

# Статистика вращения Броуновской частицы

## Постановка задачи

В центре поля с движущимися и соударяющимися шариками-молекулами находится Броуновская частица, закрепленная в одной точке, так что она может только вращаться под действием ударов молекул. Различные формы этой частицы пользователь может рисовать мышкой. Он также задает температуру число и размер молекул, массу Броуновской частицы. На графиках строятся значение кинетической энергии вращения, угла поворота, угловой скорости и углового ускорения от времени. Выводятся средние значения этих параметров и момент инерции частицы. В теории необходим вывод теоремы о распределении энергии по степеням свободы и основы теории Броуновского движения, применительно к вращению. Основная задача: показать, что кинетическая энергия меняется пропорционально температуре и не зависит от остальных параметров.

## Функционал модели

1. В программе использованы следующие сокращения единиц измерения:

- К — Кельвин
- мкм — Микрометр ( $10^{-6}$ )
- фг — Фемтограмм ( $10^{-15}$ )
- аДж — Аттоджоули ( $10^{-18}$ )
- пг\* мм<sup>2</sup> — Пикограмм ( $10^{-12}$ ) \* Миллиметр ( $10^{-3}$ )

2. При запуске демонстрации можно сразу наблюдать вращение броуновской частицы и движение шариков-молекул при установленных по умолчанию параметрах среды: температура(К)=100, размер молекул(мкм) = 7, масса (фг) = 50, количество = 150; и объекта (броуновская частица): форма — крест, масса (фг)= 4000. Все эти параметры пользователь может настраивать, в зависимости от своей задачи.

3. В правой нижней части находится поле ("Параметры молекул среды" и "Параметры объекта"), внутри которого происходит управление параметрами модели. Диапазоны допустимых значений:

- Температура (К) — от 0 до 500
- Размер молекулы (мкм) — от 2 до 20
- Масса молекулы (фг) — от 50 до 1000
- Количество молекул — от 0 до 500
- Масса броуновской частицы (фг) — от 300 до 15000

Применение новых параметров к модели происходит после нажатия кнопки «Применить параметры». Также пользователь может задать форму броуновской частицы: при нажатии кнопки «Задать форму» в центральной части экрана появляется выделенная пунктиром область, внутри которой пользователь задает необходимую форму (форма должна быть простым многоугольником). Для начала работы с новой моделью надо нажать кнопку «Применить форму».

4. При установлении новых параметров в правой верхней части выводятся средние значения кинетической энергии (аДж), угла поворота (град), угловая скорость (град/с), угловое ускорение (град/с<sup>2</sup>), а также момент инерции (пг\* мм<sup>2</sup>), усреднение проводится в зависимости от кол-ва показанных кадров в секунду (в среднем каждые 0.017с). При необходимости пользователь может сбросить вычисления, нажав соответствующую кнопку.
5. В левой части экрана строятся графики значений кинетической энергии (аДж), угла поворота (град), угловая скорость (град/с), угловое ускорение (рад/с<sup>2</sup>), такая величина измерения была выбрана с целью уменьшения шкалы разброса значений и наглядности представления данных. Просмотр всех графиков возможен при прокрутке ползунка. На каждом графике в правой верхней части изображены координаты точки, на которую указывает курсор пользователя в данный момент или последнее сохраненное значение (по умолчанию указана точка начала координат).
6. По истечении 20 минут рекомендуется сбросить вычисления.

## Теоретическая справка

Теорема о равномерном распределении энергии по степеням свободы утверждает, что если система частиц находится в состоянии термодинамического равновесия, то средняя кинетическая энергия хаотического движения молекул, приходящаяся на одну степень свободы поступательного и вращательного движения, равна  $\frac{1}{2}kT$ . (доказательство на следующих двух страницах)

## § 19. ТЕОРЕМА О РАВНОМЕРНОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ ЭНЕРГИИ ПО СТЕПЕНЯМ СВОБОДЫ И КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ТЕПЛОЁМКОСТИ ГАЗА

### 19.1. Вывод теоремы из канонического распределения

Из канонического распределения Гиббса для любых классических систем вытекает важное следствие, которое называется (не совсем точно) теоремой о равномерном распределении энергии по степеням свободы. На ней базируется классическая теория теплоемкостей газов, жидкостей и твердых тел.

(Мы уже получили выражение (14.11), соответствующее теореме, при расчете энергии идеального газа. Рассмотрим общий случай.)

В наиболее простом варианте теорема применима в тех задачах, где кинетическая энергия системы есть квадратичная форма от обобщенных импульсов:

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^f \alpha_i p_i^2,$$

где  $\alpha_i$  — постоянные коэффициенты. Например, для многоатомной молекулы при отсутствии колебаний имеется шесть степеней свободы: три поступательных и три вращательных. Ее кинетическая энергия равна

$$E_k = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \sum_{i=1}^3 \frac{L_i^2}{2M_i},$$

где  $m$  — масса молекулы,  $M_i$  — моменты инерции относительно трех главных осей инерции,  $L_i$  — соответствующие проекции момента импульса, играющие роль обобщенных импульсов по отношению к обобщенным координатам  $\varphi_i$  — углам вращения вокруг указанных осей.

Требуется доказать, что среднее значение кинетической энергии, приходящееся на любую из рассматриваемых степеней свободы, равно  $\frac{kT}{2}$ ,

т. е.

$$\overline{\epsilon_i} = \frac{\alpha_i \overline{p_i^2}}{2} = \frac{kT}{2}. \quad (19.1)$$

Для доказательства воспользуемся классическим каноническим распределением (7.20).

$$dW(q, p) = \frac{1}{I} e^{-\frac{E}{kT}} d\Gamma; \quad I = \int e^{-\frac{E}{kT}} d\Gamma;$$

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^f \alpha_i p_i^2 + U(q_1, q_2, \dots, q_f);$$

$$d\Gamma = dq_1 dq_2 \dots dq_f dp_1 dp_2 \dots dp_f.$$

Среднее значение  $\varepsilon_i$  по каноническому распределению равно

$$\bar{\varepsilon}_i = \frac{\alpha_i}{2} \frac{\int p_i^2 e^{-E/kT} d\Gamma}{\int e^{-E/kT} d\Gamma}.$$

Интегралы в числителе и знаменателе разобьем на два множителя:

$$\int p_i^2 e^{-\frac{E}{kT}} d\Gamma = \int p_i^2 e^{-\frac{\alpha_i p_i^2}{2kT}} dp_i \int e^{-\frac{E}{kT} + \frac{\alpha_i p_i^2}{2kT}} d\Gamma^*; \quad (19.2)$$

$$\int e^{-\frac{E}{kT}} d\Gamma = \int e^{-\frac{\alpha_i p_i^2}{2kT}} dp_i \int e^{-\frac{E}{kT} + \frac{\alpha_i p_i^2}{2kT}} d\Gamma^*; \quad (19.3)$$

$$d\Gamma^* = dq_1 dq_2 \dots dq_f dp_1 dp_2 \dots dp_{i-1} dp_{i+1} \dots dp_f.$$

Второй множитель в интеграле (19.2) не зависит от  $p_i$  и равен аналогичному множителю в интеграле (19.3). Отсюда

$$\bar{\varepsilon}_i = \frac{\alpha_i}{2} \frac{\int p_i^2 e^{-\frac{\alpha_i p_i^2}{2kT}} dp_i}{\int e^{-\frac{\alpha_i p_i^2}{2kT}} dp_i}. \quad (19.4)$$

Подынтегральные функции в интегралах, стоящих в числителе и знаменателе формулы (19.4), быстро убывают с ростом переменной интегрирования  $p_i$ . Поэтому пределы интегрирования можно положить равными соответственно  $-\infty$  и  $\infty$ . Это дает возможность воспользоваться формулами (П. 6) и (П. 7):

$$\int_{-\infty}^{\infty} p_i^2 e^{-\frac{\alpha_i p_i^2}{2kT}} dp_i = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left( \frac{2kT}{\alpha_i} \right)^{3/2}; \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\alpha_i p_i^2}{2kT}} dp_i = \sqrt{\frac{2\pi kT}{\alpha_i}}.$$

После подстановки в (19.4) найденных значений интегралов приходим к (19.1).

Итак, средняя кинетическая энергия любой поступательной или вращательной степени свободы молекулы одна и та же и равна  $\frac{kT}{2}$ .

Если потенциальная энергия, связанная с  $i$ -й степенью свободы, равна нулю, то этот вывод автоматически переносится на полную механическую энергию поступательной или вращательной степени свободы. Отсюда и произошло название теоремы. Если же потенциальная энергия не равна нулю, то приравнивать к  $\frac{kT}{2}$  полную механическую энергию данной степени свободы уже нельзя.

Особый случай представляет собой гармоническое колебательное движение. Если из общего выражения для потенциальной энергии

## Основы теории Броуновского движения применительно к вращению

Броуновское движение – это случайное движение микроскопических частиц в жидкостях или газах из-за их столкновений с молекулами окружающей среды.

Теорема о равномерном распределении энергии по степеням свободы применима к вращательному движению броуновской частицы. Эта теорема утверждает, что в термодинамическом равновесии средняя кинетическая энергия по каждой степени свободы составляет  $\frac{1}{2}k_B T$ , где  $k_B$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура.

Для вращательной степени свободы броуновской частицы эта теорема означает, что в среднем кинетическая энергия вращения по каждой из трех ортогональных осей  $x, y, z$  составляет  $\frac{1}{2}k_B T$ .

Суммируя средние энергии вращения по трем осям, получим суммарную кинетическую энергию вращения:

$$K_{rot} = \frac{1}{2}I(\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2)$$

По теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы средняя кинетическая энергия вращения должна составлять  $\frac{3}{2}k_B T$ . При вращении относительно одной из трех осей она равна  $\frac{1}{2}k_B T$ .

## Демонстрация выполнения теоремы о равномерном распределении энергии по степеням свободы

Посмотрим, как изменяется кинетическая энергия при изменении следующих параметров:

1. Температуры
2. Массы броуновской частицы
3. Количества частиц среды
4. Размера частиц среды
5. Массы частиц среды

Из рисунков видно, что средняя кинетическая энергия увеличивается в 3 раза при увеличении температуры в 3 раза, другие параметры на неё не влияют.

Также установлена независимость средней кинетической энергии от момента инерции, при изначальной массе была нарисована форма стержня, закрепленного к оси вращения одним концом, тем самым момент броуновской частицы инерции получился в 2 раза больше, чем у креста.

Помимо вышеперечисленных параметров, для демонстрации модели была изменена форма броуновской частицы(рис.8) и установлено, что эта характеристика также не влияет на среднюю кинетическую энергию. Более того, форма броуновской частицы не меняет закон движения. Так, например, частица в виде флюгера(рис.8) не будет вращаться против часовой стрелки чаще, чем по часовой, что можно наблюдать, задав такую форму.

Рис. 1: Изначальные параметры

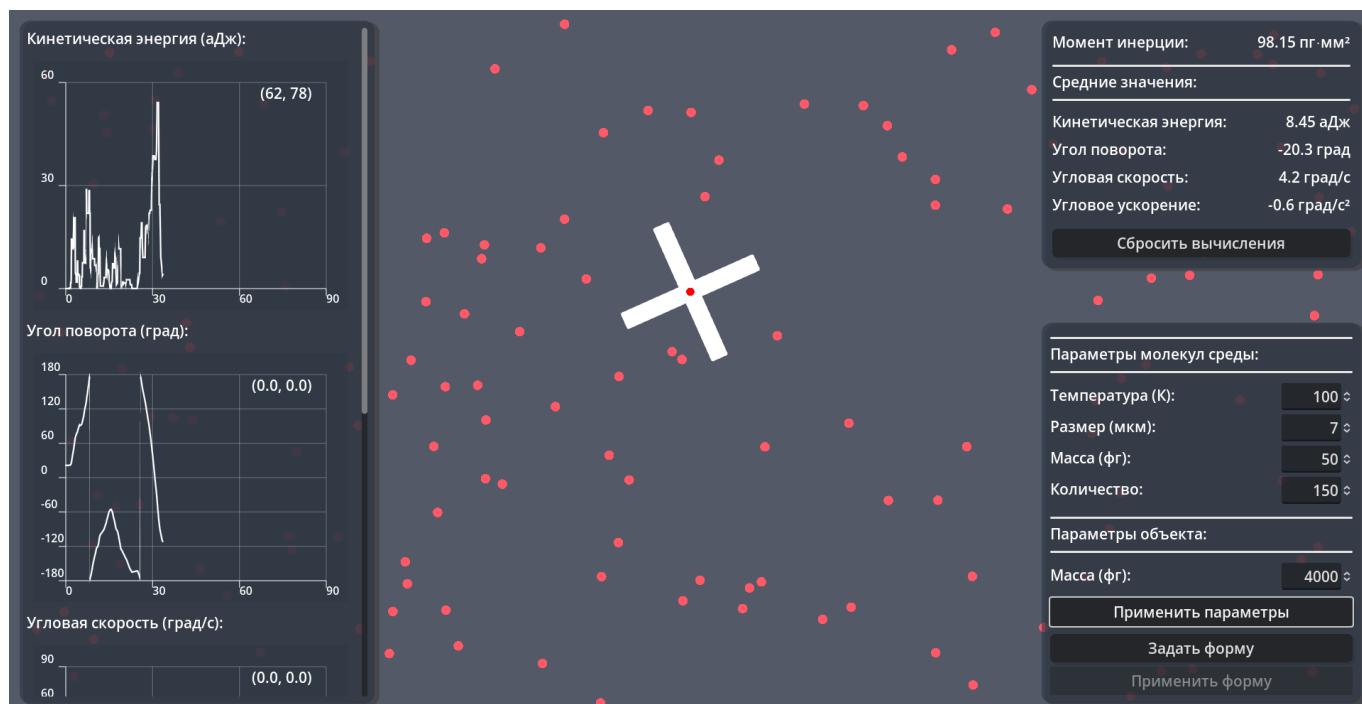


Рис. 2: Изменение температуры

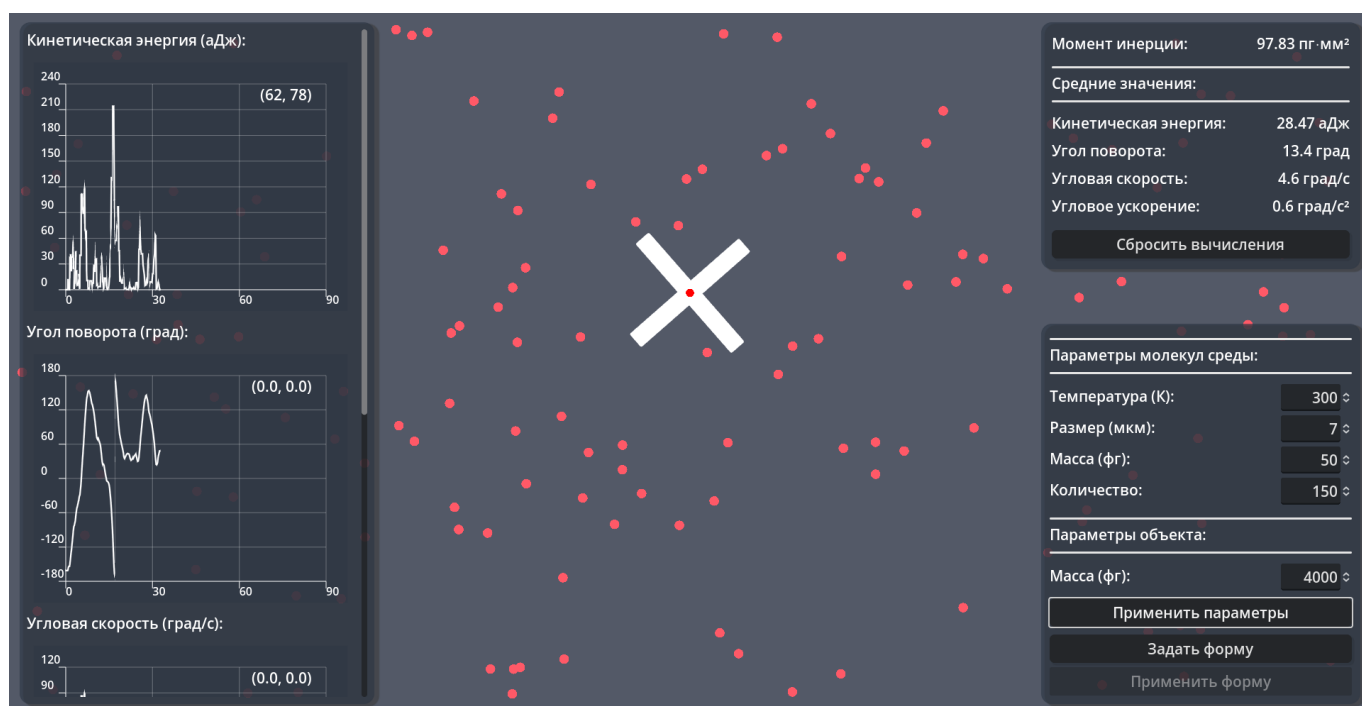


Рис. 3: Масса броуновской частицы изменена

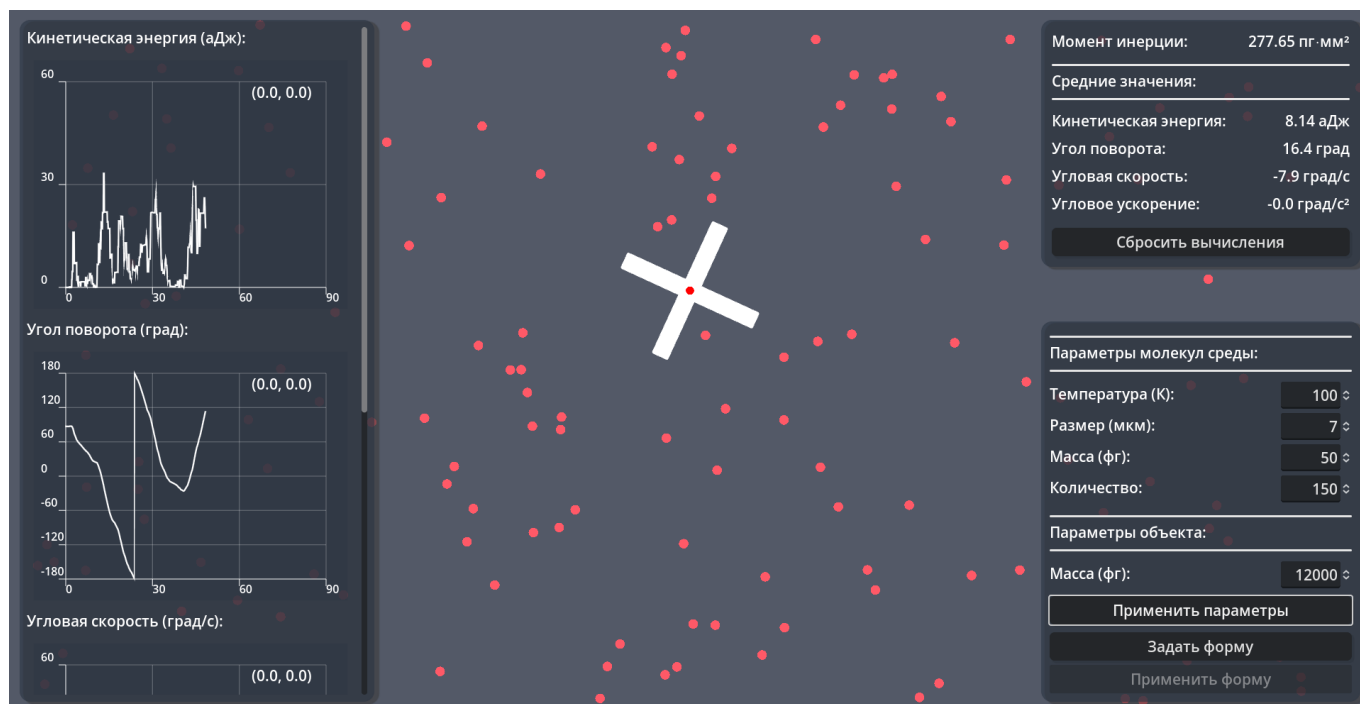


Рис. 4: Изменено количество молекул среды

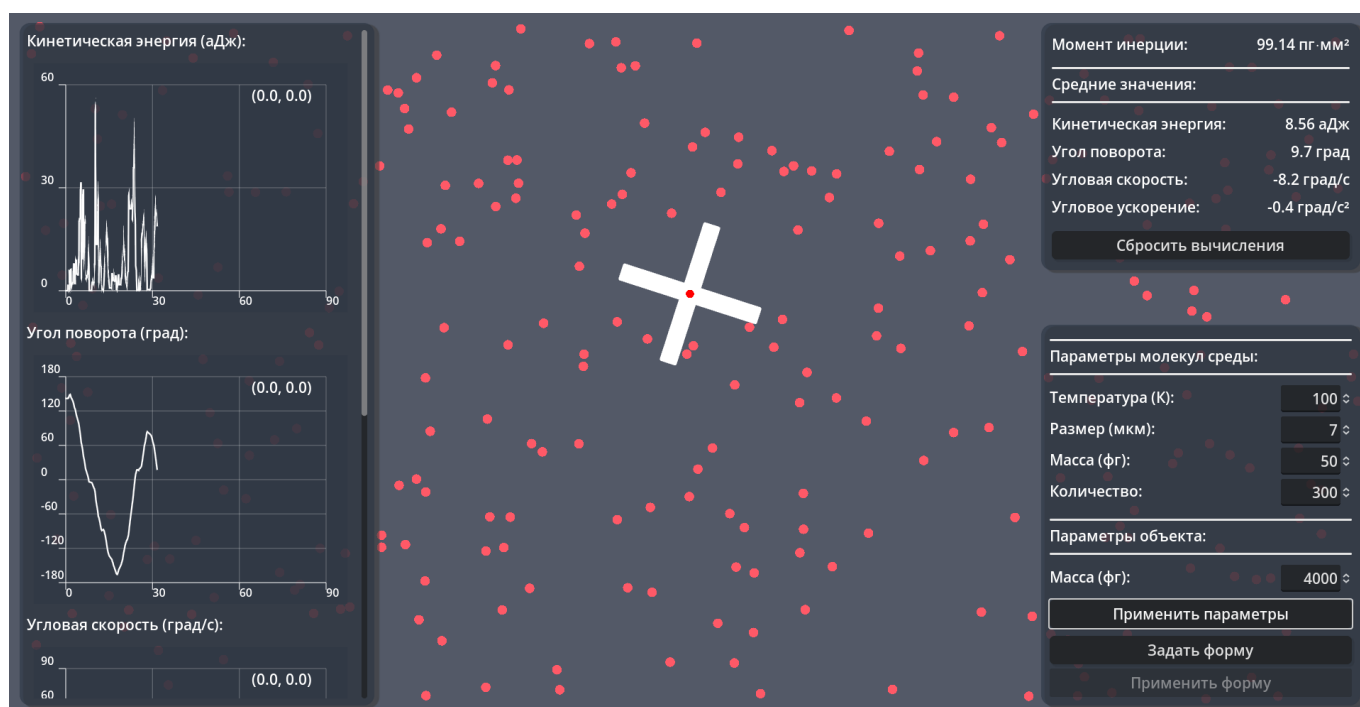


Рис. 5: Изменен размер молекул среды

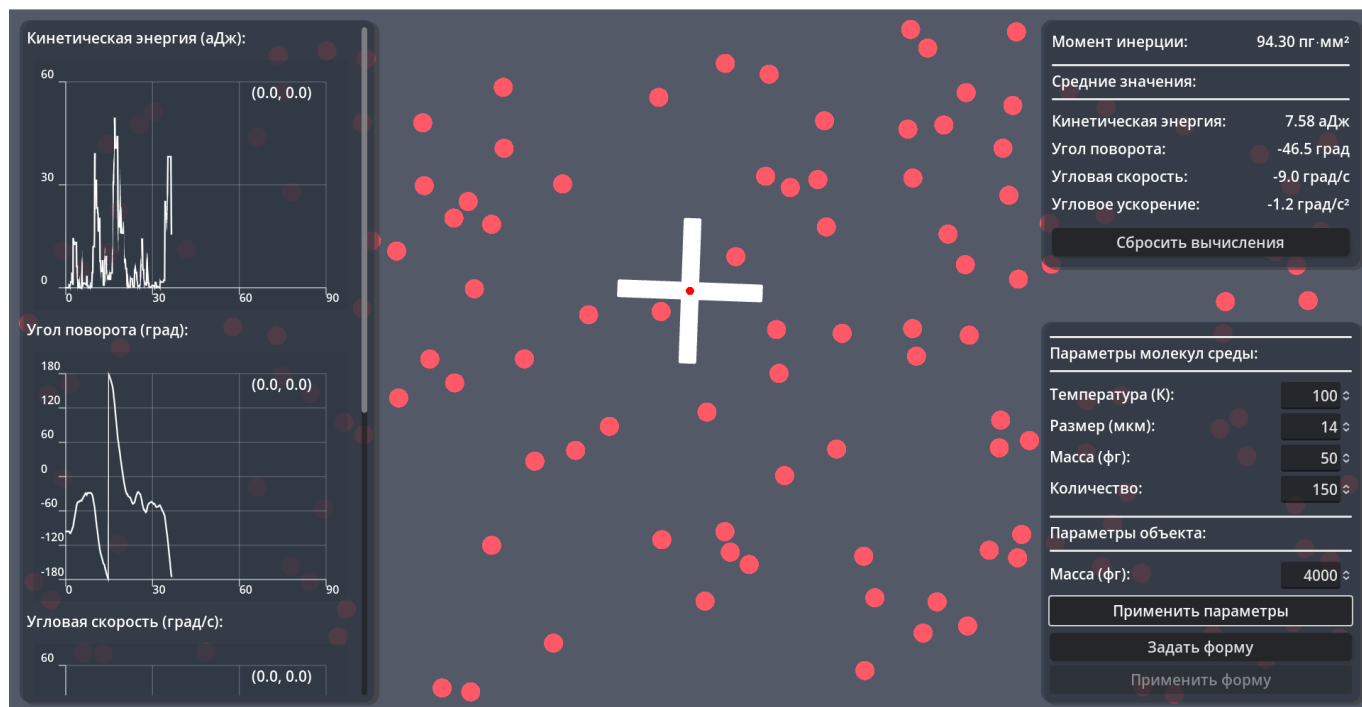


Рис. 6: Изменена масса молекул среды

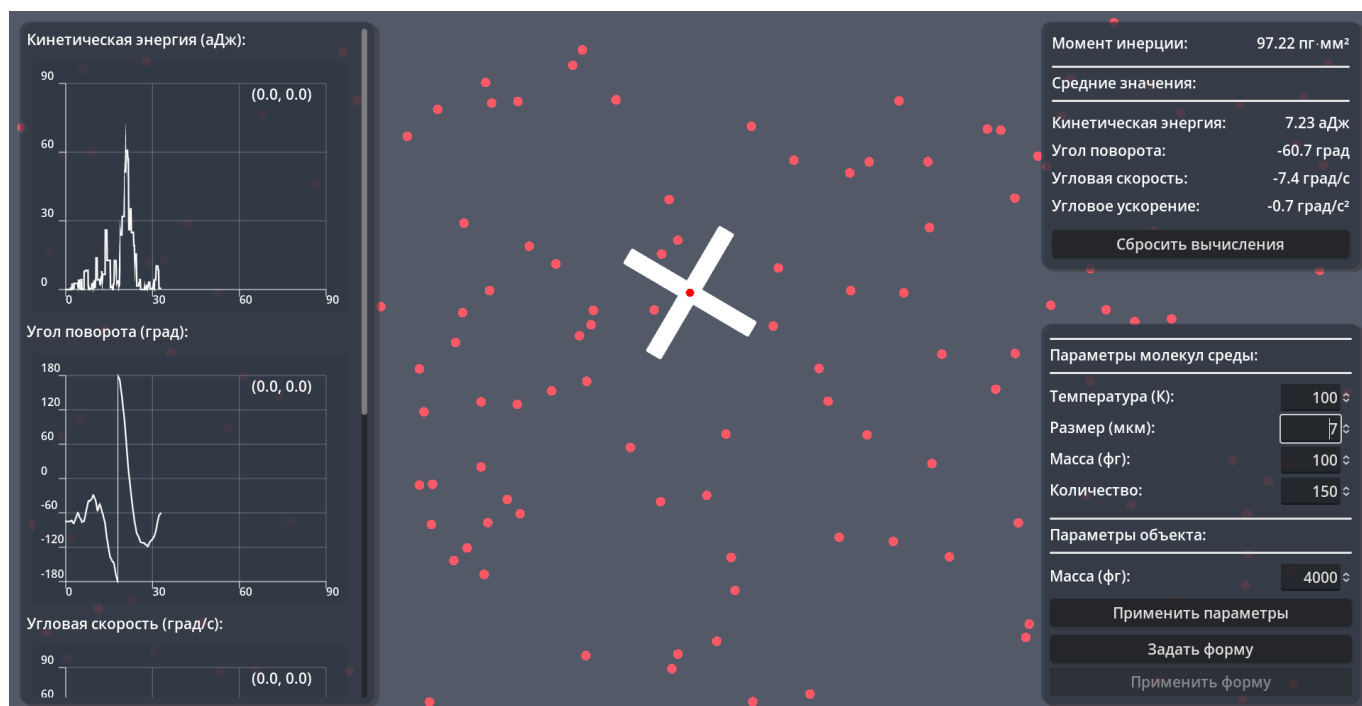


Рис. 7: Изменен момент инерции частицы

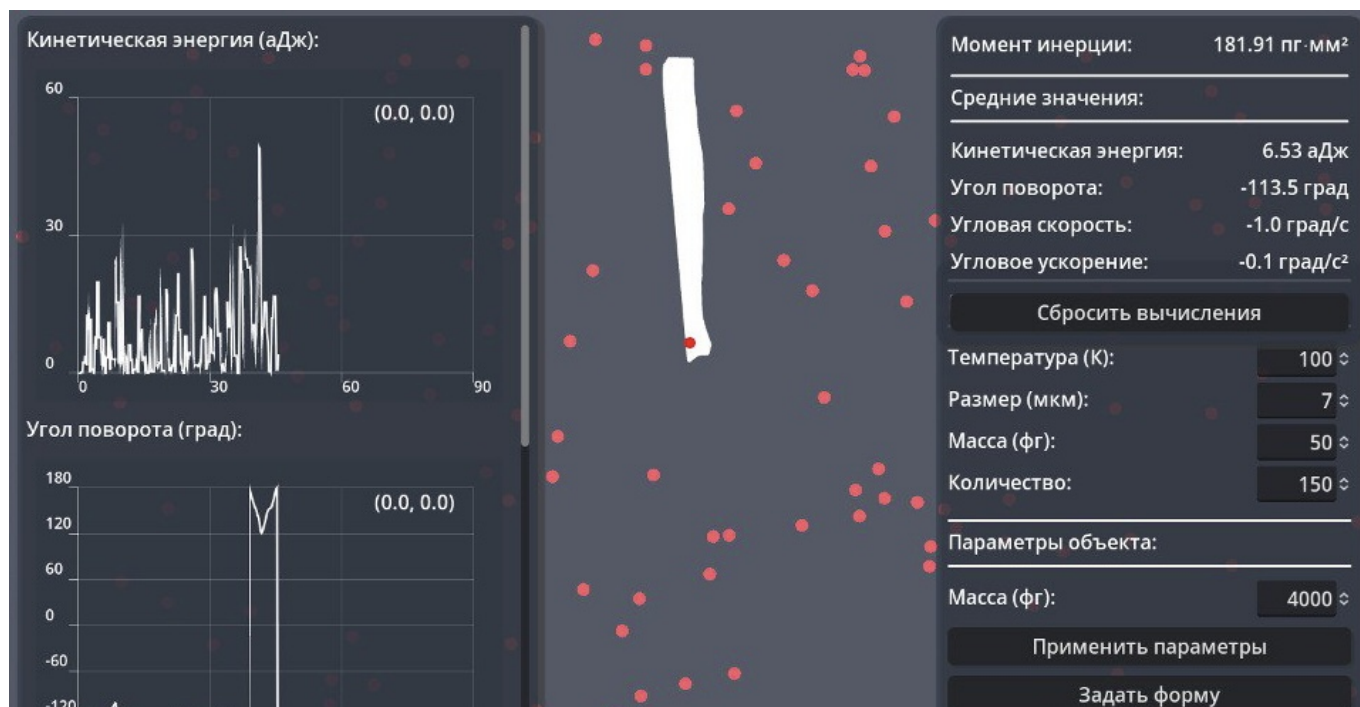
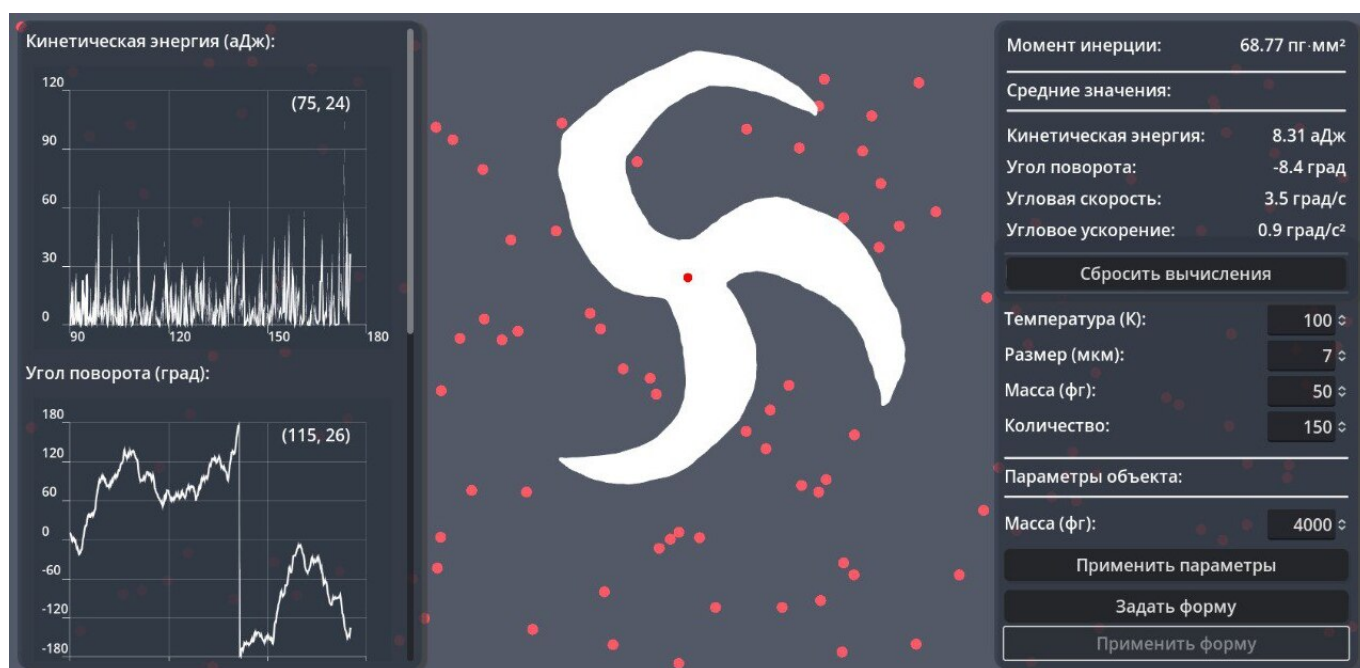


Рис. 8: Изменена форма частицы



## Возможные применения программы

1. При малом числе молекул видно, как каждый удар отражается на графиках: после удара угол поворота изменяется линейно, а угловая скорость остается постоянной. С помощью этих графиков можно продемонстрировать производную и интеграл.
2. Поскольку пользователь может нарисовать частицу любой формы, эта демонстрация может быть использована для снятия стресса. Пользователь может изобразить объект, вызывающий у него дискомфорт, и наблюдать, как маленькие частицы "ударяют" его. Тем

самым, пользователь безопасно освобождается от негативных чувств, не нанося вреда объекту.

## **Источники**

1. Вывод теоремы о равномерном распределении энергии по степеням свободы