Véletlen fizikai folyamatok, második házi feladat

Horváth Bendegúz

2018. február 26.

1. feladat

A feladat szövege

A következőfeladatban leírt Perrin kísérlet megértéséhez oldjuk meg először a két-dimenziós Brown mozgás egy egyszerűváaltozatát: l rácsállandójúnégyzetrácson egy részecske τ időközönként, egyenlő valószínűséggel ugrik a négy szomszédos rácspont egyikébe. A részecske $(x0 = 0, y0 = 0)$ pontból indul. Határozzuk meg a $t = N\tau$ idő alatti várható elmozdulást, $\sqrt{\langle r^2\rangle} = \sqrt{\langle x_t^2\rangle + \langle y_t^2\rangle}$-t!

A feladat megoldása

Az órán megbeszltekhez hasonlóan a valószínűségi változó várható értékét felírhatjuk a valószínűségek és értékük összegeként, csak itt most két dimenziós vektorok összege lesz:

$$\langle e_i\rangle = \frac{1}{4}\big((0,1) + (0,-1) + (1,0) + (-1,0)\big) = 0,$$

$$x_N = l \cdot \sum_{i=1}^{N} e_i,$$

ahol x_N a részecske helye. A távolság a helyvektor önmagával vett skalárisszorzata:

$$\langle x_N^2\rangle = l^2 \sum_{j=1}^{N} e_j \sum_{i=1}^{N} \langle e_i\rangle = l^2 \sum_{i,j=1}^{N} \langle e_i e_j\rangle = l^2\Big(\sum_{i=1}^{N}\langle e_i^2\rangle + \sum_{i,j\neq 1}^{N}\langle e_i e_j\rangle\Big) = l^2 \sum_{i=1}^{N}\langle e_i^2\rangle = l^2 N$$

Így a távolság várható értéke:

$$\sqrt{\langle r^2\rangle} = l\sqrt{N}$$

2. feladat

A feladat szövege

Perrin kísérletében kolloid részecskék mozgását vizsgáalták híg, vizes oldatban. A részecskék sugara $a = 0.52\mu m, \tau = 30s$-ként mérték a helyzetüket, s az ábrán látható négyzetrács rácsállandóa $3.125\mu m$. Becsüljük meg a kolloidrészecskék diffúziós együtthatóját kétféleképpen: (a) a kezdő és a végpont közötti elmozdulásból, feltételezve, hogy a mozgás diffúziv, és (b) a τ idő alatti ugráshosszok négyzetének átlagából!

A feladat megoldása

(a) A feladat megoldásához meg kellett számolni mind a 3 részecskének a kiindulási helyüktől megtett távolságot és a lépések számát. Az így kapott eredményeket a következő táblázatban foglalom össze:

részecske	lépések száma	távolság négyzete $[m]$	t [s]
baloldali	46	$2.225 \cdot 10^{-9}$	1380
középső	30	$2.769 \cdot 10^{-9}$	900
jobboldali	40	$0.711 \cdot 10^{-9}$	1200

Kihasználva a következő összefüggést a diffúziós együtthatóra:

$$R^2(t) = 2Dt.$$

$R(t)$ a kiindulásiponttól megtett távolsága, a képletbe behelyettesítve a diffúzós állandók sorrendben $8.15 \cdot 10^{-13} \frac{m^2}{s}$, $1.53 \cdot 10^{-12} \frac{m^2}{s}$, és $2.96 \cdot 10^{-13} \frac{m^2}{s}$ lettek. Ezeknek az átlaga $D = 8.83 \cdot 10^{-13} \frac{m^2}{s}$.

(b) Ennél a feladatnál le kellett számolni egy bolyongásban az összes lépésnek a négyzetét, majd ennek az átlagát venni. Ezt megtettem, a számolásokat egy táblázatkezelő programban végeztem [1] . A D diffúziós együtthatót a következő módon lehet megkapni az ugráshosszok négyzetének átlagából:

$$D = \frac{\langle \Delta^2 \rangle}{2\tau}.$$

Δ jelöli az ugráshosszakat, $\tau = 30s$ esetünkben. Így, balról jobbra az egyes bolyongásokhoz tartozó diffuziós együtthatók: $1.36 \cdot 10^{-12} \frac{m^2}{s}$, $6.24 \cdot 10^{-13} \frac{m^2}{s}$ és $7.52 \cdot 10^{-13} \frac{m^2}{s}$.
A diffúziós együtthatók átlaga: $D = 9.12 \cdot 10^{-13} \frac{m^2}{s}$

Bár az (a) és (b) feladatoban egyes bolyongásokhoz tartozó D-k különböznek egymástól, az átlagok viszont egész közel vannak egymáshoz. Ezért a 3-as feladatban a kettőnek az átlagát fogom használni a becslésben.

3. feladat

A feladat szövege

Használjuk a (2) feladat eredményét, valamint a Brown mozgás Langevin féle leírásának eredményeképp kapott kifejezést a kolloidrészecskék diffúziós együtthatójára, s becsüjük meg az Avogadro számot! A kolloidrészecskék sűrűségét tekinthetjük vízhez közelinek, a hőmérsékletet pedig szobahőmérsékletnek.

A feladat megoldása

A megoldáshoz elhasználjuk a következő kifejezést, ami a Brown-mozgás Langevin féle levezetéséből kaptunk:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}$$

A kifejezésben η a viszkozitás, a a kolloidrészecske sugara, T a hőmérséklet. Esetünkben η-t víz közeli sűrűségűnek vettem, $\eta = 8 \cdot 10^{-4} Pa \cdot s$, $a = 5.2 \cdot 10^{-7} m$, $T = 290°$K. és D az előző feladatból a kétféleképpen megkapott eredmény átlaga lett, $D = 8.97 \cdot 10^{-13} \frac{m^2}{s}$. Ismert még, hogy

$$k_B = \frac{R}{N_A},$$

ahol a R az egyetemes gázállandó, N_A pedig az Avogadro-szám. Így a megoldandó egyenlet:

$$D = \frac{R \cdot T}{6\pi\eta a N_A}.$$

Megfelelő alakra rendezve és behelyettesítve az adatokat[1], az Avogadro-számra $N_A = 3.461 \cdot 10^{23} mol^{-1}$ jön ki, ami kicsivel több mint a fele az elméleti értéknek.

4. feladat

A feladat szövege

Tegyük fel, hogy a kolloidrészecskék diffúziós együttthatójárajára kapott kifejezés extrapolálható molekuláris szintre. Milyen értéket kapunk egy nem túlságosan nagy molekulekula vízben történő termális mozgásának diffúziós együtthatójára? Keressünk nagy (biológiai) molekulákat (DNS?), amelyekre a diffúziós együtható ismert, s hasonlítsuk össze értéküket a becsüt eredménnyel!

A feladat megoldása

A diffúziós együtthatókat egy honlapon találtam[2], [3]. Az órán levezetett képlet, amibe behelyettesíttem:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}.$$

Tapasztalati képlet	a sugár	elméleti diffúziós együttható	számolt diffúziós együttható	T [°K]
CO2	1.16 Å	$1.92 \cdot 10^{-9} m^2/s$	$1.88 \cdot 10^{-9} m^2/s$	295
NH3	1.41 Å	$1.64 \cdot 10^{-9} m^2/s$	$1.47 \cdot 10^{-9} m^2/s$	285
H2	0.5 Å	$4.5 \cdot 10^{-9} m^2/s$	$4.36 \cdot 10^{-9} m^2/s$	298
C_2H_6 (etán)	1.55 Å	$1.2 \cdot 10^{-9} m^2/s$	$1.4 \cdot 10^{-9} m^2/s$	298

A képletből számolt értékek megközelítik az elméleti értéket, habár a sugár kiszámolása nem mindig volt pontos. A nagyobb biologiai molekulákhoz sajnos nem találtam adatokat.

Hivatkozások

[1] http://hbendeguz.web.elte.hu/java/vélf2_1

[2] http://www.thermopedia.com/content/696/

[3] http://biofilmbook.hypertextbookshop.com/public_version/artifacts/tables/Module_004/Table4-1_DiffCoeffH2O.htm