Véletlen fizikai folyamatok

3. beadandó

Márton Tamás

PJF19C
martontamas@caesar.elte.hu

1. feladat

Feladat leírás.

Határozzuk meg, hogy egy szobahőmérsékleten levő, ideálisnak tekinthető gázban mennyi idő alatt jut el a záptojásszagot okozó H_2S molekula a szoba egyik végéből a másikba tisztán diffúziv mozgással. Ahol a kinetikus elmélet a gázok diffúziós együtthatójára a következő kifejezést adja a molekulák szabad úthosszán (l) és az átlagos sebességükön ($\vec{v}$) keresztül [és az eredményt érthetjük is a Brown mozgásról tanultak alapján]:

$$D = \frac{1}{3} l \vec{v} \tag{1.1}$$

$$D = \frac{1}{3} l \vec{v} = \frac{l^2}{3l/\vec{v}} \approx \frac{(length of jumps)^2}{3(time between jumps)} \approx \frac{(\Delta x)^2}{2\tau} \tag{1.2}$$

A szabad úthosszt megbecsülhetjük az $l = 1/(n\pi d^2)$ kifejezésből, ahol n a molekulák részecskeszám koncentrációja és d a molekulák átmérője [a becslés gondolata: a szabad mozgás során a molekula által súrolt térfogatban ($l\pi d^2$) egy másik molekula található]. Az átlagos sebességet pedig az ekvipartíció tételéből számolhatjuk.

Feladat megoldása.

Az ekvipartíció tétel szerint mivel a szabadsági fok száma 6 az energia felírható az alábbi alakban:

$$E = \frac{1}{2} m({v_x}^2 + {v_y}^2 + {v_z}^2) = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 = \frac{6}{2} k_B T. \tag{1.3}$$

A H_2S molekula moláris tömege $M = 34.082 g/mol$. Ebből megkaphatjuk egy molekula tömegét:

$$m = \frac{M}{N_A} = \frac{34.082 \cdot 10^{-3} kg/mol}{6 \cdot 10^{23} 1/mol} = 5.347 \cdot 10^{-26} kg. \tag{1.4}$$

Szobahőmérsékleten$(293K^\circ)$ a sebessége a molekulának:

$$\vec{v} = \sqrt{\frac{6 k_B T}{m}} = \sqrt{\frac{6 \cdot 1.380649 \cdot 10^{-23} J/K \cdot 293 K^\circ}{5.347 \cdot 10^{-26}}} = 673.74 \frac{m}{s}. \tag{1.5}$$

1. feladat

A feladat szövege alapján a diffúziós együttható meghatározásához szükségünk van még a H_2S molekula l szabad úthosszára, amihez tudnunk kell a H_2S molekula n koncentrációját és a d átmérőjét. A H_2S molekula átmérője $d = 133.6 \cdot 10^{12} m$. Az n koncentrációt a következő módon határozhatjuk meg:

$$n = \frac{N}{V} = \frac{N_A \cdot \rho}{M}, \tag{1.6}$$

ahol M az anyagmennyiség, ρ a molekula sűrűsége, $\rho = 1,363 \quad g/l$ tehát:

$$n = \frac{6 \cdot 10^{-23} 1/mol \cdot 1.363 kg/m^3}{34.082 \cdot 10^{-3} kg/mol} = 2.3995 \cdot 10^{25} \frac{1}{m^3} \tag{1.7}$$

Tehát a szabad úthossz a megadott képlet alapján:

$$l = \frac{1}{\pi n d^2} = \frac{1}{\pi \cdot 2.3995 \cdot 10^{25} 1/m^3 \cdot (133.6 \cdot 10^{-12})^2 m^2} = 7.432 \cdot 10^{-7} m. \tag{1.8}$$

Ennek ismeretében a diffúziós együttható kiszámítható:

$$D = \frac{1}{3} l \vec{v} = \frac{1}{3} \cdot 7.432 \cdot 10^{-7} m \cdot 673.74 m/s = 1.669 \cdot 10^{-4} \frac{m^2}{s} \tag{1.9}$$

Határozzuk meg, hogy mennyi idő alatt jut el a szoba egyik végéből a másikba a molekula tisztán diffúzív mozgással. tekintsünk egy szobát melynek olyalhosszúságai $3x3x5$ méter, ekkor a testátló .

$$d = \sqrt{3^2 + 3^2 + 5^2} = \sqrt{43} \quad m. \tag{1.10}$$

A diffúzív mozgás időtartama az eredeti képletből kifejezhető:

$$t = \frac{(\Delta x)^2}{2D} = \frac{(\sqrt{43})^2}{2 \cdot 1.669 \cdot 10^{-4}} = 128819.6525 \quad s = 1.49 \quad nap \tag{1.11}$$

Azt viszont tudjuk, hogy a levegőben a szagok a valóságban sokkal gyorsabban terjednek a diffúzión kívül más légmozgások is hajtják a molekulákat.

2. feladat

Feladat leírás.

Meredek hegyoldalban függőlegesen l távolságra vannak a kapaszkodók. A hegymászó w rátával lép felfelé, s w_0 annak a rátája, hogy lecsúszik egy szintet, s onnan folytatja a mászást.

(a) Írjuk fel az egyenletet, amely meghatározza, hogy a hegymászó milyen P_n valószínűséggel van n' magasságban!

(b) Egyelőre nem kell megtalálni az egyenlet megoldását, de azon elgondolkodhatunk, hogy ha van egy stacionárius megoldás, akkor abban az állapotban teljesül-e a részletes egyensúly elve. Teljesül?

Feladat megoldása.

2.a. feladat

A feladat megoldásához a Master-egyenletet kell alkalmazni:

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = -\sum_{n'} w_{n'n} P_n(t) + \sum_{n'} w_{nn'} P_{n'}(t) \tag{2.1}$$

A hegymászó csak a szomszédos kapaszkodókra tud vagy felmászni, vagy visszacsúszni. A kapaszkodók egymástól l távolságra vannak, melyre úgy tekintek, mint egy rácsállandóra és a kapaszkodók pontjai $n \pm 1$ lehetnek.
Ekkor az egyenlet a következő általános alakban írható fel:

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = -w_{n+1,n} P_n(t) - w_{n-1,n} P_n(t) + w_{n,n+1} P_{n+1}(t) + w_{n,n-1} P_{n-1}(t), \tag{2.2}$$

amennyiben az átmeneti rátákat is behelyettesítem:

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = -wP_n(t) - w_0 P_n(t) + w_0 P_{n+1}(t) + wP_{n-1}(t), \tag{2.3}$$

2.b. feladat

A feladat megválaszolásához a következő gondolatkísérletet kell végiggondolnunk.

Ha tennénk egy manót n' és n állapotok közé, aki számolja, hányszor megy a rendszer n -ből n' -be és fordítva. Mit tapasztalna ez a manó hosszú idő után? Azt látná, hogy valamennyi megy itt is, ott is, ám az időtükrözési invariancia miatt ez egyenlő. A $w_{n',n}$ azt jelenti, hogy egy ugrás volt és a manó ezt számolgatja. Ha nem ezt tapasztalná, akkor nem teljesülne az időtükrözési invariancia, hiszen, ha az egyik irányba több menne, akkor időtükrözéssel előjelet váltana és így meg lehetne határozni az idő folyásának irányát.
Matematikailag:

$$w_{nn'}p_n^{(e)} = w_{n'n}p_n^{(e)} \tag{2.4}$$

Azonban ebben a feladatban meghatározott rátákkal az alábbi alakot ölti külön-külön:

$$w_{nn'}p_n^{(e)} = \omega_0 p_n^{(e)} \tag{2.5}$$

$$w_{n'n}p_n^{(e)} = \omega p_n^{(e)} \tag{2.6}$$

Tehát ha a hegymászónk tényleg hegyet szeretne mászni akkor:

$$w_0 p_n^{(e)} \neq w p_n^{(e)}, \tag{2.7}$$

és amennyiben sikeres hegymászó is szeretne lenni:

$$w_0 p_n^{(e)} < w p_n^{(e)}, \tag{2.8}$$

Tehát a részletes egyensúly feltétele nem teljesül a hegymászó problémájára.

3. feladat

Feladat leírás.

Egy részecske, amelynek tömege m, egydimenziós rácson ugrál úgy, hogy τ időközönként valamelyik szomszédos rácspontba ugrik (a rácsállandó a). A részecske az origóhoz van kötve egy rugalmas, tömeg nélküli gumiszállal, amelynek rugóállandója k, és a környezet hőmérséklete T.

(a) Írjuk fel a részecske stohasztikus mozgását leíró Master-egyenletet!

(b) Használjuk a részletes egyensúly elvét konkrét, egyensúlyhoz vezető átmeneti ráták meghatározására!

Feladat megoldása.

3.a. feladat

A részecskénk csak a szomszédos rácspontba tud ugrani, ezért az n. állapotból csak az $n \pm 1$. állapotba mehet. Jelölje $P_n(t)$ annak a valószínűségét, hogy t időpontban a részecske az n. állapotban, vagyis az n. rácspontban van. A Master-egyenlet így:

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = -w_{n+1,n}P_n(t) - w_{n-1,n}P_n(t) + w_{n,n+1}P_{n+1}(t) + w_{n,n-1}P_{n-1}(t). \tag{3.1}$$

3.b. feladat

Tekintsük az m tömegű részecske energiáját az n. rácspontban E_n -nek, ami:

$$E_n = E_0 + \frac{1}{2}k(an)^2, \tag{3.2}$$

ahol E_0 egy tetszőleges alapállapoti konstans energia. A rendszernek egyensúlyban időtükrözési invarianciája van, azaz nem "látjuk" merre folyik az idő, ezt mondja ki a részletes egyensúly elve, ami matematikailag:

$$w_{nn'}p_{n}^{(e)} = w_{n'n}p_{n}^{(e)} \tag{3.3}$$

Az egyensúly esetén $P_n^{(e)}$:

$$P_n^{(e)} = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}, \tag{3.4}$$

ahol $\beta = k_B T$, Z pedig az állapotösszeg. Ha részletes egyensúly van, akkor az egyensúlyi állapot stacionárius állapota a Master-egyenletlen, azaz az átmeneti rátákra általánosan felírható a következő összefüggés:

$$\frac{w_{nn'}}{w_{n'n}} = \frac{P_n^{(e)}}{P_{n'}^{(e)}} = \frac{e^{-\beta E_n}}{e^{-\beta E_{n'}}}, \tag{3.5}$$

ami két esetre bontható az energiák különbségének függvényében:

$$w_{nn'} = \begin{cases} \frac{1}{\tau} \cdot e^{-\beta(E_n - E_{n'})}, & ha \quad E_n - E_{n'} > 0 \\ \frac{1}{\tau}, & ha \quad E_n - E_{n'} < 0 \end{cases} \tag{3.6}$$

Így most már a 3.b formulát használva felírhatjuk az átmeneti rátákat konkrétan:

$$w_{n+1,n} = \frac{1}{\tau} \cdot e^{-\frac{\beta k a^2}{2}(2n+1)}, \tag{3.7}$$

$$w_{n,n-1} = \frac{1}{\tau} \cdot e^{-\frac{\beta k a^2}{2}(2n-1)}, \tag{3.8}$$

$$w_{n,n+1} = w_{n-1,n} = \frac{1}{\tau}. \tag{3.9}$$