

## Энтропия.

Энтропия – функция состояния термодинамической системы, для идеального газа приращение энтропии системы можно рассчитать по следующей формуле:

$$\Delta S = \nu \left( C_V \ln \frac{T}{T_0} + R \ln \frac{V}{V_0} \right).$$

Теоретический материал написан достаточно подробно и понятно, поэтому здесь он пересказан не будет, при желании с ним можно ознакомиться отдельно.

### Наглядный материал.

Демонстрация позволяет наблюдать процесс смешения двух находящихся в смежных объемах газов, разделенных решеткой. Можно смоделировать ситуацию, когда по обе стороны от решетки находятся смеси двух исходных газов в разных пропорциях. В процессе работы строится график зависимости энтропии системы от времени.

Перед запуском демонстрации предлагается установить температуру количество прутьев решетки, размеры и количество молекул с каждой стороны от решетки, температуру, которая будет поддерживаться постоянной в ходе всего эксперимента. Изменить предустановленные значения можно будет в любой момент работы программы.

Далее нажатием клавиши “Enter” или нажатием на кнопку “Начать расчет” запускается сама демонстрация. В зависимости от соотношения размеров ячеек решетки и шариков, молекулы могут проникать или не проникать через решетку. Равновесное состояние соответствует равномерному распределению тех молекул, которые могут проникать сквозь решетку. Текущее значение энтропии, отображаемое на графике в правом нижнем углу красным цветом чаще всего немного меньше теоретического, обозначенного синим цветом. Это связано с тем, что теоретическое значение соответствует строго равномерному распределению молекул, в то время как реальное распределение молекул испытывает случайные отклонения от этого распределения. Этот эффект называется микронарушениями второго закона термодинамики.

Для удобства введена возможность вращения сосуда с газом с зажатой левой клавишей мыши. Стенки сосуда при этом полупрозрачные, что позволяет наблюдать происходящее сквозь них.

Презентация позволяет смоделировать ситуацию, наиболее часто рассматриваемую на семинарах по статистической физике. Пусть дан сосуд, разделенный перегородкой. Слева и справа от перегородки находятся два различных газа, их характеристики известны. Перегородку убирают, в результате чего происходит смешение газов. Для моделирования этого процесса необходимо ввести большое значение в поле “Количество прутьев”, разместив при этом молекулы только одного вида с каждой стороны от перегородки. Тогда можно узнать значение энтропии до того, как перегородку убрали. Затем задаем нулевое количество прутьев перегородки и запускаем процесс заново. Новое значение энтропии будет больше предыдущего в соответствии с теоретической формулой.

Можно убедиться в аддитивности энтропии, например, удвоив количество частиц. На графике будет видно значение энтропии вдвое большее. Можно убедиться в росте энтропии с ростом температуры, оставляя все прочие параметры неизменными.

Также средствами презентации возможно смоделировать некое подобие движения броуновской частицы. Для этого необходимо создать много маленьких молекул и одну

большую, задав 0 в качестве количества прутьев. Тогда движение большой молекулы будет во многом схоже с движением броуновской частицы.

Особенности реализации:

- 1) Как было указано выше, изменить предустановленные значения параметров модели можно в любой момент работы презентации. После введения новых желаемых значений нажатием клавиши “Enter” или же повторным нажатием на кнопку “Начать расчет” текущие результаты эксперимента будут сброшены, после чего моделирование начнется снова, уже с новыми параметрами.
- 2) Программа корректирует введенные значения на свое усмотрение. Например, следит за тем, чтобы в исходном объеме нельзя было разместить большее количество молекул, чем в нем теоретически может поместиться. Также презентация не позволит пользователю установить отрицательное или дробное число молекул. Нельзя установить температуру выше 600К. Таким образом, наблюдать увлекательный процесс движения -31.415 молекул при температуре 10<sup>6</sup>К, увы, не удастся.
- 3) Программа НЕ корректирует отрицательные значения температуры, при таком вводе частицы не отобразятся на экране. Также программа корректно работает с дробными значениями температуры.
- 4) Программа корректно моделирует ситуацию, когда установлена температура в 0К. Хотя в реальности это состояние недостижимо, согласно всем теоретическим представлениям молекулы двигаться не должны вовсе.
- 5) Программой не предусмотрена возможность остановки демонстрации.
- 6) На графике используется шкала с автоматическим изменением масштаба, об этом важно помнить, считывая данные.