

Sokrészecskés rendszerek

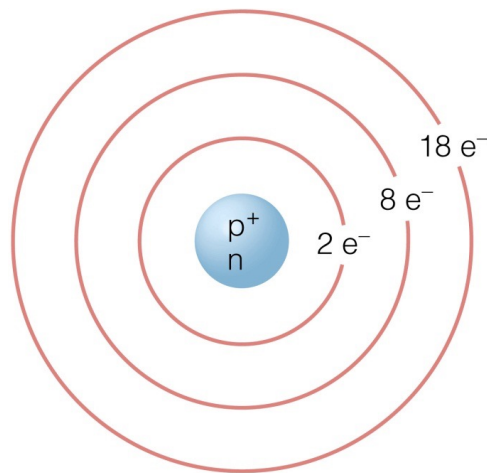
Boltzmann-eloszlás

Gáz-, folyadék- és szilárd halmazállapot

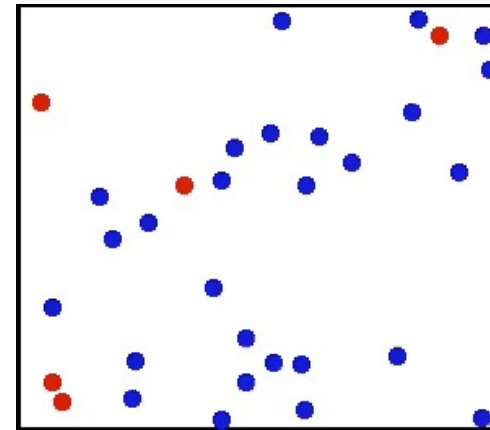
Dr. Mártonfalvi Zsolt
egyetemi docens

Atomoktól a sokrészecskés rendszerekig

Atom



“Sokrészecskés rendszer”



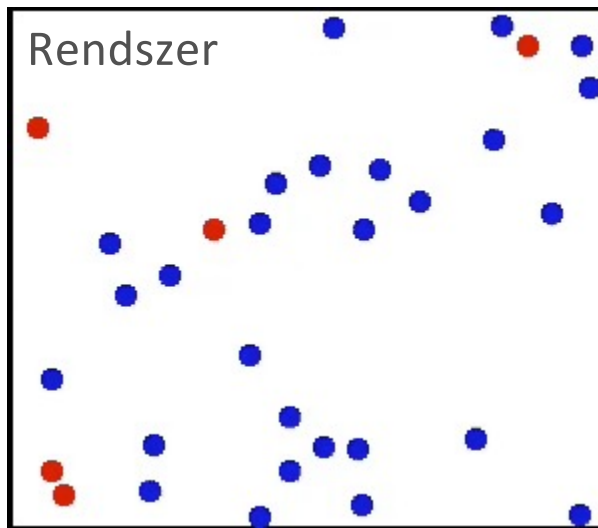
- Mi az a rendszer?
- Hány részecske számít „soknak”??
- Milyen a rendszer belső „szerkezete”?

A rendszer leírható

makroszkopikusan (p, V, T, n) vagy **mikroszkopikusan**:

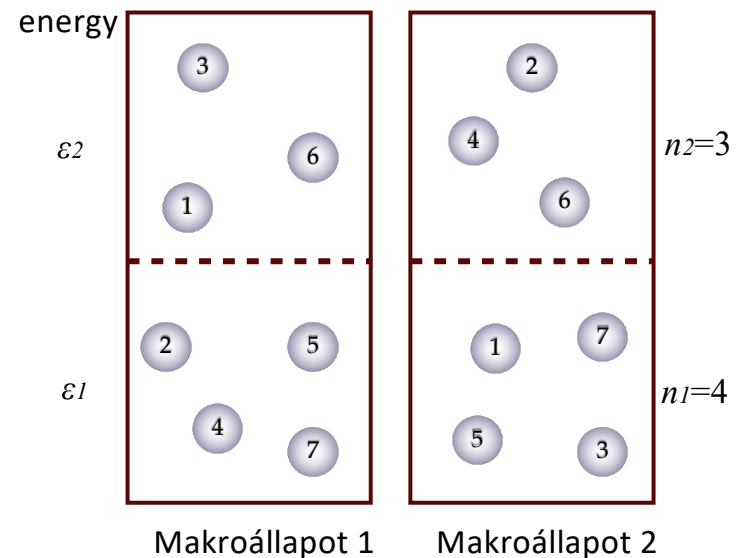
Minden egyes konkrét részecske jellemzésével (pl. energia)

Minden egyes részecske energiája más és más...



...de minden részecske egy szabadsági fokra eső átlagos energiája az átlagos energia $\frac{1}{2}kT$. ("ekvipartíció tétele").

A két **makroállapot** (1 and 2) azonos (egy adott energiaszinten lévő részecskék száma azonos), de a **mikroállapotok** (a részecskék elrendezése) különböző:



A rendszer makroszkopikus leírása: gáz sűrűségének (nyomásának) eloszlása gravitációs térben

a gáz sűrűsége arányos a nyomásával ($\rho \sim p$):

$$\Delta \rho = konst \cdot \Delta p$$

$$\Delta p = \Delta \rho / konst$$

$$\Delta \rho / konst = -\rho \cdot g \cdot \Delta h$$

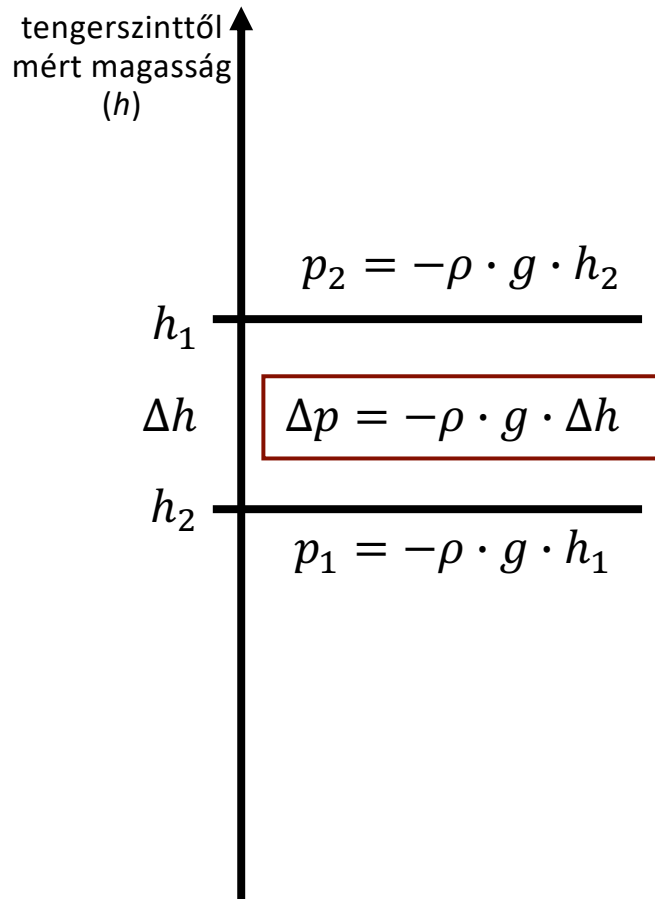
$$\Delta \rho / \Delta h = -konst \cdot \rho \cdot g$$

Ha egy változó (ρ) és annak megváltozása ($\Delta \rho$) arányos egymással, a megoldás egy exponenciális egyenlet:

$$\rho_h = \rho_0 \cdot e^{-konst \cdot g \cdot h}$$

Felhasználva az egyetemes gáztörvényt ($pV = NkT$) és a sűrűség definícióját ($\rho = mN/V$), illetve, hogy $\rho = konst \cdot p$, a "konst" kifejezhető mint m/kT , így:

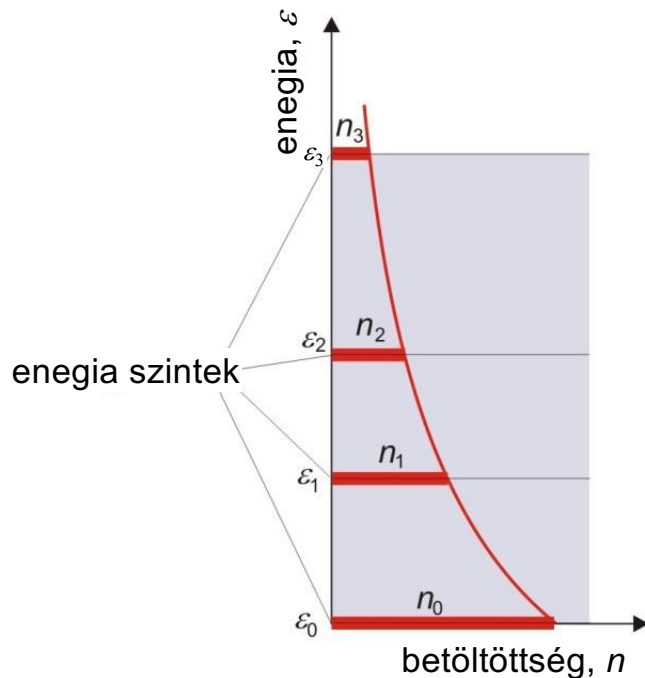
$$\rho_h = \rho_0 \cdot e^{-mgh/kT}$$



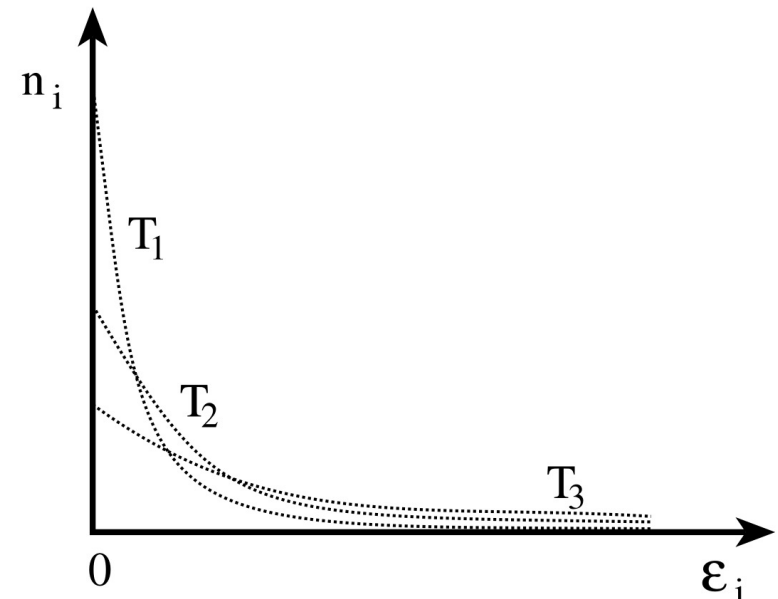
g : gravitációs gyorsulás
 m : részecske tömege

Boltzmann eloszlás: egy általános rendező elv

- Termikus egyensúlyban az energiaszintek betöltöttsége **exponenciális eloszlást** követ.
- A betöltöttségi arányt az **energiaszintek különbségének** és a **termikus energiának** az aránya szabja meg.
- Magasabb hőmérsékleten a magasabb energiájú állapotok betöltöttsége nagyobb.



$$\frac{n_i}{n_0} = e^{-\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_0}{k_B T}}$$



Boltzmann eloszlás alkalmazása

(példák)

1. Barometrikus magasságformula

A légnyomás a tengerszinttől távolodva egyre csökken.
 n : részecskék száma az egységnyi térfogatban (*koncentráció*)

$$\frac{n_h}{n_0} = e^{-\frac{mgh}{k_b T}}$$

n_h : részecskeszám h magasságban
 n_0 : részecskeszám a tengerszinten
 mgh : helyzeti energia

2. Fémek termikus emissziója

Termikus gerjesztés hatására elektronok távoznak a fém felületről. (pl.: Röntgen cső katódja)

$$\frac{n_i}{n_0} = e^{-\frac{W_{ki}}{k_b T}}$$

n_i : emittált elektronok száma
 W_{ki} : kilépési munka (egy e^- kiléptetéséhez szükséges munka)

Boltzmann eloszlás alkalmazása

(példák)

3. Nernst egyenlet

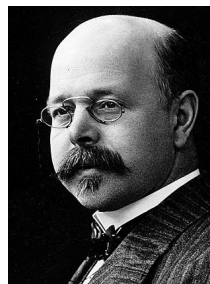
Ha két térrész között a töltött részecskék koncentrációja eltérő, elektromos potenciálkülönbség (feszültség) mérhető

$$\frac{c_A}{c_B} = e^{-\frac{Uq}{k_b T}} \quad \boxed{U = \frac{k_b T}{q} \ln \frac{c_B}{c_A}} = \frac{RT}{zF} \ln \frac{c_B}{c_A}$$

q : töltés

U_{AB} : B tér A-hoz viszonyított potenciálkülönbsége

Alapvető eloszlás a membránpotenciál leírásához



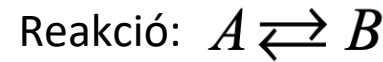
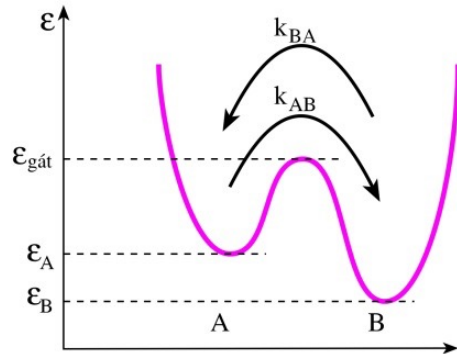
Walther Nernst (1864-1941)
Nobel-prize (1920)

Boltzmann eloszlás alkalmazása

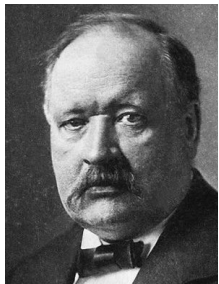
(példák)

4. Reakciók egyensúlya, sebessége

Az egyensúlyi állandó és ezen keresztül a a reakciósebesség szabályozása.



Egyensúlyi állandó: $K = \frac{n_A}{n_B} = e^{-\frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{k_B T}}$



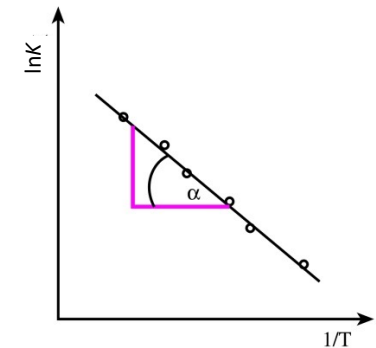
Svante Arrhenius (1859-1927)
Nobel-prize (1903)

Egyensúlyi állandó:

$$k_{AB} = konst \cdot e^{-\frac{\varepsilon_{gát} - \varepsilon_B}{k_b T}} \quad k_{BA} = konst \cdot e^{-\frac{\varepsilon_{gát} - \varepsilon_A}{k_b T}}$$

reakciósebességek aránya = egyensúlyi állandó:

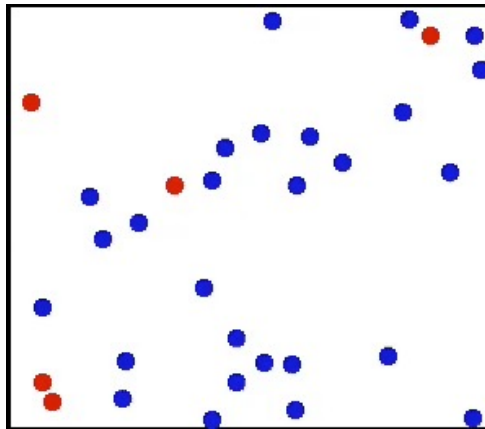
$$\frac{k_{BA}}{k_{AB}} = e^{-\frac{\varepsilon_{gát} - \varepsilon_B}{k_b T} + \frac{\varepsilon_{gát} - \varepsilon_A}{k_b T}} = e^{-\frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{k_B T}} = K$$



$$\ln K = -\frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{k_B} \frac{1}{T}$$

Az ideális gáz

- Nagy számú azonos részecskékből áll (Avogadro számnyi)
- Pontszerű részecskék, térfogatuk elhanyagolható
- Nincs sem vonzó sem taszító kölcsönhatás a részecskék között
- Ütközésük rugalmas (nincs energiavesztés)
- Csak egymással és az edény falával ütköznek
- A részecskék mozgása leírható a klasszikus Newtoni mechanikával..



Ideális gáz törvényei

Részecskék átlagos energiája
(ekvipartíció):

$$\frac{1}{2}m\bar{v}^2 = \frac{3}{2}k_B T$$

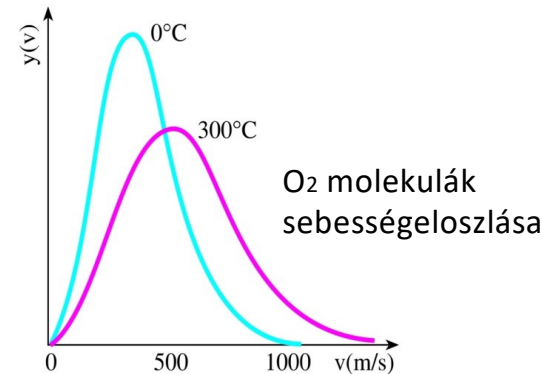
N részecskét tartalmazó
rendszer belső energiája:

$$E_b = \frac{3}{2}Nk_B T$$

Sebesség eloszlás: Maxwell-eloszlás

A hőmérséklet emelésével:

- A részecskék átlagos mozgási sebessége nő
- A sebességeloszlás kiszélesedik



Egyetemes gáztörvény: kapcsolat az állapotparaméterek között (p , V , T és N).

Boyle-Mariotte tv. $pV = konstans_I$

$$\frac{p}{T} \cdot \frac{V}{N} = k_{III} \cdot k_{IV}$$

$$pV = \frac{N}{N_A} k_B N_A T$$

Charles tv.

$$\frac{V}{T} = konstans_{II}$$

$$k_{III} \cdot k_{IV} = k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

$$(k_B \cdot N_A = R) \quad \left(n = \frac{N}{N_A} \right)$$

Gay-Lussac tv.

$$\frac{p}{T} = konstans_{III}$$

Avogadro tv.

$$\frac{V}{N} = konstans_{IV}$$

$$pV = Nk_B T$$

$$pV = nRT$$

A reális gáz

- A részecskék nem pontszerűek, térfogatuk (b) nem elhanyagolható.
Következmény: a bebolyongható térfogat =

$$V - Nb \quad N = \text{részecskeszám}$$

- Kölcsönhatások (a) hatnak a részecskék között.
Következmény: ideális gázhoz képest csökkent nyomás

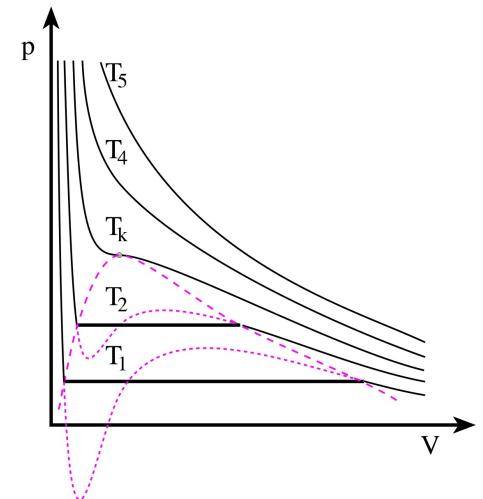
$$p = \frac{Nk_B T}{V - Nb} - an^2 \quad n = \text{részecskesűrűség } (N/V)$$

- Van der Waals egyenlet:

$$\left(p + a \frac{N^2}{V^2} \right) (V - Nb) = Nk_B T$$

- Van der Waals izotermák:

Kritikus hőmérséklet alatt (T_c), alacsony nyomásnál fázisátmenet jelentkezik (pl., kondenzáció)



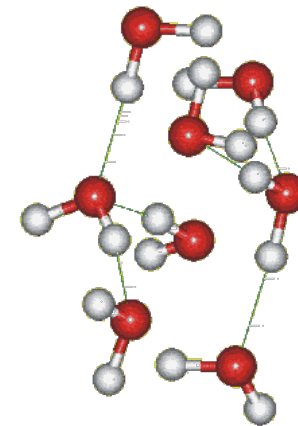
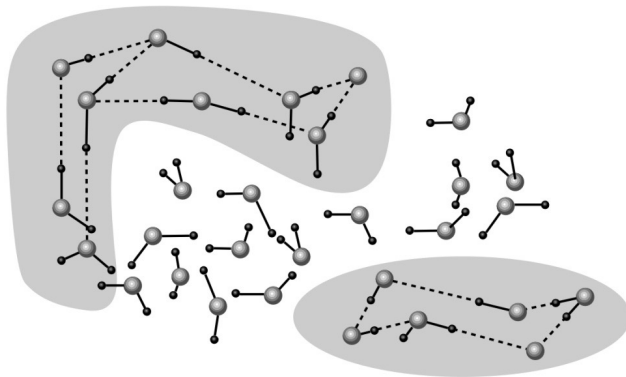
Folyékony halmazállapot

- Folyadékok térfogata állandó, alakjuk nem.
- Rövidtávú dinamikus rendezettség
- Izitróp: a fizikai tulajdonságok irányfüggetlenek
- Az állapot leírására használt fizikai mennyiségek:

sűrűség $\left[\frac{kg}{m^3} \text{ vagy } \frac{g}{cm^3} \right]$

viszkozitás (folyási ellenállás) $[Pa \cdot s]$

felületi feszültség (felület növeléséhez szükséges energia) $\left[\frac{J}{m^2} = \frac{N}{m} \right]$



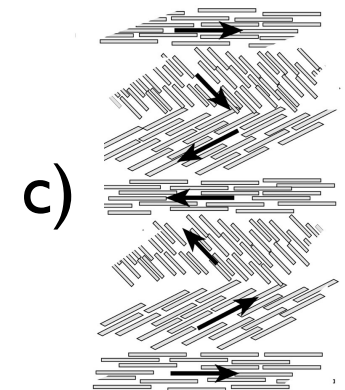
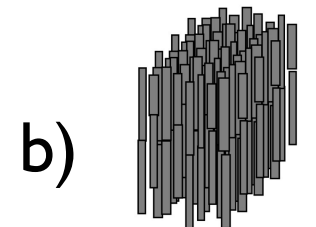
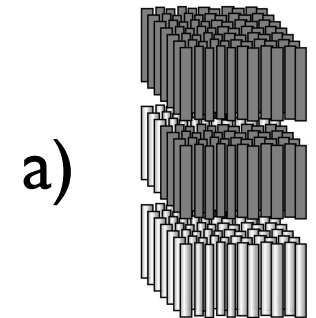
Folyadékkristályok

- **Mezomorf állapot:** anizotróp folyadék (irányfüggő fizikai tulajdonságok)
- a molekulák **rendezettek:** 1) transzlációs rend 2) orientációs rend

Típusai: a) szmektikus (transzlációs + orientációs rend)

b) nematikus (csak orientációs rend)

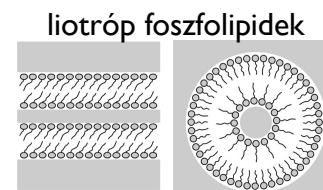
c) koleszterikus (csavart nematikus)



Termotróp folyadékkristályok: a rendezettség foka hőmérsékletfüggő.



Liotóp folyadékkristályok: a rendezettség koncentrációfüggő



Szilárd halmazállapot

Állandó térfogat és alak jellemzi



KRISTÁLYOS ANYAGOK

- hosszútávú térbeli rendezettség
- **anizotróp**: a fizikai tulajdonságok függenek az iránytól
- Térrácsos szerkezet, melynek egysége az **elemi cella**. Kölcsönhatások szerint lehet atom-, ion-, fémes- és molekularács. A kristályos rend általában csak mikroszkópikus távolságokra terjed ki (mikrokristályos anyag)
- pl: fémek többsége, NaCl, CaSO₄, kristálycukor, stb...

AMORF ANYAGOK

- rövidtávú térbeli rendezettség
- **izotróp**: a fizikai tulajdonságai irányfüggetlenek
- Pl: üveg



Obszidián: vulkanikus üveg (amorf)

Az anyag halmazállapotainak összehasonlítása

Halmazállapot		Részecskék elrendezése	Részecskék mozgása	Alak	Térfogat	Példák
1) Szilárd	<i>Kristályos</i>	Hosszú távú térbeli rendezettség	Csak rezgőmozgás a rácspontok körül	Saját alakja van	Állandó	Fémek, jég, kvarc
	<i>Amorf</i>	rövid távú térbeli rendezettség	Szabad elcsúszás, folyás lehetséges	Saját alakja van	Állandó	Üveg, fémüveg
2) Folyadék-kristály	<i>szmektikus</i>	Hosszútávú térbeli, dinamikus rendezettség	Laterális diffúzió	Tartály alakját felveszi	Állandó	Foszfolipid
	<i>nematikus</i>					
	<i>koleszterikus</i>					
3) Folyadék		Rövid távon ható, dinamikus rendezettség	Részecskék egymáson gördülnek, folyás	Tartály alakját felveszi	Állandó	Víz, alkohol, olaj
4) Gáz		Rendezetlen, részecskék nagyon távol egymástól	Szabad, egyenes vonalú mozgás, gyakori ütközésekkel	Tartály alakját és térfogatát is felveszi	Változó (kitölti a teret)	Levegő, oxigén, szén-dioxid

Feedback

