

PHS 3105 – Cinétique

24 Janvier 2019

Devoir 5 (optionnel, à remettre le 27 mars 2019)

On s'intéresse au phénomène de marche aléatoire d'une particule, en lien avec le mouvement brownien.

- A) Considérons un gaz de molécules d'hydrogène H_2 , où les molécules sont supposées être des sphères rigides, de rayon $R_{H_2} = 0.120$ nm. Les molécules de H_2 sont contenues dans une boîte fictive de 15 nm x 15 nm x 15 nm (on négligera les effets quantiques). La température est de 300 K. On considèrera leur position initiale dans la boîte comme aléatoire, et leur direction comme aléatoire. La distribution du module de leur vitesse sera donné par la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann vue en cours (équation 1.21 des notes manuscrites). On supposera les collisions comme élastiques (collisions entre les molécules et collisions sur les parois de la boîte fictive). Pour $N = 10, 100$ et 1000 molécules, calculer la pression sur les parois, et comparer avec la théorie des gaz parfaits $PV = Nk_B T$. Faites les approximations que vous jugerez appropriés. On pourra répéter une simulation plusieurs fois pour obtenir une moyenne de la pression, si l'on juge l'expérience nécessaire. Calculer le libre parcours moyen et comparer avec le libre parcours moyen pour la théorie cinétique des gaz.
- B) Considérons la même situation que la question A, avec $N = 100$, sauf que nous ajoutons une molécule d'azote N_2 , de rayon 0.155 nm, au centre de la boîte. Calculer la position finale de la particule de N_2 après 10 collisions. Répéter l'expérience 50 fois, et calculer la moyenne de la position finale $R = (X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}$, l'écart-type de la position finale et obtenez le coefficient de diffusion de l'azote dans l'hydrogène, en supposant que la théorie du mouvement Brownien s'applique.