

# Билеты по физике

Толстомятов А.А.

## Историческое введение. Динамический, термодинамический и статистический методы описания систем большого числа частиц.

### Древние идеи

Первые предположения о дискретном строении вещества возникли в глубокой древности. Их высказывали древнегреческие философы *Левкипп* и *Демокрит*, которые утверждали, что вселенная состоит из атомов и пустот.

### XVII век

В XVII веке идеи о дискретном строении вещества возродил *П. Гассенди*. В 1660 году *Р. Бойль* выполнил опыты по сжимаемости газов и предложил объяснение наблюдаемых свойств на основе представления о мельчайших частицах — молекулах.

### XIX век

В XVIII–XIX веках молекулярная теория строения вещества была развита в работах *М. В. Ломоносова*, *Дж. Джоуля*, *Р. Клаузиуса*, *Дж. К. Максвелла* и *Л. Больцмана*.

Они заложили основы молекулярно-кинетической теории, которая объясняет строение и свойства тел на основе закономерностей движения и взаимодействия молекул.

### Современная молекулярная физика

В начале XX века молекулярная физика вступила в новый этап развития. В работах *Ж. Перрена* и *Т. Сведберга*, *М. Смолуховского* и *А. Эйнштейна*, посвящённых броуновскому движению

микрочастиц, были получены доказательства реальности существования молекул.

## **Статистический метод описания систем частиц**

Статистический метод описания систем с большим числом частиц — это фундаментальный подход, который позволяет предсказывать макроскопические свойства вещества (давление  $P$ , температуру  $T$ , объем  $V$ , теплоемкость, энтропию и т.д.) на основе микроскопического строения (свойств атомов, молекул) и законов их движения, не отслеживая каждую частицу в отдельности.

### **Концепции метода**

Фазовое пространство ( $\Gamma$ -пространство) - это воображаемое многомерное пространство, по осям которого откладываются все обобщенные координаты  $(q_1, q_2, \dots, q_{3N})$  и все обобщенные импульсы  $(p_1, p_2, \dots, p_{3N})$  всех  $N$  частиц системы. Каждая точка в этом  $6N$ -мерном пространстве (микроточка) полностью описывает микросостояние всей системы в данный момент.

**Микросостояние** Полное описание системы в данный момент времени через координаты и импульсы всех ее частиц. Соответствует одной точке в фазовом пространстве.

**Макросостояние** Описание системы через небольшое число макроскопических параметров  $E, V, N, P, T \dots$

Одному макросостоянию соответствует огромное число  $\Omega$  микросостояний, совместимых с заданными  $E, V, N$ .

**Статистический ансамбль** - это мысленная совокупность огромного числа идентичных копий данной физической системы, находящихся в одинаковых макроскопических условиях (одинаковые  $E, V, N$  или  $T, V, N$  и т.д.), но, возможно, в разных микросостояниях. Ансамбль представляет все возможные способы, которыми система может реализовать свое макросостояние.

Статический метод использует функции распределения. Например использует среднюю квадратическую скорость распределения молекул:

$$V_{\text{mid}}^2 = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N$$

Или импульсные характеристики определяющиеся как

$$p = \frac{n}{3} m V_{\text{mid}}^2, n := \frac{dN}{d\vec{v}}$$

Основной постулат (Эргодическая гипотеза - в упрощенной форме):

### **Эргодическая гипотеза**

Среднее по времени от некоторой величины для одной системы, наблюдаемой в течение достаточно длительного периода, равно среднему значению этой же величины по всем микросостояниям соответствующего статистического ансамбля в данный момент времени. Это позволяет заменить невероятно сложное усреднение по времени на статистическое усреднение по ансамблю.

### **Статический Метод позволяет рассчитывать**

- Уравнение состояния  $P, V, T$  (например, вывод уравнения Клапейрона-Менделеева для идеального газа, уравнений Ван-дер-Ваальса для реального газа).
- Теплостойкость -  $C_v, C_p$  для газов, твердых тел (модель Эйнштейна, Дебая).
- Распределение частиц по энергиям, скоростям, координатам.
- Термодинамические потенциалы, Внутреннюю энергию  $U$ , энтропия  $S$ , свободная энергия  $F$ , Гиббса  $G$ .
- Условия фазовых переходов и свойства фаз.

- Явления переноса (в рамках неравновесной статистики): коэффициенты вязкости, теплопроводности, диффузии.

## **Динамический метод описания систем большого числа частиц**

Вместо статистического усреднения по ансамблю состояний, динамический метод прямо решает уравнения движения (как правило, классические уравнения Ньютона) для каждой частицы в системе (атома, молекулы) на протяжении определенного интервала времени.

*Цель метода — это получение траектории всех частиц и, анализируя их, вычисление интересных свойств системы.*

### **Детали работы динамического метода**

1. Задание начальных условий
2. Разрешение дифференциальных уравнений движения
3. Управление температурой и давлением
4. Прогон системы

Задание начальных условий:

- Установка системы отсчета в трехмерном пространстве. (Устанавливаются начальные координаты  $(x_0; y_0; z_0)$ )
- Установка направлений. (Устанавливаются направления скорости или импульса исследуемого тела:  $\vec{v} = \{x, y, z\}$  или  $\vec{p} = m\vec{v}$ )

Решение дифференциальных уравнений:

- Для каждой частицы  $i$  с массой  $m_i$  решается уравнение Ньютона:

$$F_i = m_i a_i = m_i \cdot \frac{d^2 r_i}{dt^2}$$

.

- Сила  $F_i$  вычисляется как сумма сил от всех других частиц  $j$  в системе:

$$F_i = -S_j(\nabla(V(r_{i,j})))$$

Градиент потенциала  $\nabla(V(r_{i,j}))$  дает силу, действующую на  $i$  от  $j$ .

- Алгоритмы интегрирования решают дифференциальные уравнения движения численно, с дискретным шагом по времени  $\Delta t$  (фемтосекунды,  $10^{-15}$  с).

## **Масса и размеры молекулы. Число Авогадро. Молярная масса. Потенциальная энергия взаимодействия молекул.**

*Масса и размеры молекулы –*

*Число Авогадро – это величина, численно равная количеству структурных единиц в 1 моле вещества.*

$$n_A = 6.02214076 \cdot 10^{23} \text{ [моль]}$$

Встречается в молекулярной физике число Авогадро в определении константы Больцмана

$$R = kN_A$$

*Молярная масса – отношение массы вещества к его количеству. Численно равна массе одного моля вещества.*

$$M = \left[ \frac{\text{кг}}{\text{моль}} \right]$$

## Потенциальная энергия взаимодействия молекул

## Давление газа на стенку сосуда.

## Основное уравнение молекулярно-кинетической теории идеального газа.

### Вывод Основного уравнения МКТ

Рассмотрим удар молекулы о стенку сосуда. Изменение импульса молекулы при упругом ударе о стенку:  $\Delta p = 2mv_x$  (если стенка перпендикулярна оси  $x$ ).

Сила, действующая на стенку со стороны одной молекулы:

$$F_i = \frac{\Delta p}{\Delta t} = \frac{2mv_x}{2\frac{L}{v_x}} = \frac{mv_x^2}{L}$$

где  $L$  — размер сосуда в направлении  $x$ . Это будет Время между ударами одной молекулы о одну и ту же стенку)

$$\Delta t = 2\frac{L}{v_x}$$

Тогда, полная сила от всех молекул определяется

$$F = \sum_{i=1}^N m \frac{v_{xi}^2}{L}$$

Давление определяется отношением вектора силы к площади поверхности:

$$P = \frac{F}{S} = \frac{F}{L^2}$$

Замена переменных

$$P = \left( \frac{1}{L^3} \right) \cdot \sum_{i=1}^N m v_{xi}^2 = \left( \frac{m}{V} \right) \cdot \sum v_{xi}^2, \text{ где } V = L^3$$

$$\sum_{i=1}^N v_{xi}^2 = N \cdot \langle v_x^2 \rangle$$

В данном случае  $\langle v_x^2 \rangle$  — средний квадрат проекции скорости.

В рассматриваемой системе движение хаотичное, соответственно уравнение скоростей будет определено следующим образом:

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \frac{\langle v^2 \rangle}{3}$$

.

Получаем:

$$P = \left( \frac{m}{V} \right) \cdot N \cdot \frac{\langle v^2 \rangle}{3} = \left( \frac{1}{3} \right) \cdot \left( N \frac{m}{V} \right) \cdot \langle v^2 \rangle$$

Учитывая, что  $\frac{Nm}{V} = \rho = \frac{M}{V}$ , а также что  $n = \frac{N}{V}$  — концентрация, можно записать уравнение в следующем виде:

$$P = \frac{1}{3} n m \langle v^2 \rangle$$

**Состояние термодинамического равновесия.**  
**Термодинамические параметры. Термометр.**  
**Температура, температурные шкалы:**  
**Цельсия, Кельвина, Реомюра, Фаренгейта.**

## Температура

*Температура — это мера средней кинетической энергии поступательного движения молекул*

## **Состояние термодинамического равновесия**

*Состояние термодинамического равновесия (равновесное состояние) — состояние термодинамической системы, в котором макроскопические параметры системы (температура, давление, объём, энтропия) не изменяются во времени при условии изоляции от окружающей среды.*

Изолированная система самопроизвольно приходит в состояние термодинамического равновесия через достаточно большой промежуток времени.

Переход в состояние равновесия называется релаксацией.

### **Свойства**

- В системе отсутствуют потоки энергии, вещества, импульса.
- Достигнуто равновесие во всех химических реакциях: скорость каждой реакции в прямом направлении сравнялась со скоростью обратной.
- Величины, которые не фиксируют заданные условия, могут испытывать малые колебания относительно своих средних значений (флуктуации).

остальное хз

## **Уравнение Клайперона - Менделеева. Законы Бойля-Мариотта, Гей-Люссака, Шарля. Парциальное давление, закон Дальтона**

### **Вывод уравнения Менделеева-Клапейрона через уравнение МКТ**

Основное уравнение МКТ было выведено в предыдущем билете. Здесь рассматривается его одна из форм



$$P = \frac{1}{3} n m_0 \langle v^2 \rangle = \frac{2}{3} \frac{m_0 \langle v^2 \rangle}{2} = \frac{2}{3} n \langle E_k \rangle$$

Рассматривая среднюю кинетическую энергию, необходимо определить понятие температуры газа.

$$P = \frac{2}{3} n \frac{3}{2} k_B T = n k_B T$$

Необходимо перейти к количеству вещества от концентрации. В данном уравнении  $n$  подразумевает собой концентрацию частиц.

$$n = \frac{N}{V} = \frac{\nu N_A}{V} \Rightarrow P = \frac{\nu N_A}{V} k_B T$$

Из предыдущем билете было написано, что постоянная Больцмана определяется произведением числа Авогадро на число степеней свободы

$$R = k N_A \Rightarrow P = \frac{\nu (N_A k_B)}{V} T = P = \frac{\nu R}{V} T$$

Остается только переставить компоненты в канонический вид:

$$PV = \nu RT$$

## Основные газовые Законы

### Закон Бойля-Мариотта (Изотермический процесс)

Закон Бойля-Мариотта утверждает, что при фиксированной температуре соотношение давлений и объемов газа в разных состояниях одинаково

$$P_1 V_1 = P_2 V_2 (T = \text{const})$$

### Закон Гей-Люссака (Изобарный процесс)

Закон Гей-Люссака утверждает, что при фиксированном давлении газа отношение характеристик разных состояний одинаковы

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2} (P = \text{const})$$

### **Закон Шарля (Изохорный процесс)**

Закон Шарля утверждает, что при фиксированном объеме газа, отношение характеристик одинаковы

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2} (V = \text{const})$$