

Раздел № 02 Молекулярная физика.

Термодинамика

Тема № 01 Молекулярная физика

Лекция № 11 Методы описания систем многих частиц:
динамический метод

Учебные вопросы:

1. Модели материальных тел.
2. Динамический метод описания систем с большим количеством частиц.
3. Энергия системы многих частиц.
4. Идеальный газ.

Литература:

1. Кузнецов С.И. Курс физики с примерами решения задач. Часть I. Механика. Молекулярная физика. Термодинамика: учебное пособие. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2013.
2. Леденёв А.Н. Физика: учебное пособие для вузов. В 5 кн. Кн.2. Молекулярная физика. Термодинамика. – М.: Физматлит, 2005. – С.17 – 20.

Модели материальных тел

В механике, изучению которой были посвящены все предыдущие лекции, рассматривалось движение материальных тел, для которых использовались самые простые модели – материальная точка (МТ) и абсолютно твёрдое тела (АТТ).

Модель МТ	Модель АТТ
<ul style="list-style-type: none"> • пренебрегаем размерами тела; • пренебрегаем внутренним устройством тела. 	<ul style="list-style-type: none"> • тело имеет определенную форму объём; • внутреннее устройство тела выражается через не зависящее от времени распределение массы по объёму (плотность): $\rho = \frac{dm}{dV}$.

Ни в первой, ни во второй модели никак не учитывается реальное устройство материальных тел – для изучения их движения оно не важно. Ситуация сохраняется и в моделях более сложных механических теорий – теории упругости и гидродинамике, в которых материя рассматривается как сплошная среда. Однако понимание механизмов происходящих процессов, а тем более теоретическое вычисление параметров, описывающих сжимаемость, вязкость, связь между деформациями и механическими напряжениями невозможно без рассмотрения внутренней структуры тел. Это в полной мере относится и к другим процессам – тепловым, химическим, электромагнитным. Их понимание возможно только если использовать другую модель материального тела.

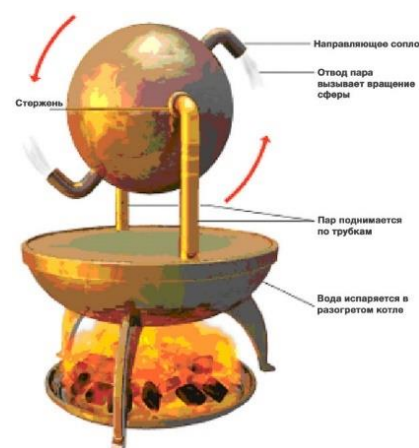
Материальное тело:

- состоит из атомов/молекул – частиц вещества;
- частицы взаимодействуют друг с другом по некоторым законам;
- частицы движутся друг относительно друга.

Сами атомы и молекулы, входящие в состав материального тела, могут быть представлены по-разному в зависимости от решаемых задач могут рассматриваться как материальные точки, твердые тела или сложные объекты с внутренней структурой.

Но говоря об этой новой модели материального тела, важно понимать, что теперь, заменяя материальное тело на систему N частиц, мы будем иметь дело с их очень большим, практически бесконечным, числом. Например, 1 см^3 воды содержит $N = 3,3 \cdot 10^{22}$ молекул.

Модель описания материального тела как системы с большим числом частиц даже в



Эолипил – тепловой двигатель Герона Александрийского вторая половина I века н.э.

простейшем случае материальных точек требует и новых методов изучения поведения. Прежним остаётся лишь представление о состоянии системы (см. Лекцию 1.4) как совокупности радиус-векторов всех точек системы и всех их векторов скорости. В случае более сложной модели молекулы (например, твёрдого тела), то есть наличия у молекул большего числа степеней свободы, соответствующем координаты и скорости также входят в состояние системы.

Существует три метода описания систем с большим числом частиц: динамический, статистический и термодинамический.

Динамический метод описания систем с большим количеством частиц

Как было сказано выше, все частицы системы (атомы/молекулы) движутся под действием других частиц и внешних полей. Зная радиус-векторы всех частиц системы (если рассматривать их как материальные точки) и все их векторы скорости в некоторый момент времени, можно вычислить положение и скорости всех частиц во все последующие моменты времени, то есть получить детальную информацию о каждой частице и, следовательно, обо всей системе в целом. Для этого необходимо решить соответствующие дифференциальные уравнения для всех точек i системы:

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{\vec{F}_i(\vec{r}_i; \vec{v}_i)}{m_i}$$

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i$$

Если заданы начальные условия при $t = t_0$, то есть известны все $\begin{pmatrix} \vec{r}_1(t_0) \dots \vec{r}_N(t_0) \\ \vec{v}_1(t_0) \dots \vec{v}_N(t_0) \end{pmatrix}$, то решая дифференциальные уравнения, находим состояние системы для любого момента времени

$$t: \begin{pmatrix} \vec{r}_1(t) \dots \vec{r}_N(t) \\ \vec{v}_1(t) \dots \vec{v}_N(t) \end{pmatrix}.$$

Однако вся полученная таким образом информация оказывается довольно проблемной или даже бесполезной для нас.

➤ Рассмотрим систему с числом частиц (материальных точек), примерно равных числу Авогадро: $N \approx 6 \cdot 10^{23}$ штук.

Состояние этой системы описывается $2N$ векторными параметрами: $\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N; \vec{v}_1 \dots \vec{v}_N$, или $6N$ числами, так как сохранение информации о векторе подразумевает сохранение трёх его компонент:

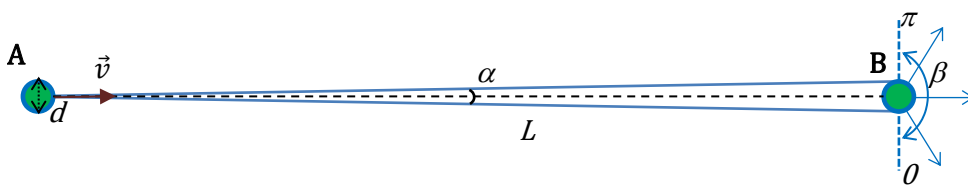
$$\left. \begin{array}{l} \vec{r}_i \rightarrow (x_i; y_i; z_i) \\ \vec{v}_i \rightarrow (v_{x_i}; v_{y_i}; v_{z_i}) \end{array} \right\} \text{итого } 3 \cdot 2N = 6N \text{ параметров.}$$

и для описания состояния нашей системы потребуется $6N = 6 \cdot 6 \cdot 10^{23} \approx 4 \cdot 10^{24}$ чисел.

Даже если запись каждого числа мы будем производить с одинарной точностью (оставлять 6 – 7 значащих цифр – в программировании это соответствует 4-х байтовой переменной типа *Real4*, *Single* или *float*), то для записи информации о состоянии всей системы нам понадобится $6N \cdot 4$ Б(байт) $\approx 1,6 \cdot 10^{25}$ Б $\approx 10^{13}$ ТБ памяти. Это нереально большой объём (максимальный объём информации на жёстком диске 2024 г. – 32 ТБ). В процессе решения уравнений эти данные должны обновляться с очень высокой частотой (каждая молекула воздуха испытывает примерно 10^9 столкновений в секунду), тогда как общее количество данных, произведенных во всем мире за весь 2024 г. – примерно 10^{11} ТБ. Если количество точек (частиц) в системе больше, то объём информации о ней тоже возрастает. Соответственно, хранение подобной информации о состоянии системы – сложная техническая задача, не говоря уже о решении такого числа дифференциальных уравнений.

➤ Оказывается, однако, что даже в простых случаях такой подход оказывается бесперспективен.

Рассмотрим совсем простую систему – разреженный газ, в котором частицы практически не взаимодействуют. В этом приближении они летят равномерно и прямолинейно, изредка



сталкиваясь друг с другом. Предположим, что для такой системы мы в начальный момент

времени знаем значения радиус-векторов всех точек системы и всех векторов скоростей: $\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N; \vec{v}_1 \dots \vec{v}_N$. Рассмотрим две произвольные частицы **A** и **B**. Пусть частица **A**, должна попасть в частицу **B**. Это произойдёт только, если частица **A** движется к частице **B**, так что её вектор скорости не отклоняется от линии, соединяющей частицы, на угол больший, чем

$$\alpha \sim \text{tg} \alpha = d/L.$$

Здесь d – диаметр частицы, L – среднее расстояние, которое пролетает частица между столкновениями. Для атомов (в обычных условиях) $d \sim 1 \text{ \AA} = 10^{-10}$ м, $L \sim 0,1 \text{ мкм} = 10^{-7}$ м то есть $\alpha = \frac{10^{-10}}{10^{-7}} \sim 10^{-3}$. Если мы знаем положение и скорости всех частиц системы, то можем позволить и такое точное прицеливание.

После удара частица **A** может отскочить под любым углом: $0 \leq \beta \leq \pi$, так как попадает в произвольное место частицы **B**. Угол разлёта превышает первоначальный угол прицеливания α в $\frac{\beta}{\alpha} = \frac{3,14}{10^{-3}} \approx 10^3$ раз. После всего одного столкновения новое положение частицы **B** отличается от

первоначального положения (внутри угла α) на три порядка. Фактически, это означает, что новое состояние определяется третьей значащей цифрой в начальных условиях. После следующего столкновения: $\frac{\beta_2}{\alpha} = \frac{10^3}{10^{-3}} = (10^3)^2 = 10^6$ раз. После третьего: $(10^3)^3 = 10^9$ раз и так далее. После 50 столкновений отличие будет в $(10^3)^{50} = 10^{150}$ раз и будет определяться 150-й цифрой в начальных условиях (для «трехмерного» газа это произойдет уже после 25 столкновений). Очевидно, что не только невозможно задать начальные условия с такой точностью, но уже нельзя пренебрегать и воздействием окружающего мира. Человек, вставший со стула на противоположной стороне Земли изменяет гравитационную силу в 30 – й цифре... Если учесть, что при нормальных условиях каждая частица газа за 1 секунду испытывает $\approx 10^9$ столкновений с другими частицами, мы очень быстро потеряем известную нам в начальный момент информацию о частице A . Ее положение становится непредсказуемым или *случайным*, а движение – *хаотичным*. Частиц, как мы знаем, в системе много, и все они ведут себя подобно частице A . Поэтому, для систем, состоящих из большого количества частиц, даже имея точную информацию о системе в некоторый момент времени, невозможно будет сказать, что будет с системой хотя бы через 1 секунду. Можно сказать, что система очень быстро «забывает» своё предыдущее состояние – «склероз» системы с большим числом частиц.

Следовательно, динамический метод описания систем многих частиц имеет следующие минусы:

- неосуществим с технической точки зрения (затраты на хранение информации);
- непригоден с теоретической точки зрения («склероз» системы и хаотическое поведение);
- бесполезен с практической точки зрения (для задачи о повышении эффективности теплового двигателя знание обо всех $\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N; \vec{v}_1 \dots \vec{v}_N$ частиц рабочего тела двигателя бесполезно).

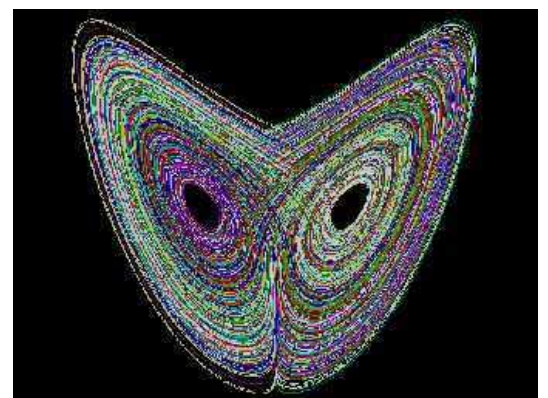
[«Демон Лапласа»](#) и [«эффект бабочки»](#) (полезные видео по теме «Хаотическое поведение систем»).

<https://lenta.ru/articles/2008/04/18/lorenz/> (статья по той же теме)

Всё же этот метод не совсем бесполезен. Для описания систем многих частиц у нас остаётся понятие

микросостояния системы – набора всех $\begin{pmatrix} \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N \\ \vec{v}_1 \dots \vec{v}_N \end{pmatrix}$ и

понятие об *энергии системы*.



«Бабочка Лоренца» - бинарность решений системы нелинейных дифференциальных уравнений, при разных параметрах стремящихся к одному из крыльев-аттракторов.

Использование современных средств вычислительной техники (в том числе параллельные вычисления) позволяет реализовать динамический метод (метод молекулярной динамики) для систем из десятков тысяч частиц. Он применяется для расчетов течения разреженных газов, в физической химии, в механике деформируемого тела и других областях науки.

Энергия системы многих частиц

Напомним, что энергия системы материальных точек складывается из кинетической и потенциальной энергии точек системы: $E = E_{\text{кин}} + E_{\text{пот}}$, каждую из которых можно представить как сумму двух слагаемых - собственной энергии и «внешней»: $E_{\text{кин}} = E'_{\text{кин}} + E_{\text{кин}c}$ (см. Лекцию 1.8) и $E_{\text{пот}} = E_{\text{пот}}^{\text{взаим}} + E_{\text{пот}}^{\text{внеш}}$ (см. Лекцию 1.7).

Договоримся, что во всех дальнейших вычислениях наши системы многих частиц будут как целое покоиться. Этого легко добиться, ведя описание в системе центра масс (в Ц-системе, см. Лекцию 1.8).

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i'^2}{2} + \cancel{\frac{m v_c^2}{2}} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N E_{\text{пот}ij} + \sum_{i=1}^N E_{\text{пот}i}^{\text{внеш}}$$

Если проанализировать оставшиеся в формуле слагаемые, то можно выделить слагаемые, связанные с движением частиц и их взаимодействием внутри системы:

$$\sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i'^2}{2}, \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N E_{\text{пот}ij},$$

и слагаемые, связанные с положением системы относительно внешних тел:

$$\sum_{i=1}^N E_{\text{пот}i}^{\text{внеш}}.$$

Дальше «'» в слагаемых кинетической энергии опускаем. По умолчанию система отсчёта всегда будет Ц-системой.

Поэтому, энергию системы можно представить как $E = U + E_{\text{пот}}^{\text{внеш}}$, где

$$U = E'_{\text{кин}} + E_{\text{пот}}^{\text{взаим}} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i'^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N E_{\text{пот}ij}$$

– **внутренняя энергия системы многих частиц.**

На самом деле, в нашем сознании такое деление на внутреннюю и внешние части происходит естественным образом: говоря, что скорость движения тела велика, мы имеем в виду, что тело быстро перемещается в пространстве; если же, сказать, что скорость частиц тела велика, имея в виду их внутреннее движение, то это будет означать, что тело сильно нагрето.

В дальнейшем описании материальных тел как систем многих частиц для нас будет важна именно внутренняя энергия как функция состояния (см. Лекцию 1.4)

$$U = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N E_{\text{пот}ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N, \vec{v}_1 \dots \vec{v}_N).$$

Идеальный газ

Существуют системы частиц, у которых энергия взаимодействия оказывается существенно меньше их кинетической энергии:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N E_{\text{пот}ij} \ll \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2}.$$

В таком случае меньшим слагаемым можно пренебречь: $U = E'_{\text{кин}} = \sum_{i=1}^N E_{\text{кин}i}$ – внутренняя энергия определяется через кинетическую энергию движения самих частиц (и энергию их составляющих, если при описании необходимо учитывать строение молекул вещества).

Системы многих частиц, для которых справедливо предыдущее соотношение называют – *идеальный газ* (ИГ), поскольку только у газов расстояние между частицами настолько велико, что кинетическая энергия частиц действительно превышает потенциальную энергию их взаимодействия.

$$U = \sum_{i=1}^N E_{\text{кин}i} -$$

внутренняя энергия идеального газа.

Идеальный газ:

- система большого количества частиц;
- частицы – материальные точки;
- между частицами отсутствуют силы взаимодействия, потенциальная энергия взаимодействия частиц равна нулю;
- частицы системы сталкиваются друг с другом и со стенками сосуда, обмениваясь при этом энергией как при абсолютно упругом ударе.

Последнее условие необходимо, чтобы не потерять характерное для систем многих частиц *хаотичное поведение*.

Простота модели идеального газа делает её удобной для первоначального изучения систем многих частиц. В обычных условиях все реальные газы ведут себя как идеальные. Отличия появляются только при больших давлениях или при низких температурах, когда пренебречь взаимодействием между частицами уже нельзя (из-за уменьшения расстояния между частицами при больших давлениях или уменьшения кинетической энергии частиц при низкой температуре).

Разработали

доцент кафедры физики Андреева Т.А.,

профессор кафедры физики Лукин А.Я.