

**Studiul microscopic al termalizarii unui gaz bidimensional
izolat termic si plasat intr-un camp gravitational uniform,
ca efect al interactiunilor dintre molecule**

1. Scopul lucrarii

Teoria cinetico-moleculara a gazelor este dominata de doua puncte de vedere distincte: cel introdus de Maxwell si cel fundamentat de Boltzmann. In primul caz, studiul *starii de echilibru* a sistemului, se face folosind cateva ipoteze generale si neglijand, in esenta, interactiunile reciproce ale moleculelor. In celalalt caz, obtinerea starii de echilibru a unui sistem este imaginata ca rezultat al unui proces de evolutie (de relaxare) a sa, pornind de la o stare initiala data. Starea de echilibru va fi astfel atinsa asimptotic, dupa intervale de timp determinate de intensitatea interactiunilor reciproce ale moleculelor. Evolutia sistemului trebuie deci descrisa de o ecuatie care sa includa si cauzele relaxarii sistemului. Boltzmann a postulat o astfel de ecuatie pentru gaze si, in ipoteza existentei si unicitatii solutiei, a obtinut, la $t = \infty$, starea de echilibru a unui gaz (distributia Maxwell-Boltzmann).

Punctul de vedere boltzmannian constituie baza unor teorii actuale in fizica statistica a fenomenelor de neechilibru. Cu toate acestea, demonstrarea existentei si unicitatii solutiei ecuatiei Boltzmann s-a dovedit a fi o problema extrem de dificila, chiar si pentru sisteme simple, cum sunt cele in stare gazoasa. Studiul acestei probleme implica analiza interactiei dintre molecule. Existenta si unicitatea solutiei a fost demonstrata riguros numai pentru modelul in care moleculele sunt privite ca sfere rigide, netede, de raza finita (R), astfel incat energia potentiala de interactie biparticula are forma:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{pentru } r > R \\ \infty, & \text{pentru } r \leq R \end{cases} \quad (1)$$

In anumite cazuri, existenta si unicitatea solutiei asimptotice (la $t = \infty$) a ecuatiei Boltzmann este asigurata de proprietatea de ergodicitate a sistemului (aceasta consta, in esenta, in echivalenta medierilor pe ansamblul statistic cu medierile temporale ale parametrilor microscopici ai sistemului). Singurul model a carui ergodicitate a fost riguros demonstrata pana in prezent este cel de sfere rigide aratat mai sus.

Lucrarea de fata isi propune ca, fara a folosi ipotezele amintite si fara utilizarea unei ecuatii de evolutie de tip Boltzmann, sa ilustreze faptul ca un gaz de sfere rigide aflat initial

intr-o stare arbitrara atinge dupa un timp suficient de lung o stare unica de echilibru Aceasta stare este caracterizata de o distributie Maxwell-Boltzmann a moleculelor si este atinsa **numai datorita interactiunilor intermoleculare**. Pentru comoditatea vizualizarii fenomenului, miscarea moleculelor este limitata numai la cele doua dimensiuni ale ecranului, adica gazul este considerat bidimensional.

2. Descrierea generala a programului

Programul care simuleaza comportarea gazului bidimensional este intitulat MAXBOL. In acest program se considera un numar de molecule **monoatomice** cuprinse intr-o "cutie" patrata de latura a , sub actiunea eventuala a unui camp extern de forte conservative. Ciocnirile moleculelor intre ele si cu peretii "cutiei" sunt considerate **perfect elastice**. La fiecare ciocnire intre doua molecule, unghiul dintre vitezele finale si cele initiale in sistemul centrului de masa este considerat parametru aleator, cu o distributie uniforma intre 0 si 2π .

In starea initiala a gazului, pozitiile moleculelor sunt generate aleator in "volumul" (adica pe suprafata) "cutiei", cu o **distributie uniforma**. Pentru vitezele initiale pot exista mai multe optiuni: distributie uniforma intr-un domeniu limitat prestabilit, fascicol monoenergetic etc. In mod obisnuit, se foloseste o "injectie" de molecule avand vitezele distribuite uniform intr-un domeniu limitat al primului cuadrant: $\vec{v}_0 \in [0, v_{max}] \times [0, v_{max}]$.

Evolutia ulterioara a gazului este analizata cu un pas de timp variabil, corespunzator mediei modulelor vitezelor moleculare la momentul respectiv. Datorita faptului ca ciocnirile moleculelor cu peretii "vasului" sunt considerate elastice, schimbul de energie al gazului cu exteriorul se face numai prin intermediul campului extern aplicat. Pana la atingerea starii de echilibru, "temperatura" gazului va avea deci valori variabile in timp. La fiecare pas de timp, programul deseneaza pe monitor o "fotografie" a gazului, in "recipientul" sau, la momentul respectiv. O grila de linii orizontale si verticale ajuta la stabilirea mai exacta a pozitiei moleculelor. Aceasta figura este urmata la cateva secunde de imaginea gazului in spatiul vitezelor, unde se foloseste o grila formata din cercuri concentrice in jurul originii ($\vec{v} = \vec{0}$). Urmeaza apoi un mixaj grafic format dintr-o histograma reprezentand distributia moleculelor dupa modulul vitezei, la momentul respectiv si curba teoretica corespunzatoare (distributia Maxwell; a se vedea relatia (4) de mai jos) trasata pentru valoarea momentana a temperaturii gazului. Urmatorul ecran prezinta un set de date asupra starii gazului la momentul respectiv: timpul, energia cinetica medie a moleculelor, media modulului vitezelor moleculare (exprimata in unitati relative: $\langle v \rangle / v_{max}$). Fiecare ecran ramane vizibil un timp de cateva

secunde, dar pentru a suspenda executia programului si pentru a pastra astfel o anumita imagine pentru studiu, se va apasa tasta "PAUSE-BREAK". Reluarea executiei programului se face apoi apasand orice tasta. Pentru oprirea definitiva a programului se apasa "CONTROL" + "PAUSE-BREAK".

3. Relatiile de lucru

La echilibru termodinamic, distributia moleculelor dupa viteze este descrisa de "factorul Maxwell" *in configuratie bidimensionala*:

$$f(\vec{v}) = \frac{m_0}{2\pi k_B T} e^{-\frac{m_0 v^2}{2k_B T}}, \quad (2)$$

unde m_0 este masa unei molecule, iar k_B este constanta lui Boltzmann. Distributia dupa modulul vitezelor se obtine imediat integrand relatia (2) dupa toate directiile posibile, adica integrand in coordonate polare dupa unghiul polar al vitezei moleculare, de la 0 la 2π :

$$F(v) = \frac{m_0 v}{k_B T} e^{-\frac{m_0 v^2}{2k_B T}}. \quad (3)$$

In acest fel, *la echilibru termodinamic*, energia cinetica medie se poate calcula dupa relatia:

$$\langle Ec_0 \rangle = \int_0^{\infty} \frac{m_0 v^2}{2} F(v) dv, \quad (4)$$

din care se obtine imediat:

$$\langle Ec_0 \rangle = k_B T. \quad (5)$$

Asemnator se poate calcula si media modulelor vitezelor moleculare *la echilibru termodinamic*:

$$\langle v \rangle = \int_0^{\infty} v F(v) dv \quad (6)$$

si se obtine:

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{\pi k_B T}{2 m_0}} \quad (7)$$

Viteza cea mai probabila, in starea de echilibru termodinamic, este cea pentru care distributia (3) ia valoarea maxima:

$$v_p = \sqrt{\frac{k_B T}{m_0}}, \text{ sau } \frac{v_p}{v_{max}} = \sqrt{\frac{k_B T}{m_0 v_{max}^2}}. \quad (8)$$

Cand gazul se afla intr-un camp de forte exterioare conservative, distributia moleculelor dupa pozitie *la echilibru termodinamic*, este data de "*factorul Boltzmann*":

$$f(\vec{r}) = B e^{-\frac{Wp_0(\vec{r})}{k_B T}}; \quad B = \left(\int_V e^{-\frac{Wp_0(\vec{r})}{k_B T}} dV \right)^{-1}, \quad (9)$$

unde Wp_0 este energia potentiala a unei molecule in campul de forte incare se afla plasat gazul, iar V este volumul recipientului ocupat de gaz. In situatia in care campul extern este de tip gravitational uniform, de intensitate g , iar verticala recipientului este luata ca axa Oy , atunci factorul Boltzmann depinde numai de coordonata y si are forma:

$$f(y) = B e^{-\frac{m_0 g y}{k_B T}}; \quad B = \frac{m_0 g}{k_B T} \left(1 - e^{-\frac{m_0 g a}{k_B T}} \right)^{-1}, \quad (10)$$

unde a este, asa cum s-a notat mai sus, dimensiunea verticala a recipientului. Pozitia centrului de masa al gazului se calculeaza deci dupa expresia mediei coordonatei moleculare:

$$\vec{r}_{CM} = \langle \vec{r} \rangle = B \int_V \vec{r} e^{-\frac{Wp_0(\vec{r})}{k_B T}} dV; \quad B = \left(\int_V e^{-\frac{Wp_0(\vec{r})}{k_B T}} dV \right)^{-1},$$

care, pentru cazul campului gravitational uniform devine:

$$\frac{y_{CM}}{a} = \frac{\langle y \rangle}{a} = \frac{k_B T}{m_0 g a} \left(1 - e^{-\frac{m_0 g a}{k_B T}} \right)^{-1} \left[1 - \left(1 + \frac{m_0 g a}{k_B T} \right) e^{-\frac{m_0 g a}{k_B T}} \right]. \quad (11)$$

Trebuie subliniat din nou ca toate relatiile de mai sus corespund *echilibrului termodinamic* si ca deci nu pot fi aplicate starilor tranzitorii pe care le parcurge gazul in procesul de stabilire a echilibrului. Este insa evident ca parametrii calculati anterior *la echilibru* (energia cinetica medie, media modulelor vitezelor moleculare, pozitia centrului de masa al gazului etc.) pot fi considerati si in starile tranzitorii. Programul calculeaza la fiecare pas de timp unii din acesti parametri, ca *medii aritmetice* ale parametrilor microscopici corespunzatori fiecarei molecule. Valorile obtinute fluctueaza in jurul celor date de relatiile de

mai sus, iar amplitudinile acestor fluctuatii se micsoreaza treptat pe masura instalarii starii de echilibru termodinamic. Instalarea starii de echilibru termodinamic se face inasa treptat, **prin redistribuirea parametrilor microscopici in urma interactiunilor moleculare** si aceasta nu duce la absenta fluctuatiilor valorilor medii. Fluctuatiile continua sa persiste la nesfarsit (ca manifestare a miscarii moleculare permanente), dar se vor incadra in amplitudini care pot fi calculate, prin aplicarea distributiilor moleculare de echilibru, in cadrul **teoriei fluctuatiilor**. De exemplu, un rezultat cunoscut al acestei teorii este ca, la echilibrul termodinamic al unui gaz monoatomic, **fluctuatia relativa a energiei cinetice medii** a moleculelor este $\Delta E_{c0}/\langle E_{c0} \rangle = 1/\sqrt{N}$, unde cu N s-a notat numarul de molecule al gazului. Determinand acest parametru prin calcul direct, in functie de timp, se poate deci estima momentul cand are loc instalarea starii de echilibru termodinamic al gazului (adica asa-numita **durata de relaxare** al sistemului).

4. Modul de lucru

In conditii obisnuite, datorita frecventei extrem de reduse a interactiunilor dintre molecule, timpul de relaxare al unui gaz poate fi foarte mare. De asemenea, in campul gravitacional terestru, pozitia centrului de masa al unui gaz aflat intr-un recipient de dimensiuni obisnuite difera prin cantitati absolut imperceptibile de valoarea semiinaltimii recipientului. Pentru construirea unei demonstratii eficiente este deci necesar sa se foloseasca in program conditii exagerate de densitate a gazului si de intensitate a campului extern aplicat. Astfel, gazul se presupune ca are un numar $N = 400$ de molecule, fiecare avand energia potentiala maxima $m_0ga = 0,4375$ eV. In starea initiala, energia cinetica maxima a unei molecule este $m_0v_{max}^2/2 = 0,325$ eV.

1) Prima etapa a lucrarii de laborator este inregistrarea, intr-un tabel, a parametrilor afisati de program la fiecare pas de timp: timpul, energia cinetica medie a moleculelor si valoarea relativa a mediei modulelor vitezelor moleculare. Dupa inregistrarea acestor date pentru aproximativ 150 de pasi de timp, la ultima imagine a moleculelor in spatiul pozitiiilor, se suspenda executia programului si se numara moleculele aflate in fiecare din cele 10 fasii orizontale ale grilei desenate pe ecran. Cum masele moleculelor sunt identice, se gaseste pozitia verticala a centrului de masa al gazului cu formula:

$$\frac{y_{CM}}{a} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{10} N_i, \quad (12)$$

unde N_i este numarul de molecule gasite in fasia i .

2) Suspendand executia programului la ultima imagine a gazului in spatiul vitezelor, se numara moleculele aflate in fiecare din cele 10 coroane circulare ale grilei desenate pe ecran. Cunoscand ca latimea Δv a fiecărei coroane corespunde valorii $\Delta v/v_{max} = 0,3$, se va trasa histograma modulelor vitezelor moleculare si se va estima viteza cea mai probabila (v_p/v_{max}).

3) Se trece apoi la trasarea graficelor energiei cinetice medii si a mediei modulelor vitezelor moleculare, ca functie de timp, obtinandu-se diagrame asemanatoare celor din figurile 1 si 2. Pe graficul energiei cinetice medii se verifica faptul ca, dupa ultimii pasi de timp, fluctuatia relativa acestei marimi, $\Delta Ec_0/\langle Ec_0 \rangle$, este apropiata de valoarea $1/\sqrt{N} = 1/\sqrt{400} = 0,05 = 5\%$. Din grafic, se estimeaza apoi valoarea energiei cinetice medii a unei molecule, $\langle Ec_0 \rangle$, si se asimileaza aceasta valoare cu $k_B T$, conform relatiei (5). Cu aceasta valoare a marimii $k_B T$ se calculeaza pozitia teoretica a centrului de masa cu relatia (11) si valoarea teoretica a vitezei celei mai probabile (v_p/v_{max}) cu a doua relatie (8). Se compara aceste doua valori cu cele obtinute anterior din analiza imaginii gazului in spatiul pozitiiilor si in cel al vitezelor.

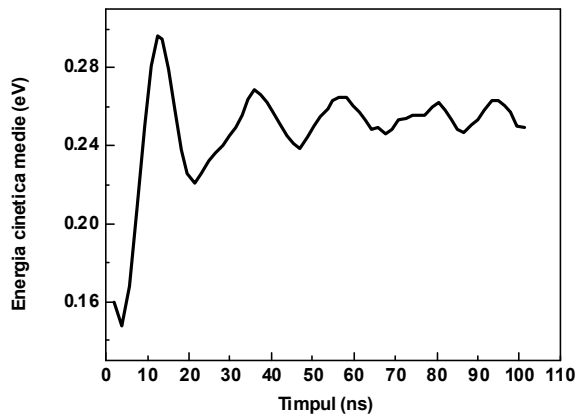


Figura 1

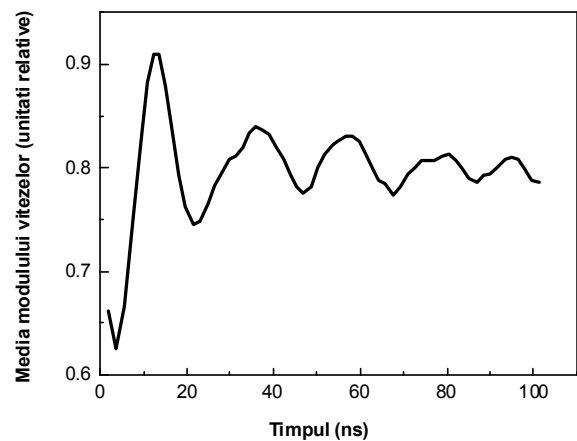


Figura 2