

Расширение газа в пустоту.

Наглядный материал.

Данная демонстрация показывает расширение газа, находящегося в сосуде, разделенном перегородкой, в пустоту при убиении этой перегородки сосуда.

На первых страницах демонстрации нам предлагают выбрать глубину потенциальной ямы Леннарда-Джонса, а также размер молекул на экране (выбирать размер, отличный от максимального, не имеет смысла). Далее нам предлагают настроить размеры сосуда, положение перегородки и количество молекул. Для упрощения моделирования и исключения радикальных ситуаций, программа не дает нам выбрать некоторые комбинации параметров (а нам ведь всем хочется загнать систему в крайнее состояние и посмотреть, что будет). Например, нам нельзя поставить большое количество частиц и засунуть их в сосуд минимального размера.

После выставления всех параметров мы можем перейти, собственно, к моделированию. Тут мы видим два сосуда с газами: идеальным газом (сверху) и газом Ван-дер-Ваальса. По нажатию кнопки «Старт» начинается движение частиц в сосудах. В каждом сосуде выбрано по одной частице, чей пробег (не весь, а только его часть) отображается на экране, что делает движение частиц более наглядным. Вы можете заметить, что в идеальном газе пробег частицы выглядит как ломанная кривая, а пробег частицы газа Ван-дер-Ваальса является плавно изогнутой кривой. Эта разница объясняется наличием в газе Ван-дер-Ваальса межмолекулярного взаимодействия на расстояниях больших размеров молекул, отсутствующего в идеальном газе.

После того, как перегородка исчезает, частицы начинают заполнять освободившееся пространство, и для каждого газа начинается вычисление реального и теоретического изменения температуры. Так мы можем видеть, что теоретическое изменение температуры идеального газа совпадает с практическими наблюдениями и равняется 0. В противовес этому, экспериментальное изменение температуры газа Ван-дер-Ваальса может расходиться с теоретическим, но оно всегда отрицательно и по мере расширения газа приближается к теоретическому значению.

Физические основы.

Потенциал Леннарда-Джонса - простая модель парного взаимодействия неполярных молекул, описывающая зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. Эта модель достаточно реалистично передает свойства реального взаимодействия сферических неполярных молекул и поэтому широко используется в расчетах и при компьютерном моделировании. Впервые этот вид потенциала был предложен Леннардом-Джонсом в 1924 году.

Потенциал Леннарда-Джонса записывается в следующем виде:

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

где r - расстояние между центрами частиц, ε - глубина потенциальной ямы, σ - расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю. Параметры ε и σ являются

характеристиками атомов соответствующего вещества. Характерный вид потенциала показан на рисунке, его минимум лежит в точке $r_{min} = \sigma\sqrt[6]{2}$. При $r < r_{min}$ силы притяжения преобладают над силами отталкивания, что соответствует члену $\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6$ формулы. Притяжение обусловлено силами Ван-дер-Ваальса (диполь-дипольного индуцированного взаимодействия). При расстоянии между центрами частиц меньшем, чем r_{min} , силы отталкивания преобладают над силами притяжения, что соответствует члену $\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}$ формул. Недостатком такого представления потенциала взаимодействия двух молекул является то, что силы обменного взаимодействия, отвечающие за отталкивание частиц на малых расстояниях, лишь приближенно описываются степенной зависимостью. Однако, степенное представление потенциала удобно для компьютерных расчетов. По этой причине потенциал Леннарда-Джонса широко применяется в численном моделировании поведения вещества. Поскольку потенциал Леннарда-Джонса описывает парное взаимодействие неполярных сферических молекул, он не подходит для других типов молекул (несферических и/или имеющих постоянные дипольные моменты).

Рассмотрим, что происходит с температурой газа, когда пропадает перегородка:

По первому закону термодинамики имеем

$$\delta Q = \delta A + \delta U$$

Рассматривается адиабатический процесс, поэтому $\delta Q = 0$. Так как расширение газа происходит в пустоту имеем $\delta A = 0$.

Формула изменения энергии для идеального газа:

$$\delta U = \nu C_V dT$$

Но $dU = 0$. Отсюда получаем, что $dT = 0$.

Для газа Ван-дер-Ваальса:

$$\delta U = \nu C_V dT - \frac{\nu^2 a}{dV}$$

В силу того, что $dU = 0$, получаем:

$$T_1 - T_2 = \frac{\nu a}{C_V} \left(\frac{1}{V_1} - \frac{1}{V_2} \right)$$

$V_1 > V_2$, следовательно $T_1 > T_2$.

Особенности реализации:

- 1) Моделирование происходит в течении ограниченного времени. По его истечению процесс визуализации будет остановлен.
- 2) Программа не допускает некоторые комбинации параметров моделируемой системы

(впрочем обработка выполнена корректно).