

Projektni zadatak iz Statističke fizike

Viktor Ćurčić

Abstract

U ovom radu, bavili smo se definicijom i simulacijom jednog sistema od N čestica idealnog gasa koje interaguju sa Maksvelovim demonom, simulirajući rad idealnog termometra. Predstavili smo raspodelu po intenzitetu brzine, kao i raspodelu energije demona. Diskutovali smo takođe o efektu demona na gas, i obrnuto. Na kraju smo komentarisali dobijene temperature demona i idealnog gasa.

1 Uvod

Temperatura predstavlja meru unutrašnje energije nekog sistema. Merenje temperature uvek se zasniva na merenju nekog drugog parametra sistema koji se zatim dovodi u vezu sa temperaturom. Idealni termometar bi trebalo da ima jako slabu interakciju sa sistemom čija se temperatura meri, tako da je perturbacija tog sistema zanemarljivo mala, a opet dovoljno jaku interakciju tako da merenje temperature bude validno. U ovom projektu biće obrađen primer jednog teorijskog termometra.

Posmatraju se dva sistema u kontaktu. Jedan sistem predstavlja Maksvelovog demona koji u ovom primeru ima ulogu termometra. Maksvelov demon predstavlja misaoni eksperiment, smišljen od strane Džejmsa Klarka Maksvela 1867. godine, kojim se osporava Drugi zakon termodinamike, po kom entropija u nekom izolovanom sistemu nikad ne može da se smanji. Maksvelov demon razmenjuje energiju sa drugim sistemom-idealnim gasom koji se sastoji od velikog broja čestica i kroz ovakvu interakciju meri temperaturu idealnog gasa. U ovom projektu simuliraćemo interakciju između Maksvelovog demona i posmatranog idealnog gasa prema sledećim uputstvima:

Idealni gas se sastoji od $N = 400$ molekula helijuma, molarne mase $M = 4 \frac{g}{mol}$ na temperaturi od $T = 300K$. Molekuli helijuma mogu imati brzine u sva tri pravca Dekartovog koordinatnog sistema. Radi jednostavnosti, u početnom stanju, podesićemo da svaki molekul ima $|\vec{v}_x| = |\vec{v}_y| = |\vec{v}_z| = v_0$. Intenzitet v_0 postavićemo tako da ukupna energija gasa odgovara izračunatoj unutrašnjoj energiji gasa.

Neka je početna energija demona E_d takva da odgovara srednjoj energiji koju bi imao na temperaturi $T_d = 0K$.

Idealni gas i njemu pridruženog demona smatraćemo sistemom čija se ukupna energija održava i napravićemo ansambl ovakvih sistem - ovakvih kopija biće $N_s = 10-20$. U okviru svakog ansambla, svaki demon na isti način interaguje sa sebi pridruženim idealnim gasom. Demon proizvoljno (sa uniformnom raspodelom) bira neki od molekula. Potom, demon proizvoljno (sa uniformnom raspodelom) bira jednu komponentu brzine molekula (v_x, v_y ili v_z komponentu brzine) i pokušava da promeni intenzitet izabrane komponente brzine.

2 Rezultati

2.1 Početni uslovi i definicija interakcije

Kako bismo nastavili dalju analizu sistema idealnog termometra, potrebno je da odredimo početne uslove sistema. Znajući da je unutrašnja energija ovakvog sistema jednaka $U = \frac{3}{2}Nk_bT$ [1], a ukupna kinetička energija jednaka $E_k = N \frac{m(|v_x|^2 + |v_y|^2 + |v_z|^2)}{2} = N \frac{3mv_0^2}{2}$ za $m = Mn$, gde je n Avogadrov broj, izjednačavanjem ovih vrednosti dobićemo početnu brzinu čestica sistema kao $v_0 = \sqrt{\frac{k_b T}{m}} = 789.66 \frac{m}{s}$.

Dati sistem inicijalizovaćemo na sledeći način: Predstavićemo matricu veličine $N \times 3$ koja će biti popunjena slučajno odabranim vrednostima $\pm v_0$. Nad ovom matricom će demon proizvoljno birati jednu komponentu brzine molekula i pokušaći da joj promeni intenzitet.

Demon pokušava da promeni intenzitet izabrane komponente brzine, izabranog molekula, za proizvoljno δ iz opsega $[-\delta_m, \delta_m]$, gde za δ_m treba uzeti $\delta_m = 5v_0$. Drugim rečima, ako je demon izabrao k -ti molekul

i j -tu komponentu brzine ($j = x, y, z$) i ako je sa uniformnom raspodelom izabrao iz opsega $[-\delta_m, \delta_m]$, demon pokušava da realizuje da nov intenzitet posmatrane komponente brzine bude $v_j^k + \delta$.

Ukoliko je promena brzine takva da demon smanjuje intenzitet komponente brzine izabranom molekulu (ukoliko je $\delta < 0$), demon uzima energiju od idealnog gasa, te je demonu potrebno povećati energiju za odgovarajuće ΔE , a idealnom gasu je potrebno smanjiti unutrašnju energiju za ΔE .

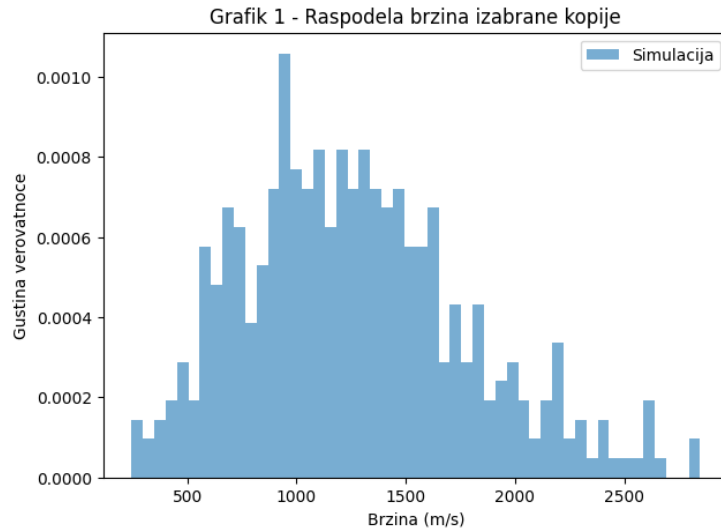
Ukoliko je promena brzine takva da demon povećava intenzitet komponente brzine izabranom molekulu (ukoliko je $\delta > 0$), demon predaje energiju idealnom gasu. U ovom slučaju promena brzine se realizuje samo ako demon u tom trenutku poseduje dovoljnu količinu energije koja je potrebna za takvu promenu, odnosno ukoliko je u tom trenutku $E_d \geq \Delta E$. Ukoliko se promena brzine realizuje, energija demona se smanjuje za odgovarajuće ΔE , a unutrašnja energija gasa se povećava za ΔE .

Ukoliko se promena brzine nije realizovala, demon i gas ostaju sa nepromenjenim energijama.

Ovakav postupak treba ponavljati $50 \times 10^3 - 150 \times 10^3$ puta kada bi sistem konačno ušao u ravnotežno stanje.

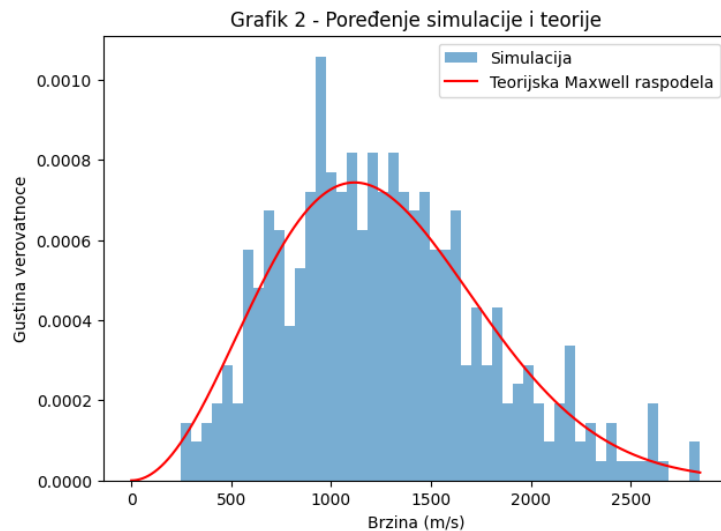
2.2 Analiza rezultata

Za izabranu kopiju predstavimo grafik raspodele brzine:



Slika 1.1

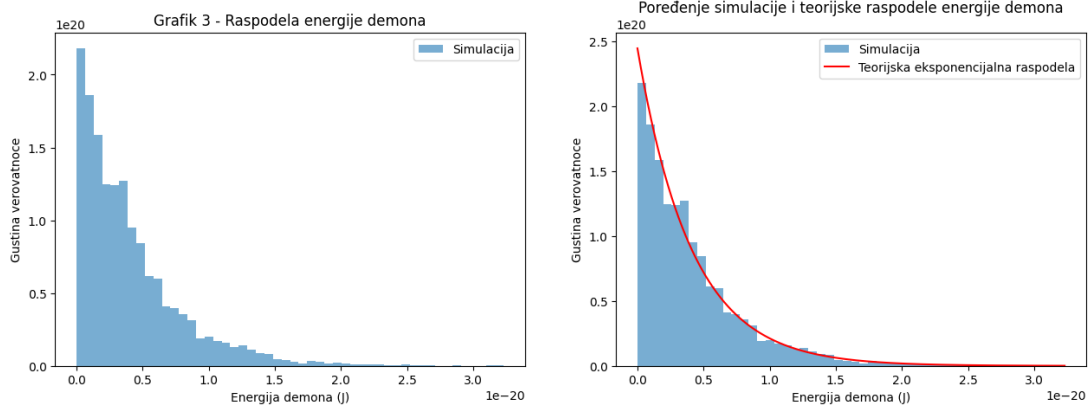
U teorijskom smislu, očekivana raspodela je Maksvel-Bolcmanova raspodela po intenzitetu brzina. Ona se dobija po formuli $f_M(v) = 4\pi\left(\frac{m}{2\pi k_b T}\right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_b T}}$ [2] Pogledajmo sad kako se slažu date raspodele:



Slika 1.2

Vidi se da se raspodele (teorijska i eksperimentalna) jasno slažu po obliku, sa određenim greškama.

Za datu kopiju, najverovatnija brzina molekula idealnog gasa iznosi $1084.02 \frac{m}{s}$. Teorijsku najverovatniju brzinu naći ćemo na sledeći način: Na datu raspodelu po intenzitu brzina primenićemo prvi izvod po brzini $\frac{df_M(v)}{dv} = 0$. Odatle ćemo dobiti $-\frac{m}{2k_b T} 2v^3 e^{-\frac{mv^2}{2k_b T}} + 2ve^{-\frac{mv^2}{2k_b T}} = 0$, što kada se sredi daje $v = \sqrt{\frac{2k_b T}{m}} = 1116.75 \frac{m}{s}$ [3], što je jako blizu eksperimentalnoj vrednosti.



Slika 1.3

U teorijskom smislu, energija demona prati raspodelu $P(E_d) \propto e^{-\frac{E_d}{k_b T}}$. Sa priloženih grafika vidimo da se poklapa sa eksponencijalnom raspodelom.

U uvodu smo rekli da će za demona važiti da ima energiju E_d na temperaturi $T_d = 0K$. Sada ćemo videti kako su demon i idealni gas uticali jedan na drugog. Srednja energija gasa iznosi $6.20 \times 10^{-21} J$, dok je $T_{gasa} = 299.55K$. S druge strane, srednja energija demona iznosi $4.09 \times 10^{-21} J$, a $T_{demon} = 296.25K$. Primećujemo da uticaj demona nije značajno promenio temperaturu gasa, dok s druge strane, demon jeste funkcionisao kao idealni termometar i precizno izmerio temperaturu idealnog gasa. Zbog činjenice da energija demona prati eksponencijalnu raspodelu, za srednju energiju demona će važiti: $\langle E_d \rangle = k_b T$, dok će se srednja energija idealnog gasa predstavljati preko usrednjavanja Maksvel-Bolcmanove raspodele, odnosno $\langle E_{gasa} \rangle = \frac{3}{2} k_b T$.

Srednju vrednost energije demona $\langle E_d \rangle_i$ ($i = 1, \dots, N_s$) za svaku od kopija, kao i vrednosti unutrašnje energije gasa U_i ($i = 1, \dots, N_s$) za svaku od kopija možemo videti u simulaciji. Srednja unutrašnja energija po ansamblu iznosi $2.48 \times 10^{-21} J$, a temperatura gasa iz unutrašnje energije je $299.55K$.

Nakon velikog broja iteracija, demon u većini kopija ansambla dostiže srednju energiju koja odgovara efektivnoj temperaturi od $\approx 300 K$, dok idealni gas ostaje u stanju blizu početnog stanja sa temperaturom od $300 K$. Ovo ukazuje da, iako postoji energetska razmena, demon ne uspeva da značajno promeni temperaturu gasa, čime se simulira ponašanje idealnog termometra koji slabo perturbira sistem koji meri.

References

- [1] Dejan M. Gvozdić Marko M. Krstić. "Zbirka rešenih zadataka iz statističke fizike". In: Akademska misao, 2022, p. 25.
- [2] Jovan Radunović. "Statistička fizika sa kinetičkom teorijom u fizičkoj elektronici". In: Akademska misao, 2013, pp. 45–46.
- [3] Dejan M. Gvozdić Marko M. Krstić. "Zbirka rešenih zadataka iz statističke fizike". In: Akademska misao, 2022, pp. 42–43.