КОМПЬЮТЕРНАЯ ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА N 6-К

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

Цель работы

1. Познакомиться с одним из методов моделирования: методом Монте-Карло.

2. Построить гистограммы распределения частиц по высоте, проанализировать влияние на их вид числа частиц, температуры и массы частиц.

3. Моделируя опыт Перрена, определить число Авогадро.

Приборы и принадлежности

1. IBM - совместимый компьютер.
2. Программа "Bol".

Подготовка к работе

По лекциям и приведенному ниже списку литературы изучить следующие вопросы :

1. Распределение Больцмана.
2. Опыт Перрена.

Вопросы для допуска

1. Что описывает функция распределения Больцмана? От каких параметров она зависит?

2. В чем заключается опыт Перрена по определению числа Авогадро? Вывести рабочую формулу для определения числа Авогадро.

3. В чем заключается метод Монте-Карло? Как он используется в лабораторной работе?

4. Как строится гистограмма?

5. Как влияет температура и масса молекулы на график функции распределения Больцмана?

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ВВЕДЕНИЕ

Распределение частиц, находящихся в тепловом движении, по потенциальным энергиям, описывается функцией, которая имеет вид :

$$n = n_o \exp\left(-\frac{E_p}{kT}\right) ,$$

где n - концентрация частиц с потенциальной энергией E_p ;

n_o - концентрация частиц с энергией $E_p=0$;

k - постоянная Больцмана ;

T - абсолютная температура .

Эта формула справедлива в случае потенциального силового поля любой природы и называется распределением Больцмана. В частном случае, если рассматривать распределение частиц в поле земного тяготения, то $E_p=mgh$ и функция распределения Больцмана имеет вид:

$$n = n_o \exp\left(-\frac{mgh}{kT}\right) , \qquad (1)$$

где n - концентрация частиц на высоте h;

n_o - концентрация частиц на высоте $h = 0$;

m - масса частицы;

g - ускорение свободного падения.

Формула (1) получена в предположении, что температура и ускорение свободного падения не зависят от высоты.

Распределение частиц по высоте [см. формулу (1)] было использовано Перреном для определения числа Авогадро. Выведем рабочую формулу. По определению, концентрация равна отношению числа молекул ΔN, заключенных в объеме ΔV, к этому объему

$$n = \frac{\Delta N}{\Delta V} \quad , \qquad \text{отсюда :} \qquad \Delta N = n\,\Delta V \ .$$

В опыте Перрена подсчитывалось число броуновских частиц ΔN, видимое в микроскоп, на высоте h в объеме $\Delta V = S\Delta h$, где S - площадь, а Δh - глубина поля зрения микроскопа. Тогда число частиц ΔN, заключенных в объеме ΔV, расположенном на высоте h_i, можно подсчитать, умножив обе части уравнения (1) на объем ΔV :

$$\Delta N_i = n_0 S \exp\left(-\frac{mgh_i}{kT}\right) \Delta h \ . \qquad (2)$$

Сомножитель $n_0 S$ можно найти из условия нормировки

$$\sum_{i=1}^{L} \Delta N_i = N \ , \qquad (3)$$

где L - число интервалов Δh, на которое разбивается высота h.

Или $$\sum_{i=1}^{L} \frac{\Delta N_i}{N} = 1 \ .$$

Причем, в общем случае $\frac{\Delta N_i}{N} = P_i$ - вероятность того, что частица находится в интервале высот $[\ h_i\ ;\ \ h_i + \Delta h\ ]$.

Напишем отношение числа частиц для двух высот :

$$\frac{\Delta N_1}{\Delta N_2} = \exp \frac{mg\,(h_2 - h_1)}{kT} \ . \qquad (4)$$

Взяв логарифм от обеих частей равенства и выразив k, получим

$$k = \frac{mg\,(h_2 - h_1)}{T \ln\,(\Delta N_1 / \Delta N_2)} \ . \qquad (5)$$

Разделив газовую постоянную R на постоянную Больцмана k, можно определить число Авогадро N_A:

$$N_A = \frac{R}{k} . \qquad (6)$$

Поскольку натурный эксперимент затруднен, в нашей работе проводится численный эксперимент.

МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделирование распределения частиц по высоте, находящихся в поле тяготения в состоянии хаотического теплового движения, производится методом Монте-Карло. Название этого метода происходит от названия города Монте-Карло (княжество Монако), который издавна славился игорными домами. Известно, что в игре всегда присутствует элемент случайности, а рулетка может служить одним из приборов для генерирования случайных чисел. Однако моделирование случайных чисел вручную весьма трудоемкая задача, поэтому широкое распространение метод Монте-Карло получил только после появления электронно-вычислительных машин. Любая ЭВМ снабжена генератором случайных чисел, т.е. такой программой, которая при обращении к ней выдает случайное число. Стандартный генератор случайных чисел дает равномерное распределение вероятности в интервале от 0 до 1. Используя его, можно разработать генератор с другим законом распределения. Например, вероятность встретить частицу в нижних слоях атмосферы больше, чем в верхних. Соответственно этому должен работать генератор случайных чисел. Таким образом, метод Монте-Карло - это численный метод решения математических задач с помощью моделирования случайных величин.

Суть метода Монте-Карло заключается в следующем. С помощью генератора случайных чисел с соответствующим законом распределения вычисляются характеристики отдельных величин. В нашем случае закон распределения - экспоненциальный, а случайной величиной является высота, на которой находится частица. Затем производится статистическая обработка полученных результатов. В нашем случае строится гистограмма распределения частиц по высоте. Для этого высота h разбивается на L интервалов длиной Δh, подсчитываются ΔN_i - число частиц, попавших в интервал $[h_i; h_i+\Delta h]$ и строится график зависимости ΔN_i от h_i в виде ступенчатой кривой. Именно так делают в натурном эксперименте (в том числе в опыте Перрена).

Пример построения гистограммы приведен на рисунке. В левой части рисунка показано распределение частиц по высоте h, в правой – соответствующая ему гистограмма. Для наглядности на этом рисунке h отложена по вертикали. Тогда длина каждой ступеньки гистограммы равна ΔN_i, т.е. числу частиц, попавших в интервал Δh. Сумма длин всех ступенек должна быть равна полному числу частиц N, что соответствует условию нормировки. Отношение длины какой-нибудь ступеньки к полному числу частиц дает вероятность нахождения частицы в этом слое. Если соединить плавной кривой вершины ступенек, получится закон распределения. Следует заметить, что законы статистической физики выполняются тем точнее, чем больше общее число частиц. При малом числе частиц наблюдаются флуктуации, т.е. отклонения от статистических законов.

ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Введите данные : температуру, массу частицы, общее число частиц. Начинайте с небольшого числа частиц и пронаблюдайте, как меняется вид гистограммы с увеличением общего числа частиц. Подберите такое число частиц, при котором гистограмма соответствует распределению Больцмана. Зарисуйте ее. Данные занесите в таблицу.

2. Измените температуру. Зарисуйте гистограмму. Данные занесите в таблицу.

3. Измените массу частицы. Зарисуйте гистограмму. Данные занесите в таблицу.

4. Используя полученные гистограммы, по формулам (5) и (6) рассчитайте число Авогадро N_A. Данные занесите в таблицу.

Таблица

N пп	T	m	N	h_1	ΔN_1	h_2	ΔN_2	k	N_A
1 2 3									

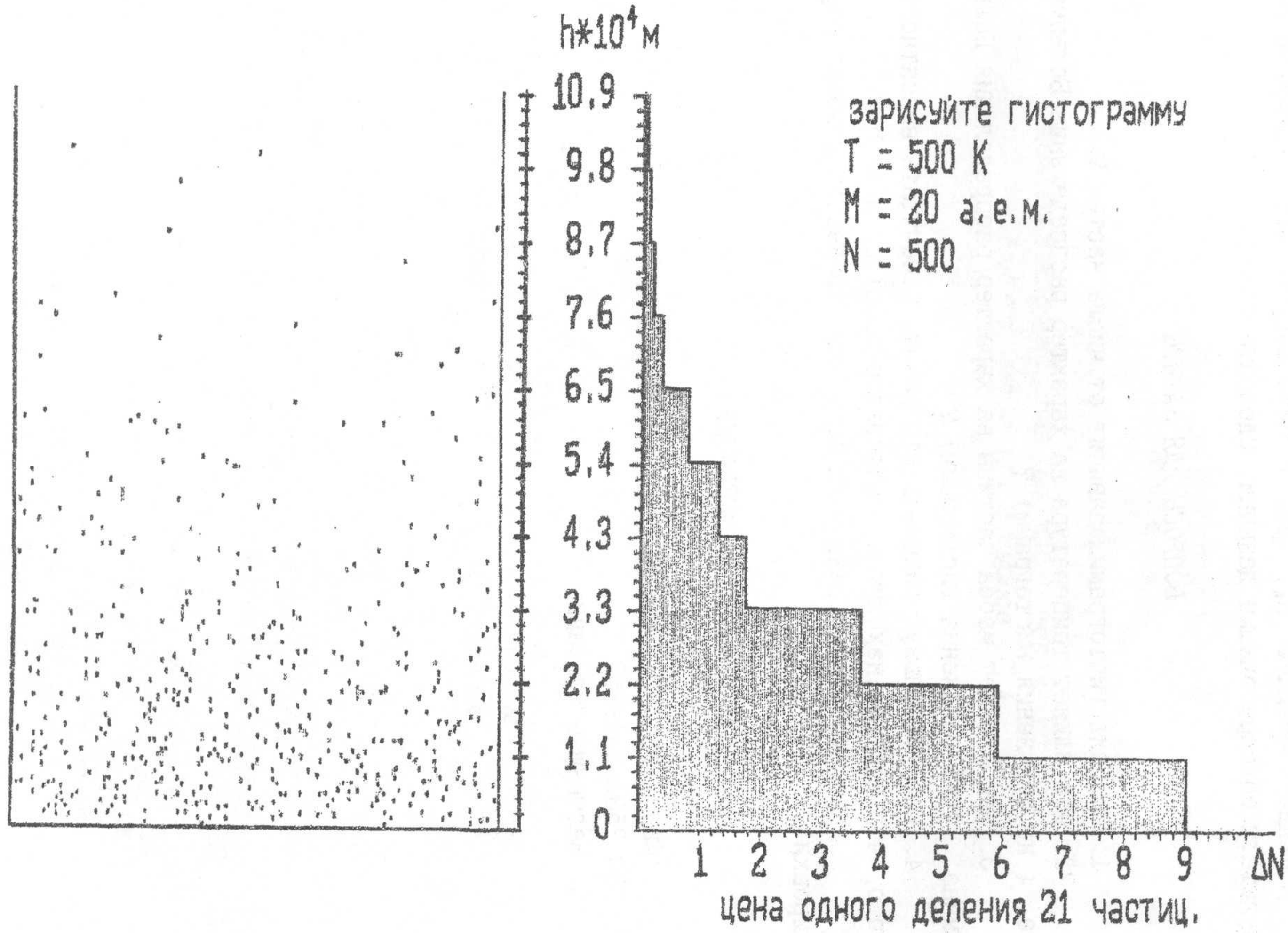

Рис. Построение гистограммы.

Найдите среднее N_A, рассчитайте погрешность. Сравните результаты со справочными данными. Сделайте выводы.

ВОПРОСЫ ДЛЯ ЗАЩИТЫ

1. Как вид гистограммы зависит от числа частиц ?
2. Как влияет температура на характер распределения Больцмана (из сравнения гистограмм) ?
3. Как влияет масса частицы на характер распределения Больцмана (из сравнения гистограмм) ?
4. Как, используя данные гистограммы, рассчитать вероятность того, что частица находится в интервале высот от 0 до h ?
5. Как, используя данные гистограммы, проверить условие нормировки ?

ЛИТЕРАТУРА

1. Савельев И.В. Курс физики. - М.: Наука., 1989. - т.1. С. 250-253, 264-268.
2. Настоящее описание.