Véletlen fizikai folyamatok, harmdik házi feladat

Horváth Bendegúz

2018. március 5.

1. feladat

A feladat szövege

Egy szobában T=20 °C hőmérsékletű ideális gáznak tekinthető levegő van. Számítsuk ki mennyi idő alatt jut el egy vízmolekula a szoba egyik végéből a másikba tisztán diffúziv mozgással.
Segítség: A kinetikus elmélet a gázok diffúziós együtthatójára a következő kifejezést adja (és az eredményt érthetjük is a Brown mozgásról tanultak alapján):

$$D = \frac{1}{3} l \overline{v} \qquad \left(= \frac{l^2}{3l/\overline{v}} \approx \frac{(\Delta x)^2}{2\tau} \right)$$

ahol l a molekulák szabad úthossza, v pedig átlagos sebességük. A szabad úthosszt megbecsülhetjük a $l = 1/(n\pi d^2)$ kifejezésből, ahol n a molekulák koncentrációja és d a molekulák átmérője. Az átlagos sebességet pedig az ekvipartíció tételéből számolhatjuk. A valóságban a szagok sokkal gyorsabban terjednek egy szobában, annak ellenére, hogy a megfelelő molekulák lényegesen nagyobbak és súlyosabbak a vízmolekulánál. Értjük ezt?

A feladat megoldása

Felírva az ekvipartíció tételét megkaphatjuk a v sebességet:

$$E = \frac{1}{2} m \left(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \right) = \frac{3}{2} k_B T.$$

A kéletbe behelyettesítve $T = 293$, a levegő moláris tömege 18.015 g/mol, amiből egy mlekula tömege $\approx 18.015/8.31/10^3$ kg.

$$\overline{v} = \sqrt{293 \cdot 10^3 \frac{3}{2.16}} \approx 638 \ \frac{m}{s}$$

A vízmolekula szabad úthossza kell még, hogy a diffúziós együtthatóját megkaphassuk. A víz molekula átmérőjét $2.75 \cdot 10^{-10}$ m-nek vettem[1]. A levegő koncentrációját pedig $55 mol/l$-nek [2]. Így a szabad úthossza:

$$l = \frac{1}{55\pi \cdot 2.75^2 \cdot 10^{-20} \cdot 6 \cdot 10^{23} \cdot 10^3} = \approx 1.27 \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

A diffúziós együttható:

$$D = \frac{1}{3} \cdot 1.27 \cdot 10^{-10} \cdot 638 = 2.7 \cdot 10^{-8}\ \frac{m^2}{s}.$$

Felhasználva az előző órákról a diffúziós üsszefüggést:

$$R(t) = 2Dt,$$

ahol a képletben $R(t)$ a távolság, t az idő és D a diffúziós együttható. A szobát egy $7 \times 5 \times 3\ m^3$ téglatestnek tekintem, így az egyik sarkából $\sqrt{49+25+9} = 9.1m$ utat kell megtennie, hogy átérjen a legtávolabb lévő sarkába. Behelyettesítve a fenti képlet átalakított verziójába :

$$t = \frac{9.11 \cdot 10^{10}}{2 \cdot 1.27} = 3.58 \cdot 10^{10}\ \mathrm{s}$$

A kapott végeredmény nagyságrendekkel nagyobb a tapasztaltaknál, tisztán diffúzióval nagyon sok idő lenne, hogy a szagok eljussanak hozzánk. Valóságban apró szellők, nehezebb molekulák, molekulák közötti taszítóerők, áramlatok gyorsítják a folyamatot.

2. feladat

A feladat szövege

Írjuk fel az évfolyam évről-évre változó létszámát meghatározó master egyenletet. Gondolkozzunk el azon, hogy mi határozza meg az átmeneti rátákat!

A feladat megoldása

A master egyenlet általános formáját felírhatjuk:

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

Az évfolyamot tekinthetjük egy populációnak, ami egy "születési-halálozási" folyamatban van benne. A születő egyedeket tekinthetjük a csatlakozó diákoknak, akik "visszacsúsznak" az alattuk lévő évfolyamba vagy Erasmusos cserediákként tagja lesz egy kis ideig a populációnak. Az elhalálozó egyedek pedig akik kikerülnek a rendszerből, otthagyják az egyetemet vagy lejjebb csúsznak. Az átmeneti ráták időfüggetlenek, és a következő módon írhatóak[3]:

$$W_{nn'} = t^{+}_{n'}\delta_{n,n'+1} + t^{-}_{n'}\delta_{n,n'-1},$$

ahol δ a Kronecker-delta szimbólum, $t^{\pm}_{n}$ pedig az $n \to n \pm 1$ átmenet valószínűsége egységidő alatt. Az általános master egyenletből az átmeneti rátákkal a következő egyenletet kapjuk:

$$\partial_t P_n(t) = t^{+}_{n-1}P_{n-1}(t) + t^{-}_{n+1}P_{n+1}(t) - [t^{+}_{n} + t^{-}_{n}]P_n(t)$$

Az egyenletnek nincs általános megoldási módszere, stacionárius esetben viszont van. Itt az átmeneti ráták nem annyira véletlen folyamatok, inkább emeberi döntésektől függenek

3. feladat

A feladat szövege

Egy m tömeű részecske a rácsállandójú, egydimenziós rácson τ időközönként valamelyik szomszédos rácspontba ugrik. A részecske az origóhoz van kötve egy rugalmas, tömeg nélküli gumiszállal, amelynek rugóállandója k, s a környezet hőmérséklete T.
(a) Írjuk fel a részecske stochasztikus mozgását leíró master egyenletet!
(b) Használjuk a részletes egyensúly elvét konkrét, egyensúlyhoz vezető átmeneti ráták meghatározására!

A feladat megoldása

A részecske energiája a az n. rácspontban:

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

ahol E_0 egy konstans alapállapoti energia. A részecske n állapotból $n \pm 1$ állapotba ugorhat. Az n. állapotban tartózkodás valószínűségét egyensúlyi állapotban felírhatjuk az órán használt módon:

$$P_n^{(e)} = \frac{e^{-\frac{E_n}{k_B T}}}{Z},$$

Z az állapotösszeget jelöli. A Master egyenlet:

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

A részletes egyensúly elvét használva az átmeneti rátákat így számolhatjuk:

$$\frac{W_{n+1,n}}{W_{n,n+1}} = \frac{P_{n+1}}{P_n} = \frac{e^{-\beta E_{n+1}}}{e^{-\beta E_n}} = e^{\beta(E_n - E_{n+1})} = e^{\beta \frac{1}{2} k a^2 (1-2n)}$$

$$\frac{W_{n-1,n}}{W_{n,n-1}} = \frac{P_{n-1}}{P_n} = e^{\beta \frac{1}{2} k a^2 (2n-1)}$$

A fenti egyenletekben $\beta = k_B T$. Adjunk meg egy olyan feltételt, hogy a részecske ugrási rátája $\frac{1}{\tau}$ legyen, ha az origó felé ugrik, és $\frac{1}{\tau} e^{\beta \frac{1}{2} k a^2 (1-2|n|)}$, ha az origótól elfele ugrik. Az abszolútérték az n-re a negatív n értékek miatt kell.

Hivatkozások

[1] `https://www.researchgate.net/post/what_is_the_size_of_water_moleculeH2O`

[2] `https://www.quora.com/What-is-the-molar-concentration-of-water-in-1-liter-of-pure-water`

[3] Professor Dr. Crispin W. Gardiner
Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences. Berlin, Heidelberg (1983)