичный фотон видимого света (λ = $5 \cdot 10^{-5}$ см). Во сколько раз изменилось число доступных системе микросостояний?

4.2. Определить отношение числа атомов газообразного натрия в состоянии *3P* к числу атомов в основном состоянии *3S* при температуре *T*=2400 К. Известно, что переходу *3P*→*3S* соответствует спектральная линия с длиной волны λ=589нм. Кратности вырождения состояний *3P* и *3S* равны соответственно 6 и 2.

4.3. Квантовый гармонический осциллятор характеризуется набором дискретных состояний с энергией

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu,$$

n = 0,1,2,3….., ν – частота колебаний осциллятора.

Осциллятор можно рассматривать как подсистему, находящуюся в тепловом равновесии с системой при температуре *T*.

а) Вычислить статистическую сумму такого осциллятора. Примечание: $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-xn} = \frac{1}{1-e^{-x}}$.

б) Рассчитать среднее значение энергии одного осциллятора.

в) Построить график зависимости средней энергии осциллятора от температуры.

г) Получить выражение для молярной теплоемкости C_v^μ как функции от температуры. Рассмотреть предельные случаи, когда $T \to \infty$ и $T \to 0$.

д) Построить график зависимости C_v^μ от температуры.

4.4. Спин, равный 1/2, находится в контакте с тепловым резервуаром при температуре *T*. Спин обладает магнитным моментом μ_0 и находится во внешнем магнитном поле *B*.

а) Вычислить статистическую сумму для этого спина.

б) Рассчитать среднее значение энергии спина.

в) Построить график зависимости средней энергии спина в магнитном поле.

г) Получить выражение для молярной теплоемкости C_v^μ как функции от температуры. Рассмотреть предельные случаи, когда $T \to \infty$ и $T \to 0$.

д) Построить график зависимости C_v^μ от температуры.

О т в е т ы

4.1. а) 4 %

б) $5 \cdot 10^{43}$

4.2. $\frac{N_{3P}}{N_{3S}} = 1.4 \cdot 10^{-4}$

4.3. а) $Z = \frac{e^{-\beta h\nu/2}}{1-e^{-\beta h\nu}}$.

б) $\langle\varepsilon\rangle = h\nu\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{e^{\beta h\nu}-1}\right)$

г) $C_\nu^\mu(T) = R\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 \frac{e^{\frac{h\nu}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}}-1\right)^2}$

4.4. а) $Z = e^{\beta\mu_0 B} + e^{-\beta\mu_0 B}$

б) $\langle\varepsilon\rangle = -\mu_0 B th(\beta\mu_0 B)$

г) $C_\nu^\mu(T) = R\left(\frac{\mu_0 B}{kT}\right)^2 \frac{1}{ch^2\left(\frac{\mu_0 B}{kT}\right)}$.

Семинары 5, 6. Распределение Максвелла

В состоянии теплового равновесия частицы идеального газа имеют различные скорости, которые меняются и результате столкновений. На вопрос какова вероятность того, что частица обладает определенной скоростью, отвечает распределение Максвелла. Оно является частным случаем распределения Гиббса, когда энергия частицы есть только ее кинетическая энергия: $\mathrm{E} = \frac{mV^2}{2}$. В декартовой системе координат, в пространстве скоростей V_x, V_y, V_z, распределение Максвелла имеет следующий вид:

$$d\mathrm{P}(V_x,V_y,V_z) = f(V_x)f(V_y)f(V_z)dV_x dV_y dV_z = \\ = Ae^{-\frac{m(V_x^2+V_y^2+V_z^2)}{2kT}} dV_x dV_y dV_z, \tag{5.1}$$

где m - масса частицы идеального газа. Постоянная A находится из условия нормировки:

$$A = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{5.2}$$

При решении некоторых задач удобно пользоваться распределением Максвелла по отдельным компонентам скоростей:

$$d\mathrm{P}(V_x) = f(V_x)dV_x = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{mV_x^2}{2kT}} dV_x \tag{5.3}$$

– это вероятность того, что значение компоненты скорости V_x частицы лежит в интервале от V_x до $V_x + dV_x$. Аналогичные выражения справедливы для вероятностей $d\mathrm{P}(V_y)$ и $d\mathrm{P}(V_z)$. Примерный вид плотности вероятности $f(V_x)$ приведен на рис.5.1.

В сферической системе координат распределение Максвелла, в случае изотропного пространства, имеет следующий вид:

$$d\mathrm{P}(V) = F(V)dV = 4\pi\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mV^2}{2kT}} V^2 dV. \tag{5.4}$$

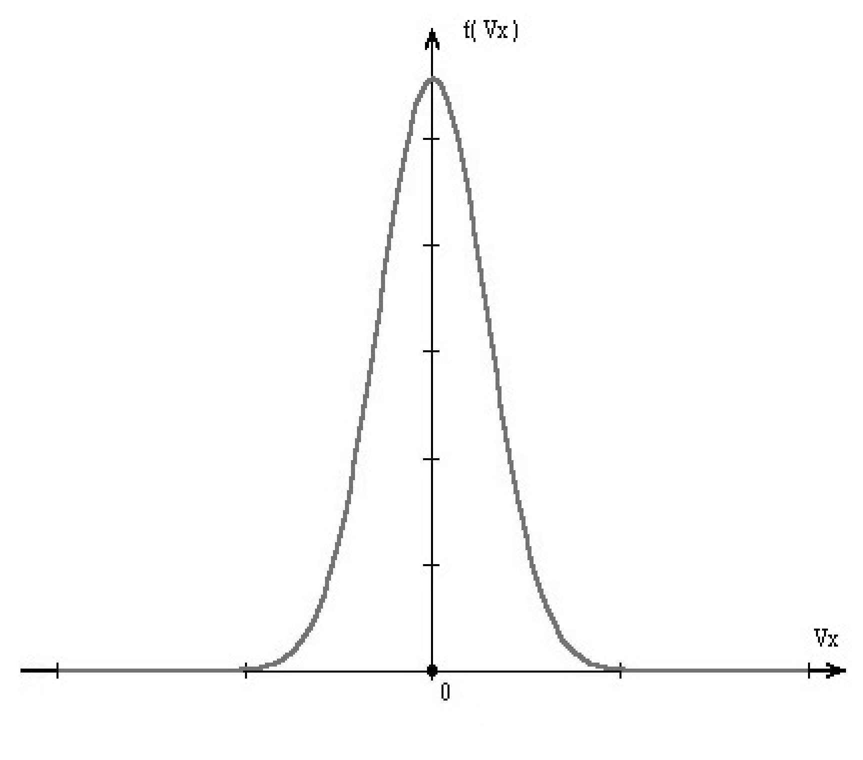
Оно отвечает на вопрос какова вероятность того, что абсолютная скорость частицы лежит в интервале от V до $V + dV$, а также на вопрос, сколько частиц dn из n имеют абсолютную скорость в заданном интервале:

$$dn(V) = nd\mathrm{P}(V). \tag{5.5}$$

Следует отметить, что dn и n – очень большие числа, но $dn << n$. Соответственно, доля частиц, имеющих абсолютную скорость в интервале от V до $V + dV$, равна

$$\frac{dn}{n} = d\mathrm{P}(V) = 4\pi\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} V^2 dV. \tag{5.6}$$

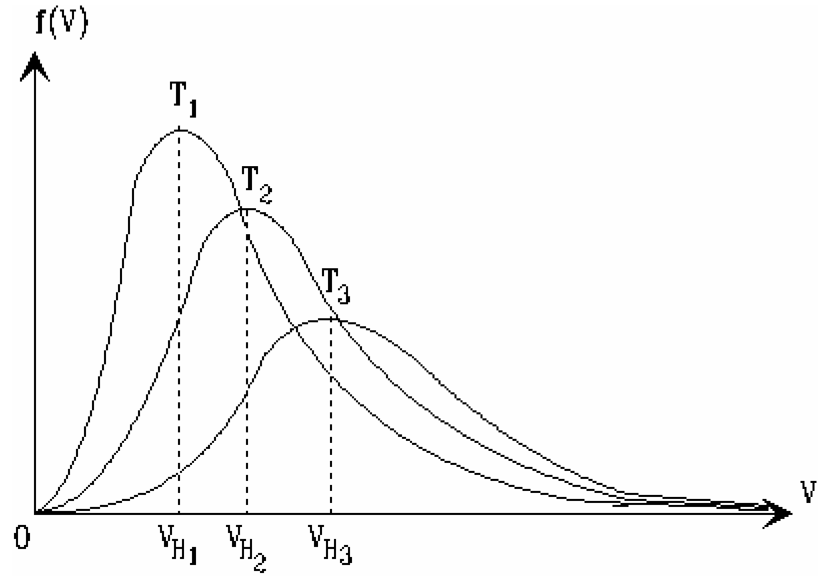
На рис.5.2 приведен примерный вид плотностей вероятности распределения Максвелла для различных температур. Здесь же



показаны наивероятнейшие скорости каждого распределения. Как видно, они растут с увеличением температуры. Их значения можно получить, решая задачу на экстремум функции плотности вероятности:

$$\frac{dF(V)}{dV} = 0\,. \tag{5.7}$$

Приведенные формулы распределения Максвелла позволяют находить средние значения различных микроскопических параметров, зависящих от скорости или ее отдельных компонент, в соответствии с общей процедурой усреднения. Если параметр зависит от абсолютной скорости - $\varphi(V)$, то его среднее значение найдется вычислением интеграла



Среднее значение параметра, зависящего от одной компоненты скорости, вычисляется по формуле

$$\left\langle \varphi(V_x) \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(V_x) f(V_x) dV_x\,. \tag{5.9}$$

В случае, когда параметр зависит от двух или трех компонент скорости, для его усреднения следует использовать распределение (5.1).

Характерными скоростями распределения Максвелла принято называть три величины:

1. Наивероятнейшая скорость - $V_в$.
2. Средняя скорость - $\langle V \rangle$.
3. Средняя квадратичная скорость - $\sqrt{\langle V^2 \rangle}$.

З а д а ч и

5.1. Сколько частиц в моле водорода имеют компоненту скорости в выбранном направлении от 500 м/с до 502 м/с , если температура водорода t= 27°C.

5.2. Исходя из распределения Максвелла, найти следующие величины:

$\langle V_x \rangle$, $\langle V_y^3 \rangle$, $\left\langle \frac{1}{V_z} \right\rangle$.

5.3. Получить выражение для среднего квадрата x-компоненты скорости молекулы газа. Найти среднюю кинетическую энергию, приходящуюся на одну степень свободы поступательного движения молекулы газа.

5.4. Используя распределение Максвелла по одной компоненте скорости, получить выражение для давления на стенку сосуда.

5.5. Найти отношение числа молекул водорода $\frac{n_1}{n_2}$, если температура водорода 300°C: а) число частиц n_1 имеют скорости от 3000 м/с до 3010 м/с, а n_2 - в пределах от 1500 м/с до 1510 м/с; б) для n_1 интервал скоростей от 3000 м/с до 4000 м/с, для n_2 – от 2000 м/с до 3000 м/с.

5.6. Получить выражения для трех характерных скоростей распределения Максвелла.

5.7. Найти среднее значение обратной величины скорости молекулы в газе.

5.8. Написать выражение для среднего числа dn молекул газа, кинетические энергии которых заключены между E и dE .

5.9. Найти наивероятнейшее значение кинетической энергии E поступательного движения молекул газа, т.е. такое значение E_m, при котором в фиксированный интервал энергии dE в газе находится максимальное число молекул.

5.10. Показать, что если за единицу скорости молекул газа принять наиболее вероятную скорость, то число молекул, абсолютные значения скоростей которых лежат между V и $V+dV$, не будет зависеть от температуры газа.

5.11. Найти среднее число молекул, компоненты скорости которых, параллельные некоторой оси, лежат в интервале $(V_{II}, V_{II} + dV_{II})$, а абсолютные значения перпендикулярной составляющей скорости заключены между $V_\perp$ и $V_\perp + dV_\perp$.

5.12. Выразить число молекул Z, сталкивающихся с участком поверхности сосуда площадью 1 м^2 за одну секунду, через среднюю скорость движения газовых молекул, если функция распределения по скоростям изотропна (т.е. зависит только от абсолютного значения скорости молекулы, но не от ее направления). Рассмотреть случай максвелловского распределения.

5.13. Найти полную кинетическую энергию Е молекул одноатомного газа, ударяющихся о квадратный сантиметр стенки в единицу времени. Задачу решить сначала в общем виде для изотропной функции распределения, а затем применить результат к частному случаю максвелловского распределения.

О т в е т ы

5.1. $dn = N_A \left(\frac{\mu_{H_2}}{2\pi RT} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\mu V^2}{2RT}} dV$, подставив данные

$N_A = 6{,}022 \cdot 10^{23}\, моль^{-1}$ (постоянная Авогадро), $\mu_{H_2} = 2 \cdot 10^{-3}\, кг$, T=300K, V=500 м/с, dV =2 м/с, R=8,31 $\frac{Дж}{моль \cdot K}$, получаем $dn = 3{,}6 \cdot 10^{-4} N_A = 2{,}2 \cdot 10^{20}$.

5.2. Значения всех величин равны нулю.

5.3. $\left\langle V_x^2 \right\rangle = \frac{kT}{m}; \left\langle \frac{mV_x^2}{2} \right\rangle = \frac{kT}{2}$.

5.4. $p = 2n_0 \left\langle \frac{mV_x^2}{2} \right\rangle = n_0 kT$, n_0 – концентрация идеального газа.

5.5. а) $\frac{n_1}{n_2} = \frac{V_1^2}{V_2^2} e^{\frac{\mu\left(V_2^2 - V_1^2\right)}{2RT}} = 0{,}98$, б) $\frac{n_1}{n_2} = \frac{\int_{V_1}^{V_2} e^{-\frac{\mu V^2}{2RT}} V^2 dV}{\int_{V_3}^{V_4} e^{-\frac{\mu V^2}{2RT}} V^2 dV} = 0{,}577$.

5.6. $V_{нв} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$, $\langle V \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$, $\sqrt{\left\langle V^2 \right\rangle} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$.

5.7. $\left\langle \frac{1}{V} \right\rangle = \sqrt{\frac{2m}{\pi kT}} = \frac{4}{\pi \langle V \rangle}$.

5.8. $dn = 2\pi n (\pi kT)^{-\frac{3}{2}} \sqrt{\mathrm{E}} e^{-\frac{\mathrm{E}}{kT}} d\mathrm{E}$.

5.9. $\mathrm{E}_m = \frac{kT}{2}$.

5.10. $dP(v^*) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} e^{-v^*} v^{*2} dv^*$

5.11. $dn = 2\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\mathrm{E}}{kT}} V_\perp dV_\perp dV_{II}$.

5.12. $z = \frac{n_0}{4} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = n_0 \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}}$.

5.13. Для изотропного распределения $\mathrm{E} = \frac{1}{8} m n_0 \left\langle V^3 \right\rangle$.

Для распределения Максвелла $\mathrm{E} = n \sqrt{\frac{2k^3 T^3}{\pi m}} = \frac{\pi n_0 m}{16} \langle V \rangle^{3}$.

Семинар 7. Распределение Больцмана

Если идеальный газ находится в силовом поле, то его состояние может быть нестационарным, неравновесным. Тогда распределение Гиббса для него неприменимо. Только некоторые потенциальные поля приводят молекулярную систему к тепловому равновесию и стационарному распределению частиц в пространстве. Такими полями являются однородное гравитационное поле, поле центробежных сил и электростатическое поле. В этих трех случаях распределение Гиббса применимо. Т.к. потенциальная энергия частицы не зависит от ее скорости, а кинетическая энергия не зависит от координаты частицы, то можно рассматривать распределение по скоростям и по координатам отдельно. Распределение частиц по скоростям описывается распределением Максвелла, а пространственное распределение частиц описывается распределением Больцмана. В общем случае, если потенциальная энергия частицы зависит от трех координат - $\varepsilon_p(x, y, z)$, то распределение Больцмана имеет следующий вид:

$$dP(\varepsilon(x, y, z)) \equiv dP(x, y, z) = Ae^{-\frac{\varepsilon_p(x,y,z)}{kT}} d\varepsilon(x, y, z) \quad (7.1).$$

В однородном гравитационном поле(g=const) потенциальная энергия частицы равна $\varepsilon_p = mgz$ и распределение Больцмана записывается:

$$dP(z) = Ae^{-\frac{mgz}{kT}} dz. \quad (7.2)$$

На основании того, что $dP(z) = \frac{dn(z)}{n}$, из (7.2) получается выражение для пространственной концентрации частиц n_0 как функции от высоты z:

$$n_0(z) = n_0(0)e^{-\frac{mgz}{kT}} = n_0(0)e^{-\frac{\mu gz}{RT}}, \qquad (7.3)$$

где $n_0(z)$ – концентрация частиц на высоте z, $n_0(0)$ - концентрация на высоте, где потенциальная энергия равна нулю, $\mu = N_A m$ – молярная масса газа, R=8,314 Дж/(моль·К) (универсальная газовая постоянная). Выражение для $n_0(0)$ может быть получено из условия сохранения количества частиц в газовом столбе высотой H и площадью сечения $S = 1\ м^2$:

$$n = \int_0^H dn = \int_0^H n_0(z)dz = n_0(0)\int_0^H e^{-\frac{\mu gz}{RT}}dz,$$

$$n_0(0) = \frac{n}{\int_0^H e^{-\frac{\mu gz}{RT}}dz}. \qquad (7.4)$$

В поле центробежных сил, например, во вращающейся с угловой скоростью ϖ центрифуге, $\varepsilon_p = -\frac{m\varpi^2 r^2}{2}$ – потенциальная энергия молекулы зависит от ее удаленности r от оси вращения. В этом случае пространственная концентрация определяется следующим образом:

$$n_0(r) = n_0(0)e^{\frac{m\omega^2 r^2}{2KT}}, \qquad (7.5)$$

где $n_0(0)$ – концентрация частиц на оси вращающегося цилиндра. Значение этой величины можно получить из условия сохранения полного числа частиц в объеме V_0 цилиндра радиуса R и высоты H.

$$n = \int_{V_0} dn = \int_{V_0} n_0(r)dV(r) = const. \qquad (7.6)$$

Так как $dV(r) = 2\pi rHdr$, то выражение (7.6) примет вид

$$n = n_0(0)\int_0^R He^{\frac{m\varpi^2 r^2}{2KT}} 2\pi rdr, \qquad (7.7)$$

отсюда получается выражение для $n_0(0)$:

$$n_0(0) = \frac{n}{\int_0^R He^{\frac{m\varpi^2 r^2}{2KT}} 2\pi rdr}. \qquad (7.8)$$

З а д а ч и

7.1. Для определения числа Авогадро Перрен измерял распределение по высоте шарообразных частиц гуммигута, взвешенных в воде. Он нашел, что отношение α числа частиц в слоях, отстоящих друг от друга на расстояние l=30 мкм, равно 2,08. Плотности частиц ρ= 1,194 г/$см^3$, воды ρ_0 =1 г/$см^3$. Радиусы частиц r = 0,212 мкм. На основании этих данных вычислить число Авогадро. Температура воды t=18°C.

7.2. Методом статистической суммы найти среднюю потенциальную энергию молекулы воздуха в идеальной атмосфере (*g=const, T=const* на любой высоте). Вычислить молярную теплоемкость газа C^μ. Считать, что молекулам газа доступна высота от нуля до бесконечности.

7.3. В теплоизолированный цилиндрический сосуд высоты H помещен моль идеального газа с относительной молекулярной массой μ. Цилиндр подвешен в вертикальном положении в однородном поле тяжести. Температура газа в сосуде везде одинакова и равна *T*. Найти среднюю потенциальную энергию молекулы газа $\langle \varepsilon_{пот} \rangle$, теплоемкость этого газа, учитывая влияние поля тяжести и предполагая, что $\mu nH << RT$.

7.4. Для определения относительных молекулярных масс коллоидальных частиц исследуют распределение их концентрации в поле центробежной силы, возникающей при вращении центрифуги. Найти относительную молекулярную массу μ коллоидальных частиц, если известно, что отношение их концентраций в местах, расположенных от оси центрифуги на расстояниях r_2 и r_1, равно α. Плотности частиц - ρ, растворителя - ρ_0. Угловая скорость вращения центрифуги ω.

7.5. Найти зависимость концентрации газа $n_0(0)$ на оси вращения центрифуги от ее угловой скорости ω. Построить примерный график.

7.6. Цилиндр радиуса R и длины H, наполненный химически однородным газом, равномерно вращается в однородном поле тяжести вокруг своей геометрической оси с угловой скоростью ω. Найти распределение молекул газа $dN(z,r)$ внутри цилиндра, если его ось направлена вертикально.

О т в е т ы

7.1. $$N_A = \frac{RT\ln\alpha}{\frac{4}{3}\pi r^3(\rho-\rho_0)gl} = 6{,}5\cdot 10^{23}.$$

7.2. $\langle\varepsilon_{пот}\rangle = kT,\quad C^{\mu} = C^{\mu}{}_{p},$

7.3. $$\langle\varepsilon_{пот}\rangle = \frac{1-\left(1+\frac{mgH}{KT}\right)\exp\{-\frac{mgH}{KT}\}}{1-\exp\{-\frac{mgH}{KT}\}}KT,$$

$$C^{\mu} = C^{\mu}{}_{v} + \frac{R}{12}\left(\frac{\mu gH}{RT}\right)^2.$$

7.4. $$\mu = \frac{2RT\rho\ln\alpha}{\varpi^2(\rho-\rho_0)(r_2^2-r_1^2)}.$$

7.6. Число молекул dN с координатами между r и $r+dr$, z и $z+dz$ равно

$$dN = \frac{Ng\left(\frac{m\omega}{kT}\right)^2\exp\{\frac{m\omega^2r^2}{2kT}\}rdr\exp\{-\frac{mgz}{kT}\}dz}{\left(1-\exp\{-\frac{mgH}{kT}\}\right)\left(\exp\{\frac{m\omega^2R^2}{2kT}\}-1\right)},$$

где N- общее число молекул в сосуде.

Семинар 8. Равнораспределение энергии по степеням свободы. Теплоемкость многоатомных идеальных газов и твердых тел. Броуновское движение

Число степеней свободы - это число независимых переменных, которыми определяется состояние системы. Для того чтобы полностью охарактеризовать состояние материальной точки в некоторый момент времени, необходимо задать три координаты. Для описания состояния многоатомной молекулы, содержащей N атомов, необходимо задать $3N$ чисел, т.е.

$$i = 3N. \tag{8.1}$$

Это полное число механических степеней свободы многоатомной системы. В молекулярной физике используют понятие статистических степеней свободы. Их число для многоатомной молекулы больше, чем число механических степеней свободы и может быть выражено через последнее. Число статистических степеней свободы равно числу квадратичных форм типа $\frac{mv_x^2}{2}$, с помощью которых записывают энергию многоатомной молекулы. Различают поступательные ($i_{пост}$), вращательные ($i_{вр}$) и колебательные ($i_{кол}$) степени свободы. Максимальное число статистических степеней свободы многоатомной молекулы определяют следующим образом:

$$i^* = i_{пост} + i_{вр} + 2i_{кол}\,, \quad i_{кол} = i - i_{пост} - i_{вр}\,, \qquad (8.2)$$

$i_{пост}$=3, соответствующая энергия - $\varepsilon_{пост} = \dfrac{mv_x^2}{2} + \dfrac{mv_y^2}{2} + \dfrac{mv_z^2}{2}$:

$i_{вр}$ = 2 (для линейной молекулы), 3 (для нелинейной молекулы), соответствующая энергия – $\varepsilon_{вр} = \dfrac{I_{xx}\omega_x^2}{2} + \dfrac{I_{yy}\omega_y^2}{2} + \dfrac{I_{zz}\omega_z^2}{2}$. Энергия одномерного колебания включает в себя кинетическую и потенциальную составляющие: $\varepsilon_{кол} = \dfrac{mv_{кол}^2}{2} + \dfrac{kx_{кол}{}^2}{2}$.

На каждую степень свободы статистической системы приходится одна и та же средняя энергия, равная $\dfrac{1}{2}kT$. Средняя энергия многоатомной молекулы в целом равна

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{i^*}{2}kT\,. \qquad (8.3)$$

При сообщении системе в некотором процессе α теплоты dQ ее температура изменяется на dT. Величина, равная $\left(\dfrac{dQ}{dT}\right)_\alpha$, называется теплоемкостью. Теплоемкость единицы массы вещества называется удельной ($C_\alpha{}^{уд}$), а одного моля – молярной (C_α^μ). Молярные теплоемкости идеального газа при постоянном объеме и давлении C_v^μ, C_p^μ связаны соотношением

$$C_p^\mu = C_v^\mu + R\,. \qquad (8.4)$$

Молярная теплоемкость при постоянном объеме определена как

$$C_v^\mu = \left(\frac{dU^\mu}{dT}\right)_V, \qquad (8.5)$$

учитывая, что $U^\mu = N_A\langle\varepsilon\rangle = N_A\, kT\dfrac{i^*}{2} = \dfrac{i^*}{2}RT$, выражение

принимает вид

$$C_v^\mu = \frac{i^*}{2}R\,. \qquad (8.6)$$

Для идеальных твердых тел $i^* = 2i_{кол} = 6N$, согласно (8.2), так как $i_{пост} = 0$, $i_{вр} = 0$. Кроме того,

$$C_v^\mu = C_p^\mu = C^\mu\,. \qquad (8.7)$$

В случае моноатомных твердых тел, т.е. состоящих из одного сорта атомов, например, металлов

$$C^\mu = 3R\,, \qquad (8.8)$$

что соответствует закону Дюлонга-Пти. Для многокомпонентных кристаллов C^μ различны и определяются формулой (8.6).

Достаточно мелкие частицы вещества, являющиеся, тем не менее, макроскопическими, т.е. состоящими из большого числа молекул, взвешенные в жидкости или газе, находятся в хаотическом непрерывном движении или дрожании. Такое движение называют броуновским.

Поскольку энергия броуновской частицы много меньше энергии молекул окружающей среды, и вся система находится в термодинамическом равновесии, то на каждую степень свободы броуновской частицы приходится одна и та же средняя величина энергии, равная $\dfrac{1}{2}kT$. Различают поступательное и вращательное броуновское движение. Вращательное броуновское движение играет большую роль в измерительных приборах, накладывает определенные ограничения на максимально достижимую точность измерений реакции прибора на внешние воздействия.

З а д а ч и

8.1. Найти суммарную кинетическую энергию E_k теплового движения всех молекул кислорода O_2, занимающих объем V =

5,5 л при давлении p = 2 атм. Считать что температура газа настолько низка, что колебания атомов в молекулах еще не возбуждены, а вращения возбуждены полностью.

8.2. Подсчитать по классической теории удельную теплоемкость при постоянном давлении газа следующего молярного состава: $He - 20\,\%$, $H_2 - 30\,\%$, $CH_4 - 50\,\%$. Рассмотреть два случая: а) температура смеси такова, что колебательные степени свободы у молекул водорода не возбуждены, а у молекул метана возбуждены полностью; б) все степени свободы возбуждены.

8.3. Найти значения средней энергии $\overline{E}$,приходящейся, согласно классической теории газов, на одну степень свободы вращательного движения молекулы газа при t = 27°C. Найти значения средней квадратичной частоты вращения молекулы кислорода при этих условиях. Момент инерции молекулы кислорода вокруг оси, перпендикулярной к оси симметрии молекулы, $I_\perp = 19{,}2 \cdot 10^{-40}\, г \cdot см^2$.

8.4. Удельные теплоемкости кобальта и золота соответственно $C_1 = 0{,}104\, кал/(г \cdot C)$ и $C_2 = 0{,}0312 кал/(г \cdot C)$. Определить их атомные теплоемкости C_1 и C_2.

8.5. Определить молярную и удельную теплоемкости соединений: $NaCl$, CaF_2, $KMgF_3$, считая их идеальными твердыми телами.

8.6. Определить удельную теплоемкость при постоянном объеме кислорода при очень высокой температуре, когда он находится в состоянии полностью ионизированной плазмы.

8.7. Зеркальце висит на кварцевой нити, модуль кручения которой равен D. Повороты, вызванные ударами окружающих

молекул газа, можно регистрировать на шкале. Положению покоя соответствует угол поворота φ=0. а) Как изменится средний квадрат угловой скорости $\langle \dot{\varphi}^2 \rangle$, если момент инерции зеркальца увеличить в α раз, температуру воздуха в комнате уменьшить в α раз. б) Как изменится средний квадрат углового отклонения $\langle \varphi^2 \rangle$, если длину и диаметр нити увеличить соответственно в β и γ раз, а температуру воздуха уменьшить в α раз.

Ответы

8.1. К=5/2PV=$2{,}75 \cdot 10^3\, Дж$.

8.2. а) $C_p^{уд} = \dfrac{161}{188} R$,б) $C_p^{уд} = \dfrac{71}{188} R$.

8.3. $E = \dfrac{1}{2} kT = 2{,}1 \cdot 10^{-21}\, Дж$, $\sqrt{\langle \nu^2 \rangle} = 7{,}2 \cdot 10^{11}\, Гц$.

8.4. $C_1 = 25{,}7\, Дж/моль \cdot K$, $C_2 = 25{,}7\, Дж/моль \cdot K$.

8.5. NaCl: $C = 6R$, $CaF_2 : C = 9R$, $KMgF_3 : C = 15R$.

8.6. $C_v^{уд} = \dfrac{27}{32} R$.

8.7.а) Уменьшится в α^2. б) Увеличится в $\beta/\alpha \cdot \gamma^4$ раз.

Семинары 9, 10. Явления переноса

В состоянии термодинамического равновесия макроскопические параметры молекулярной системы не зависят от координат. Если система не изолирована, то макроскопические параметры (давление, температура, концентрация, электрический потенциал и др.) могут меняться от точки к точке. При наличии градиентов этих параметров в системе возникают потоки молекулярных свойств (внутренней энергии, импульса, концентрации), стремящиеся вернуть её в равновесное состояние.

Эти процессы носят название явлений переноса. К ним, в частности, относятся диффузия, теплопроводность, вязкость. В самых простейших случаях эти явления можно описать с помощью одномерных стационарных уравнений переноса.

Уравнение самодиффузии:

$$I_n = -D\frac{dn}{dx}, \tag{9.1}$$

где I_n – плотность потока «меченых» частиц, D – коэффициент самодиффузии, n – концентрация «меченых» частиц.

Уравнение теплопроводности:

$$I_Q = -\kappa\frac{dT}{dx}, \tag{9.2}$$

где I_Q – плотность потока внутренней энергии, κ - коэффициент теплопроводности, T – температура.

Уравнение вязкости:

$$I_{mu} = -\eta\frac{dv}{dx}, \tag{9.3}$$

где I_{mu} – плотность потока импульса, η - коэффициент вязкости, v – скорость слоя газа (жидкости).

Эти уравнения могут быть получены из обобщённого уравнения переноса для газов:

$$I_G = -\frac{1}{3}n_0\langle v\rangle\lambda\frac{dG}{dx}, \tag{9.4}$$

где I_G – поток молекулярного свойства G, n_0 – концентрация, $<v>$ - средняя скорость, λ - средняя длина свободного пробега молекул газа.

Течение газа через трубки описывается уравнениями, имеющими такую же математическую структуру, как и уравнения переноса.

Наиболее важными из них являются

а) течение Пуазейля (для плотного газа $\lambda \ll 2r$), которое описывается уравнением

$$Q = -\frac{\pi\rho r^4}{8\eta}\frac{dP}{dx}, \tag{9.5}$$

где Q – масса ежесекундно протекающего через сечение трубы газа, r – радиус трубы, ρ - плотность газа, η - вязкость, P – давление газа;

б) кнудсеновское течение (для ультраразреженного газа, $\lambda \gg 2r$, через капилляры) описывается уравнением

$$N = \frac{2}{3}r\langle v\rangle S\frac{dn}{dx}, \tag{9.6}$$

где N – поток молекул через сечение трубки S, n – концентрация разреженного газа.

З а д а ч и

9.1. На основе обобщённого уравнения переноса получить зависимость коэффициентов переноса (D, κ, η) от микроскопических и макроскопических параметров системы.

9.2. Для измерения теплопроводности азота им наполнили пространство между двумя длинными коаксиальными цилиндрами, радиусы которых r_1 = 0,5 см и r_2 = 2 см. Внутренний цилиндр равномерно нагревается спиралью, по которой проходит ток силой i = 0,1 А. Сопротивление спирали, приходящееся на единицу длины цилиндра, равно R = 0,1 Ом. Внешний цилиндр поддерживается при температуре t_2 = 0°C. При установившемся процессе оказалось, что температура первого цилиндра t_1 = 93°C. Найти газокинетический диаметр молекулы азота. Давление газа таково, что конвекцией можно пренебречь.

9.3. Пользуясь полученной в задаче 9.1. зависимостью κ(T), найти стационарное распределение температуры в плоско-параллельном слое газа толщины l, на границах которого поддерживаются постоянные температуры T_1 и T_2. Нагревание производят таким образом, что конвекции не возникает. Найти также стационарное распределение температуры для сферического и цилиндрического слоёв.

9.4. Через тонкую трубку *($\lambda >> 2r$)* течёт ультраразреженный газ. Оценить число молекул N, ежесекундно проходящих через поперечное сечение трубки длины l, если на одном её конце концентрация молекул n_1, а на другом – n_2. Течение считать изотермическим.

9.5. Определить, на какой угол φ повернётся диск, подвешенный на упругой нити, если под ним на расстоянии h = 1 см. вращается второй такой же диск с угловой скоростью ω = 50 рад/с. Радиус дисков R = 10 см, модуль кручения нити f = 100 дин·с/см. Краевыми эффектами пренебречь. Движение воздуха между дисками считать ламинарным.

9.6. Решить предыдущую задачу в предположении, что диски помещены в сильно разреженный воздух с $P = 10^{-4}$мм.рт.ст., когда λ молекул воздуха велика по сравнению с расстоянием между дисками. Для упрощения расчёта считать, что все молекулы движутся с одинаковыми по абсолютному значению скоростями, равными средней скорости молекул воздуха V = 450 м/с.

9.7. Определить расход массы газа Q при стационарном изотермическом пуазейлевом течении его вдоль цилиндрической трубы длины l и радиуса r, на концах которой поддерживается давление P_1 и P_2 *($P_1 > P_2$)*.

9.8. Для определения вязкости η углекислого газа им наполнили колбу с объёмом V = 1 л при давлении P_1 = 1600 мм.рт.ст. Затем открыли кран, позволяющий CO_2 вытекать из сосуда через капилляр длиною l = 10 см и диаметром D = 0,1 мм. Через время τ = 22 мин давление в колбе понизилось до P_3 = 1350 мм.рт.ст. Вычислить из этих данных η и газокинетический диаметр молекулы CO_2. Атмосферное давление P_2 = 735 мм. рт. ст. Процесс считать изотермическим при температуре 15°C.

О т в е т ы

9.1. $D = \frac{1}{3}\langle v\rangle\lambda,\ \kappa = \frac{1}{3}\rho\langle v\rangle\lambda C_v^{уд},\ \eta = \frac{1}{3}\rho\langle v\rangle\lambda$.

9.2. $d = \left(\dfrac{c_v m v\sqrt{2}(t_1 - t_2)}{0.72 i^2 R \ln(r_1/r_2)}\right)^{\frac{1}{2}} = 2.3\cdot10^{-10}\,м$.

9.3. $\chi \approx T^{\frac{1}{2}}$,

для плоскопараллельного слоя $T^{\frac{3}{2}} = T_1^{\frac{3}{2}} + \dfrac{T_2^{\frac{3}{2}} - T_1^{\frac{3}{2}}}{l}x$,

для сферического слоя $T_R^{\frac{3}{2}} = \dfrac{T_2^{\frac{3}{2}} - T_1^{\frac{3}{2}}}{R_1 - R_2}\dfrac{R_1R_2}{R} + \dfrac{T_1^{\frac{3}{2}}R_1 - T_2^{\frac{3}{2}}R_2}{R_1 - R_2}$,

для цилиндрического слоя $T_R^{\frac{3}{2}} = T_1^{\frac{3}{2}} - \dfrac{T_1^{\frac{3}{2}} - T_2^{\frac{3}{2}}}{\ln\left(\dfrac{R_2}{R_1}\right)}\ln\left(\dfrac{R}{R_1}\right)$.

9.4. $N = \frac{2}{3}\frac{n}{l}\pi\langle v\rangle r^3$.

9.5. $\varphi = \dfrac{\pi\eta\omega R^4}{2fh} = 81^0$.

9.6. $\varphi = \dfrac{3\pi p}{8vf}\omega R^4 = \dfrac{3}{4}\dfrac{ph}{\eta v}\varphi \approx 1^0$.

9.7. $Q = \dfrac{\pi\mu r^4}{16\eta RT}\dfrac{p_1^2 - p_2^2}{l}$.

9.8. $\eta = \dfrac{\pi p_2 D^4 \tau}{128 l V}\left[\ln\dfrac{(p_1 - p_2)(p_2 + p_3)}{(p_3 - p_2)(p_1 + p_2)}\right]^{-1} \approx 14\cdot 10^{-5}\,\dfrac{Н\cdot с}{м^2}$,

$$d = \left(\frac{mv}{3\sqrt{2}\pi\eta}\right)^{1/2} = 3.8\cdot 10^{-10}\,м.$$

Справочный материал

Постоянная Планка $h = 6.62\cdot 10^{-34}\,Дж\cdot с$.

Масса электрона $m_e = 9.10\cdot 10^{-31}\,кг$.

Заряд электрона $q_e = 1.60\cdot 10^{-19}\,Кл$.

Число Авогадро $N_A = 6.02\cdot 10^{23}\,моль^{-1}$.

Постоянная Больцмана $к = 1.38\cdot 10^{-23}\,Дж\cdot К^{-1}$.

Универсальная газовая постоянная $R = 8.31 Дж\cdot моль^{-1}\cdot К^{-1}$.

Объем моля идеального газа при нормальных условиях $V_m = 22.41\cdot 10^{-3}\,м^3\cdot моль^{-1}$.

Постоянная Лошмидта (число молекул в одном кубическом метре вещества, находящегося в состоянии идеального газа при нормальных условиях) $N_л = 2.69\cdot 10^{25}\,м^{-3}$.

$1эВ = 1.6\cdot 10^{-19}\,Дж$

$1кал = 4.18 Дж$

1. $\int_0^\infty e^{-\alpha x^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ (интеграл Пуассона)

2. $\int_0^\infty xe^{-x}dx = 1$

Список литературы

1. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. – М.: Высш. шк., 2000.
2. Иродов И.Е. Задачи по общей физике. – М.: Бином, 1998.
3. Матвеев А.Н. Молекулярная физика. – М.: Высш. шк., 1987.
4. Москвич О.И., Бомбенко О.Н. Общая физика. Молекулярная физика: Структурированный конспект лекций. Ч.1. – Красноярск, РИС КрасГУ, 2006.
5. Рейф Ф. Статистическая физика. Берклеевский курс физики. Т.5. – М.: Наука, 1986.
6. Сборник задач по общему курсу физики. Термодинамика и молекулярная физика. /Под ред. Д.В.Сивухина. – М.: Наука, 1976.
7. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т.2. – М.: Наука, 1979.

О г л а в л е н и е

Общая физика. Молекулярная физика

Составители Ольга Ивановна Москвич,
Оксана Юрьевна Селиверстова

Редактор И.А.Вейсиг
Оригинал-макет Г.В. Казанцевой

Тиражируется на электронных носителях
Заказ 471

Дата выхода 02.04.07

Адрес в Internet: www.lan.krasu.ru/studies/editions

Отдел информационных ресурсов
управления информатизации КрасГУ
660041 г. Красноярск, пр. Свободный, 79, ауд. 22-05,
e-mail: info@lan.krasu.ru

Издательский центр Красноярского государственного университета
660041 г. Красноярск, пр. Свободный, 79, e-mail: rio@lan.krasu.ru