PODSTAWY FIZYKI IV

11.05.2020

ćwiczenia #11

PRZEWODNICTWO CIEPLNE i DYFUZJA

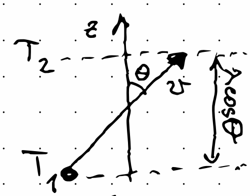
Zgodnie z prawem Fouriera strumień ciepła jest proporcjonalny do gradientu temperatury:

$$\vec{J}_Q = -\kappa \vec{\nabla} T, \qquad (11.1.)$$

gdzie κ to współczynnik przewodnictwa cieplnego, a $|\vec{J}_Q| = \frac{Q}{\Delta S \Delta t}$ jest ilością ciepła Q przepływającą przez powierzchnię ΔS prostopadłą do kierunku przepływu $\frac{\vec{J}_Q}{|\vec{J}_Q|}$ w jednostce czasu Δt.

Współczynnik przewodnictwa cieplnego można wyznaczyć dla gazów posługując się teorią kinetyczną. Niech w naczyniu o objętości V znajduje się N cząsteczek. W układzie wzdłuż osi z występuje gradient temperatur $\frac{\partial T}{\partial z}$.

Cząsteczka o prędkości v skierowanej pod kątem θ do osi z w czasie od ostatniego zderzenia przebywa drogę $\lambda\cos\theta$ w kierunku z, gdzie λ to średnia droga swobodna (patrz dygresja poniżej).



$(T_2 > T_1)$
$(\theta \in [0, \pi])$

Jeżeli ciepło molowe przypadające na cząsteczkę wynosi c, wtedy przenoszone przez tą cząsteczkę ciepło q wynosi

$$q = -c\Delta T = -c\frac{\partial T}{\partial z}\lambda\cos\theta$$

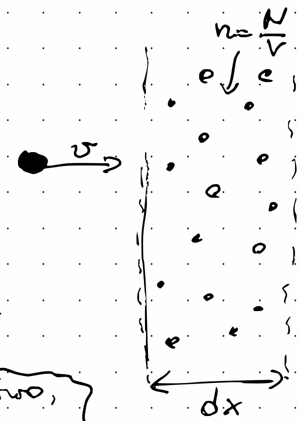
Znak minus jest związany z tym, że przepływ ciepła następuje od ciała o większej temp do ciała o mniejszej temperaturze.

DYGRESJA: Średnia droga swobodna

Średnia droga swobodna jest odległością jaką cząsteczka średnio pokonuje pomiędzy kolejnymi zderzeniami.

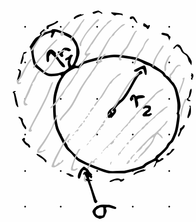
Załóżmy, że cząsteczka porusza się w obszarze w którym znajdują się inne nieruchome cząsteczki przypadkowo rozłożone w przestrzeni, a ich gęstość wynosi $n = N/V$, wtedy prawdopodobieństwo, że rozważana cząsteczka zderzy się z jedną z cząsteczek w warstwie o grubości dx wynosi:

$$n\sigma dx = n\sigma v dt,$$



gdzie σ to przekrój czynny, który to jest polem powierzchni mierzonym w płaszczyźnie prostopadłej do kierunku ruchu w które musi trafić pocisk (poruszająca się cząstka), aby nastąpiło zderzenie. Dla dwóch sztywnych kulek o promieniach r_1 i r_2 wynosi on:

$$\sigma = \pi (r_1 + r_2)^2$$



Korzystając z tego, że

$$P(t+dt) = P(t) + \frac{dP}{dt} dt,$$

Prawdopodobieństwo, że do zderzenia nie dojdzie przez czas t.

ponieważ $P(t+dt) = P(t)(1 - n\sigma v dt)$
[jest to prawdopodobieństwo, że nie dojdzie do zderzenia do czasu t pomnożone przez prawdopodobieństwo, że w czasie dt także nie wystąpi żadne zderzenie].
Dostajemy stąd, że

$$\frac{1}{P}\frac{dP}{dt} = -n\sigma v \overset{P(0)=1}{\Longrightarrow} P(t) = e^{-n\sigma v t}$$

Średni czas między zderzeniami wynosi zatem

$$\boxed{\tau = \int_0^\infty t e^{-n\sigma v t} dt = \frac{1}{n\sigma v},} \quad (11.2)$$

wtedy średnia droga swobodna wynosi

$$\boxed{\lambda = \langle v \rangle \tau,} \quad (11.3)$$

gdzie $\langle v \rangle = \int_0^\infty v f(v) dv$, a $f(v)$ to rozkład prędkości cząsteczek w gazie. Gdy atomy tarczy poruszają się, wtedy v w τ zastępujemy przez $\langle v_r \rangle$, gdzie $\vec{v}_r = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$ to prędkość względna między cząsteczkami, czyli

$$v_r^2 = v_1^2 + v_2^2 - 2\vec{v}_1\cdot\vec{v}_2 \Rightarrow \langle v_r^2\rangle = \langle v_1^2\rangle + \langle v_2^2\rangle = 2\langle v^2\rangle,$$

bo $\langle \vec{v}_1\cdot\vec{v}_2\rangle \sim \langle\cos\theta\rangle = 0$ [θ w tym przypadku to kąt między wektorem prędkości $\vec{v}_1$ i $\vec{v}_2$].

Stosując przybliżenie, że $\langle v_r\rangle \simeq \sqrt{2}\langle v\rangle$ (pomyłka mniejsza niż 10%, patrz dalsza część zajęć) dostajemy dla gazu doskonałego ($p = nk_BT$), że

$$\lambda = \langle v\rangle\tau = \frac{\langle v\rangle}{n\sigma\langle v_r\rangle} \simeq \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma} = \frac{k_BT}{\sqrt{2}p\sigma} \qquad (11.4.)$$

Wracamy do modelu kinetycznego przewodnictwa cieplnego dla gazów. Całkowity strumień ciepła transportowany przez cząsteczki wynosi zatem (patrz ćwiczenia #4, równanie (4.3))

$$J_{Q,z} = \int_0^\infty\int_0^\pi dj(v,\theta)\left[-c\frac{\partial T}{\partial z}\lambda\cos\theta\right] =$$

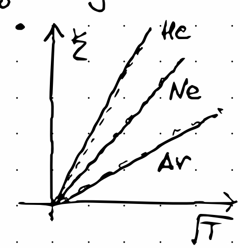
$$= -\frac{1}{2}nc\lambda\underbrace{\int_0^\infty v f(v)\,dv}_{\langle v\rangle}\frac{\partial T}{\partial z}\int_0^\pi\cos^2\theta\sin\theta\,d\theta = -\frac{1}{3}nc\lambda\langle v\rangle\frac{\partial T}{\partial z},$$

czyli współczynnik przewodnictwa cieplnego wynosi

$$\boxed{\kappa = \frac{1}{3}nc\lambda\langle v\rangle} \qquad (11.5.)$$

Wnioski:

- κ jest niezależne od ciśnienia gazu w stałej temperaturze, bo $\lambda\propto n^{-1}$, czyli $\kappa\propto n^0$.
- κ jest proporcjonalne do $\sqrt{T}$, bo $\langle v\rangle \propto \left(\frac{T}{\mu}\right)^{1/2}$, gdzie μ to masa molowa (pokażemy to w dalszej części notatek).



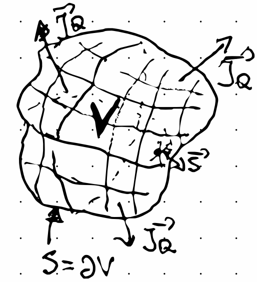
• Równanie przewodnictwa cieplnego

Rozważmy objętość V zamkniętą przez powierzchnię S. Strumień ciepła przez tę powierzchnię wynosi

$$\Phi_Q = \oint_S \vec{J}_Q\cdot d\vec{S}$$

$$\Phi_Q = \oint_S \vec{J}_Q \cdot d\vec{S} = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q \, dV =$$

$$= \int_V \left(-\kappa \, \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} T\right) dV = \int_V \left(-\kappa \, \nabla^2 T\right) dV \quad (*)$$



Utrata ciepła w małej kostce o objętości dV na jednostkę czasu wynosi:

$$dQ = -dm \, c_w \frac{\partial T}{\partial t} = -c_w \rho \frac{\partial T}{\partial t} dV, \quad \text{gdzie } \rho \text{ - gęstość}, \; c_w \text{ - ciepło właściwe}$$

czyli utrata ciepła w całej objętości wynosi

$$\Phi_Q = -\int_V c_w \rho \frac{\partial T}{\partial t} dV \quad (**)$$

przyrównanie $(*)$ do $(**)$ prowadzi do równania przewodnictwa cieplnego

$$\nabla^2 T - \frac{1}{a} \frac{\partial T}{\partial t} = 0, \qquad (11.6.)$$

gdzie $a = \frac{\kappa}{c_w \rho}$ to współ. wyrównywania temperatur (dyfuzyjność termiczna). Formalnie jest ono identyczne z równaniem dyfuzji (II prawo Ficka):

$$\nabla^2 n - \frac{1}{D} \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \qquad (11.7.)$$

gdzie D to współczynnik dyfuzji, a $n = \frac{N}{V}$ to koncentracja cząstek.

■ ZADANIA

1. Metalową kulę rozgrzaną do temperatury T_1 zanurzono w wodzie o temperaturze T_0. Znaleźć temperaturę wewnątrz kuli $T(r,t)$ w funkcji czasu i odległości od jej środka. Kula ma promień R, gęstość ρ, ciepło właściwe c_w oraz współczynnik przewodnictwa cieplnego κ. Wykonać obliczenia dla $T_1 = 100°C$, $T_0 = 0°C$, kula żelazna o $R = 30\,cm$, $\kappa = 60 \frac{W}{m \cdot K}$, $\rho = 7{,}8 \; g/cm^3$, $c_w = 440 \; J/kg \cdot K$.

Rozwiązanie:

Rozważany problem posiada symetrię sferyczną, tzn. $T(r,t)$ nie zależy od θ i φ. Przyjmujemy, że woda tylko odbiera ciepło i możemy założyć, że na powierzchni kuli $T=T_0$.
Wygodnie jest wprowadzić zmienną $\phi = T(r,t) - T_0$, wtedy warunki brzegowe/początkowe mają postać:

$$\forall t \quad \phi(R,t) = 0 \qquad (1)$$

$$\phi(r,0) = \begin{cases} T_1 - T_0 = \phi_0 & , \; r < R \\ 0 & , \; r \geq R \end{cases} \qquad (2)$$

Rozważamy równanie $\nabla^2 \phi(r,t) = \frac{1}{a}\frac{\partial \phi}{\partial t}$, które w zmiennych sferycznych ma postać:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \phi}{\partial r}\right) = \frac{1}{a}\frac{\partial \phi}{\partial t}$$

Separujemy zmienne: $\phi(r,t) = \mathcal{U}(r)\cdot\Theta(t)$, wtedy

$$\Theta(t)\,\nabla^2\mathcal{U}(r) = \frac{1}{a}\mathcal{U}(r)\frac{\partial\Theta}{\partial t} \Rightarrow \frac{\nabla^2\mathcal{U}(r)}{\mathcal{U}(r)} = \frac{1}{a}\frac{1}{\Theta(t)}\frac{\partial\Theta(t)}{\partial t}$$

Jeżeli równość ma być spełniona dla wszystkich r oraz t to obie strony muszą być stałe:

$$\frac{1}{a}\frac{1}{\Theta}\frac{d\Theta}{dt} = \frac{\nabla^2\mathcal{U}}{\mathcal{U}} = -\gamma^2 = \text{const}, \text{ czyli}$$

$$\frac{\partial\Theta}{\partial t} = -a\gamma^2\Theta \Rightarrow \quad \Theta(t) = A e^{-a\gamma^2 t}$$

Z drugiej strony: $\nabla^2\mathcal{U}(r) = -\gamma^2\mathcal{U}(r)$, czyli

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathcal{U}}{dr}\right) = \underbrace{\frac{1}{r^2}\left[2r\frac{d\mathcal{U}}{dr} + r^2\frac{d^2\mathcal{U}(r)}{dr^2}\right]}_{=\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\mathcal{U})} = -\gamma^2\mathcal{U}$$

Wprowadzamy funkcję $\chi(r) = r\mathcal{U}(r)$, wtedy

$$\frac{d^2 x}{dr^2} + \gamma^2 x = 0 \Rightarrow x(r) = B\sin\gamma r + C\cos\gamma r,$$

czyli $\quad u(r) = B\,\frac{\sin\gamma r}{r} + C\,\frac{\cos\gamma r}{r}$

dla $r=0$ rozwiązanie musi być skończone, czyli $C=0$.

Rozwiązanie ma więc postać:

$$\phi(r,t) = Ae^{-a\gamma^2 t}\, B\,\frac{\sin\gamma r}{r}$$

Warunek brzegowy (1): $\quad \phi(R,t)=0 \Rightarrow B\,\frac{\sin\gamma R}{R} = 0,$

czyli $\gamma R = n\pi$, $\quad n \in \mathbb{N}$

$$\gamma_n = \frac{n\pi}{R},$$

zatem pełne rozwiązanie ma postać superpozycji:

$$\phi(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-a\gamma_n^2 t}\,\frac{\sin\gamma_n r}{r} \qquad \left(\begin{array}{c}\text{gdzie}\\ A_n = AB_n\end{array}\right)$$

Teraz skorzystamy z warunku brzegowego (2):

$\phi(r,0) = \phi_0\;$ dla $\; r<R,$

$\phi(r,0)\cdot r = \phi_0 \cdot r = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\gamma_n r,\;$ ale jest to

rozwinięcie Fouriera funkcji $\phi_0 r$!

Szereg Fouriera

$$f(x) = \frac{a_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty}\left[a_n\cos(nx) + b_n\sin(nx)\right],$$

gdzie $\quad a_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\cos(nx)\,dx \quad$ dla $n \geq 0$

$\qquad\;\; b_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\sin(nx)\,dx \quad$ dla $n \geq 1$

W naszym przypadku $\quad nx = \gamma_n r = \frac{n\pi}{R} r \Rightarrow x = \frac{\pi r}{R},$

$$dx = \frac{\pi}{R}\,dr$$

$$A_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\sin(nx)\,dx = \frac{1}{\pi}\int_{-R}^{R}\phi_0 r\sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right)\frac{\pi}{R}\,dr =$$

$$= \frac{\Phi_0}{R}\int_{-R}^{R} r\sin\left(\frac{\pi r n}{R}\right)dr = \frac{\Phi_0}{R}\int_{-R}^{R} r\sin(\gamma_n r)\,dr =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{przez części:} \\ \int \underset{f}{x}\, \underset{g'}{\sin ax}\, dx = -\underset{fg}{\frac{x}{a}\cos ax} + \underset{f'g}{\frac{1}{a}\int \cos(ax)\,dx} = -\frac{x}{a}\cos ax + \frac{1}{a^2}\sin ax \end{array} \right\}$$

$$= \frac{2\phi_0}{R}\left[\frac{\sin\gamma_n r}{\gamma_n^2} - \frac{r}{\gamma_n}\cos\gamma_n r\right]_0^R = \frac{2\phi_0}{R}\left[\frac{\sin\gamma_n R}{\gamma_n^2} - \frac{R}{\gamma_n}\cos\gamma_n R\right] =$$

$$= \frac{2\phi_0}{R}\left[\frac{\sin n\pi}{(n\pi/R)^2} - \frac{R}{(n\pi/R)}\underbrace{\cos n\pi}_{(-1)^n}\right] = \frac{2\phi_0 R}{n\pi}(-1)^{n+1}$$

Ostatecznie dostajemy rozwiązanie:

$$\phi(r,t) = \frac{2\phi_0 R}{\pi r}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n} e^{-a\frac{n^2\pi^2}{R^2}t}\sin\left(\frac{n\pi}{R}r\right), \text{ czyli}$$

$$T(r,t) = T_0 + \frac{2(T_1-T_0)R}{\pi r}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n} e^{-a\frac{n^2\pi^2}{R^2}t}\sin\left(\frac{n\pi}{R}r\right) =$$

$$\simeq T_0 + \frac{2(T_1-T_0)R}{\pi r}\left[e^{-a\pi^2 t/R^2}\sin\left(\frac{\pi r}{R}\right) - \frac{1}{2}e^{-\frac{4a\pi^2}{R^2}t}\sin\left(\frac{2\pi r}{R}\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{3}e^{-9a\pi^2 t/R^2}\sin\left(\frac{3\pi r}{R}\right) + \ldots\right]$$

Rysunek $T(r,t)$ w Mathematice jest wrzucony na stronę ćwiczeń.

$\tau = \frac{R^2}{a\pi^2}$ jest „charakterystycznym czasem" zaniku.

a) dla środka kuli $r = 0$ $\left\{\sin(ax) \xrightarrow[x\to 0]{} ax\right\}$

$$T(0,t) \to T_0 + \frac{2(T_1-T_0)R}{\pi r}\left[e^{-t/\tau}\frac{\pi r}{R} - \frac{1}{2}e^{-4t/\tau}\frac{2\pi r}{R} + \frac{1}{3}e^{-9t/\tau}\frac{3\pi r}{R} + \ldots\right] =$$

$$= T_0 + 2(T_1 - T_0)\left[e^{-t/\tau} - e^{-4t/\tau} + e^{-9t/\tau} + \ldots\right] \simeq$$

$$\simeq T_0 + 2(T_1-T_0)e^{-t/\tau} \quad \text{dla } t \gg \tau.$$

b) dla $t \gg \tau$ pomijamy wkłady wyższego rzędu w szeregu, wtedy

$$T(r,t) \simeq T_0 + \frac{2(T_1-T_0)R}{\pi r} e^{-t/\tau} \sin\left(\frac{\pi r}{R}\right)$$

Dla żelaza: $a = 1{,}75 \times 10^{-5}\ m^2/s$

$$\tau = 521\ s$$

Temperatura w środku kuli:

$$T(0,\tau) = 0°C + 200°C \times \left[e^{-1} - e^{-4} + e^{-9} + \dots\right] \simeq 69°C$$

$$T(0,2\tau) = 0°C + 200°C \times \left[e^{-2} - e^{-8} + e^{-18} + \dots\right] \simeq 27°C$$

$$T(0,3\tau) = 0°C + 200°C \times e^{-3} \simeq 10°C$$

2) Pokazać, że jednowymiarowe równanie dyfuzji (II prawo Ficka) ma ogólne rozwiązanie o postaci:

$$n(x,t) = A(t)\, e^{-a(t)x^2}$$

Wyznaczyć postać funkcji $A(t)$ i $a(t)$. Przyjąć, że $n(x,t)$ jest symetryczna względem $x=0$.

Rozwiązanie:

$n(x,t)$ – liczba cząstek na jednostkę długości (koncentracja)

D – stała dyfuzji

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \qquad (*)$$

Różniczkujemy $n(x,t) = A(t)\, e^{-a(t)x^2}$

$$\frac{\partial n}{\partial x} = -2a(t)x\,A(t)\,e^{-a(t)x^2}$$

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = -2a(t)A(t)e^{-a(t)x^2} + 4a^2(t)x^2A(t)e^{-a(t)x^2}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{dA(t)}{dt} e^{-a(t)x^2} - A(t)x^2 \frac{da(t)}{dt} e^{-a(t)x^2}$$

Wstawiamy to do $(*)$ wtedy $\left(\dot{A} = \frac{dA}{dt},\ \dot{a} = \frac{da}{dt}\right)$

$$\left[\dot{A} - A\dot{a}x^2\right]e^{-ax^2} = DA\left[4a^2x^2 - 2a\right]e^{-ax^2}$$

Równanie jest spełnione, gdy

$$\dot{A} = -A\,2Da \qquad \text{oraz} \qquad -A\dot{a} = 4DAa^2 \Rightarrow \dot{a} = -4Da^2$$

$$\frac{da}{a^2} = -4D\,dt \Rightarrow -\frac{1}{a} = -4Dt + \text{const},$$

chcemy by rozwiązanie było symetryczne względem x, więc kładziemy $\text{const} = 0$, czyli

$$a(t) = \frac{1}{4Dt}$$

Wstawiamy to do równania na A, wtedy

$$\dot{A} = -A\,2D\,\frac{1}{4Dt} = -\frac{A}{2t} \Rightarrow \frac{dA}{A} = -\frac{dt}{2t} \Rightarrow \ln A = \ln t^{1/2} + \text{const}$$
$$\Rightarrow A(t) = \frac{A_0}{\sqrt{t}},$$

$A_0 = \text{const}$

Ostatecznie dostajemy, że

$$n(x,t) = \frac{A_0}{\sqrt{t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

Zauważmy, że dla $t \to 0$ dostajemy, że $n(x,t) \to C\,\underbrace{\delta(x)}_{\text{delta Diraca}}$ (C – stała)

3) Przyjmując, że w chwili początkowej ($t=0$) w punkcie $x=0$ umieszczamy M cząsteczek pewnej substancji znaleźć rozwiązanie jednowymiarowego równania dyfuzji (tj. w jaki sposób dodana substancja ulega dyfuzji) z tym warunkiem początkowym. Wyznaczyć po jakim czasie w punkcie $x=0$ koncentracja dyfundującej substancji będzie największa i ile ona wynosi? Oblicz średnią odległość kwadratową $\langle x^2 \rangle$ w funkcji czasu.

Rozwiązanie:

Warunek początkowy możemy zapisać jako: $n(x,0) = M\,\delta(x)$
Wiedząc, że rozwiązanie otrzymane w zad. 2 ma własność

$$n(x,t) \xrightarrow[t\to 0]{} C\,\delta(x),$$

(C – stała)

więc ponieważ liczba cząsteczek nie ulega zmianie mamy

$$M = \int_{-\infty}^{\infty} n(x,t)\,dx = A_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-x^2/4Dt}\,dx = \left\{ \eta^2 = \frac{x^2}{4Dt},\ d\eta = \frac{dx}{\sqrt{4Dt}} \right\} =$$

$$= A_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{4Dt}\,\frac{1}{\sqrt{t}}\,e^{-\eta^2}\,d\eta = A_0\sqrt{4\pi D} \Rightarrow A_0 = \frac{M}{\sqrt{4\pi D}},$$

wtedy rozwiązanie ma postać:

$$n(x,t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

Maksymalna koncentracja w punkcie $x = x_0$:

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{x=x_0} = \frac{M}{\sqrt{4\pi D}}\left(-\frac{1}{2} t^{-3/2} e^{-x_0^2/4Dt} + t^{-1/2}\frac{1}{t^2}\frac{x_0^2}{4D} e^{-x_0^2/4Dt}\right) =$$

$$= \frac{M}{\sqrt{4\pi D}} e^{-x_0^2/4Dt}\left[-\frac{1}{2}t^{-3/2} + \frac{x_0^2}{4D} t^{-5/2}\right] = 0 \Rightarrow t_{max} = \frac{x_0^2}{2D}$$

$$n_{max}(x_0, t_{max}) = \frac{M}{\sqrt{4\pi D \frac{x_0^2}{2D}}} e^{-\frac{x_0^2 2D}{4D x_0^2}} = \frac{M}{\sqrt{2\pi}\, x_0} e^{-1/2} = \frac{M}{\sqrt{2\pi e}} \frac{1}{x_0}$$

n_{max} nie zależy od D.

W powietrzu $D \simeq 2 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$

Kiedy pojawi się maksimum koncentracji w odległości 4 m?

$$t_{max} = \frac{x_0^2}{2D} = \frac{16\, m^2\, s}{4 \cdot 10^{-5}\, m^2} = 4 \times 10^5\, s = 111\, h.$$

Średnia odległość kwadratowa wynosi

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\, n(x,t)\, dx = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx$$

Wiemy, że $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, różniczkując po parametrze dostajemy:

$$\frac{d}{da}\left(e^{-ax^2}\right) = -x^2 e^{-ax^2}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-ax^2) = -\frac{d}{da}\sqrt{\frac{\pi}{a}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}},$$

czyli

$$\langle x^2 \rangle = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{(4Dt)^{-3}}} = \frac{M}{4}\sqrt{4^3 (Dt)^2} = 2MDt,$$

czyli $\sqrt{\langle x^2 \rangle} \sim \sqrt{t}$

DYGRESJA: Funkcje Greena

Rozważmy równanie typu równania dyfuzji:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha^2}\frac{\partial u}{\partial t}$$

Wykonując transformatę Fouriera: $u(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{u}(k,t) e^{ikx} dk$ otrzymujemy

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{u} e^{ikx} dk = -k^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{u} e^{ikx} dk = \frac{1}{\alpha^2}\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{u} e^{ikx} dk$$

$$\Rightarrow \qquad -k^2 \tilde{u} = \frac{1}{\alpha^2}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t}$$

Rozwiązując to równanie różniczkowe z warunkiem brzegowym $u(x,t=t') = \delta(x-x')$ mamy:

$$\frac{d\tilde{u}}{\tilde{u}} = -k^2\alpha^2 dt \Rightarrow \tilde{u}(k,t) = e^{-\alpha^2 k^2 (t-t')} \tilde{u}(k,t')$$

$$\tilde{u}(k,t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \delta(x-x') dx = \frac{e^{-ikx'}}{2\pi}$$

Obliczając odwrotną transformatę Fouriera dostajemy

$$u(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{u}(k,t) e^{ikx} dk =$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')} e^{-k^2\alpha^2(t-t')} dk = \left\{ \begin{array}{l} \text{uzupełniamy} \\ \text{do kwadratu} \end{array} \right\} =$$

$$= \frac{1}{[4\pi\alpha^2(t-t')]^{1/2}} \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4\alpha^2(t-t')} \right] = G(x,x';t,t')$$

Funkcję tą nazywamy funkcją Greena dla równania dyfuzji. Za jej pomocą licząc splot z dowolnym warunkiem początkowym możemy dostać rozwiązanie

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x,x';t,0)\, \underbrace{u(x',0)}_{\text{warunek początkowy}}\, dx'$$

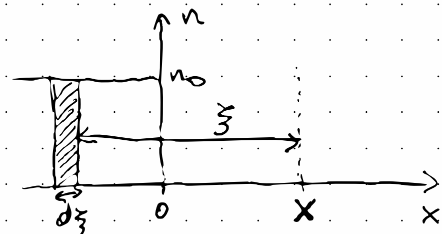
W analogiczny sposób tzn. przyjmując jako warunek początkowy funkcję delta Diraca możemy znaleźć funkcje Greena dla innych równań różniczkowych.
W kwantowej teorii pola pełnią one szczególnie ważną rolę, bo odpowiadają one tzw. propagatorom cząstek, które są wykorzystywane do konstrukcji szeregu perturbacyjnego.

4 Znaleźć rozwiązanie jednowymiarowego równania dyfuzji dla warunku początkowego:

$$n(x,t=0) = \begin{cases} n_0, & x \le 0 \\ 0, & x > 0 \end{cases}$$

Rozwiązanie:

Znamy rozwiązanie dla rozkładu w cienkiej warstwie $n_0 \sim \delta(x)$.
Równanie jest liniowe, więc suma rozwiązań jest rozwiązaniem.



Konstruujemy rozwiązanie dla odległości x przez wysumowanie wkładów od nieskończenie wielu cienkich warstw. W warstwie $d\xi$: $M = n_0 d\xi$, a jej przyczynek w punkcie x wynosi

$$dn = \frac{n_0 d\xi}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4Dt}\right)$$

Sumujemy wszystkie przyczynki:

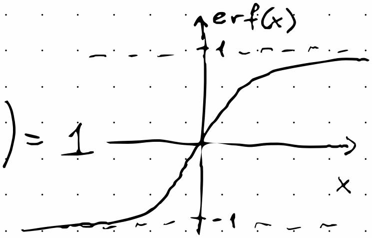
$$n(x,t) = \int dn = \frac{n_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_x^\infty e^{-\xi^2/4Dt} d\xi = \left\{ \eta = \frac{\xi}{\sqrt{4Dt}} \right\} =$$

$$= \frac{n_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{x/\sqrt{4Dt}}^{\infty} \sqrt{4Dt}\, e^{-\eta^2} d\eta = \frac{n_0}{\sqrt{\pi}} \int_{x/\sqrt{4Dt}}^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta$$

Wygodną funkcją, która pojawia się w podobnych zagadnieniach jest tzw. funkcja błędu (erf)

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-t^2}dt \quad \text{, czyli}$$

$$\mathrm{erf}(\infty) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty e^{-t^2}dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\Big(\frac{1}{2}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2}dt}_{\sqrt{\pi}}\Big) = 1$$



W naszym przypadku:

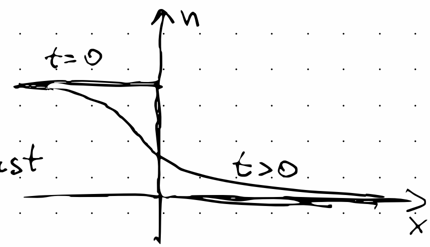
$$\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_z^\infty e^{-\eta^2}d\eta = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty e^{-\eta^2}d\eta - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^z e^{-\eta^2}d\eta = 1-\mathrm{erf}(z) \equiv \mathrm{erfc}(z)$$

uzupełniająca funkcja błędu

Rozwiązanie ma, więc postać:

$$n(x,t) = \frac{n_0}{2}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{x/(4Dt)^{1/2}}^{\infty} e^{-\eta^2}d\eta = \frac{n_0}{2}\Big(1-\mathrm{erf}\Big(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\Big)\Big) =$$

$$= \frac{n_0}{2}\,\mathrm{erfc}\Big(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\Big)$$



W punkcie $x=0$: $n(0,t) = \frac{n_0}{2} = \mathrm{const}$

ROZKŁAD PRĘDKOŚCI MAXWELLA-BOLTZMANNA

Rozkład Maxwella-Boltzmanna dla danej składowej v_i prędkości $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$ wynosi (wyprowadzenie w rozd. 5):

$$f(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}}\exp\Big(-\frac{m v_i^2}{2k_BT}\Big), \qquad (11.8)$$

gdzie m to masa cząstki, k_B to stała Boltzmanna. Rozkład Maxwella-Boltzmanna dla szybkości $v = |\vec{v}|$ jest dany równaniem

$$f(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}}\Big(\frac{m}{2k_BT}\Big)^{3/2} v^2 \exp\Big(-\frac{mv^2}{2k_BT}\Big) \qquad (11.9)$$

ZADANIA

5 W swojej oryginalnej pracy (1860r.) Maxwell wyprowadził rozkład nazywany dziś jego imieniem wychodząc z założenia, że płyn jest izotropowy, a składowe kartezjańskie prędkości składających się nań cząstek są niezależnymi zmiennymi losowymi. Wykazać, że rozkład Maxwella rzeczywiście wynika z tych założeń. Przy wyznaczaniu stałych dla rozkładu skorzystać ze wzoru na energię wewnętrzną jednoatomowego gazu doskonałego $U = \frac{3}{2} N k_B T$.

Rozwiązanie:

Z założenia o izotropowości płynu wynika, że gęstości rozkładu prawdopodobieństwa dowolnych składowych kartezjańskich prędkości cząsteczki płynu są identyczne i zależą jedynie od kwadratu tej składowej. Podobnie gęstość rozkładu prędkości cząsteczki zależy od kwadratu tej prędkości. Biorąc to pod uwagę oraz wykorzystując założenie o niezależności składowych v_x, v_y, v_z możemy stwierdzić, że

$$f(\vec{v}) = f(v^2) = g(v_x^2)\, g(v_y^2)\, g(v_z^2)$$

Musimy zatem wyznaczyć funkcję f, która spełnia równanie

$$f(x+y+z) = g(x)\, g(y)\, g(z)$$

dla dowolnych $x, y, z \geq 0$.

Różniczkując to równanie stronami raz względem x, raz względem y i raz względem z dostajemy: $(s = x+y+z)$

$$\frac{1}{f(s)} \frac{df}{ds} = \frac{1}{g(x)} \frac{dg}{dx}$$

$$\frac{1}{f(s)}\frac{df}{ds}=\frac{1}{g(y)}\frac{dg}{dy}$$

$$\frac{1}{f(s)}\frac{df}{ds}=\frac{1}{g(z)}\frac{dg}{dz}$$

Spełnienie tych równań jest możliwe tylko wtedy, gdy

$$\frac{1}{f}\frac{df}{ds}=-\beta=\text{const},$$

czyli $f(s)=Ce^{-\beta s}$, a więc

$$f(v^2)=Ce^{-\beta v^2}$$ (β musi być większe od zera)

Warunek normalizacji:

$$1=\int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{v})\,d^3v = C\int_0^\infty dv\,v^2\underbrace{\int_0^\pi \sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi}_{4\pi}\,e^{-\beta v^2}=$$

$$=4\pi C\int_0^\infty dv\,v^2e^{-\beta v^2}=2\pi C\int_{-\infty}^{\infty}dv\,v^2e^{-\beta v^2}=$$

$$=2\pi C\,\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\beta^3}}=C\,\frac{\pi^{3/2}}{\beta^{3/2}}\Rightarrow C=\frac{\beta^{3/2}}{\pi^{3/2}}$$

Rozkład szybkości:

$$f(v)=\int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{v}')\,\delta(v'-v)\,d^3v'=\frac{4\pi\beta^{3/2}}{\pi^{3/2}}v^2e^{-\beta v^2}$$

$$\langle v^2\rangle=\int_0^\infty dv\,\frac{4\pi\beta^{3/2}}{\pi^{3/2}}v^4e^{-\beta v^2}=\frac{4\pi\beta^{3/2}}{\pi^{3/2}}\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}v^4e^{-\beta v^2}dv=$$

$$=\frac{3\sqrt{\pi}}{4\beta^{5/2}}\,\frac{1}{2}\,\frac{4\pi\beta^{3/2}}{\pi^{3/2}}=\frac{3}{2}\frac{1}{\beta}$$

Korzystając z tego, że gaz doskonały daje wkład do U tylko od energii kinetycznej otrzymujemy:

$$U=\frac{3}{2}Nk_BT=N\cdot\frac{m}{2}\langle v^2\rangle=\frac{Nm}{4}\frac{3}{\beta}\Rightarrow\beta=\frac{m}{2k_BT}$$

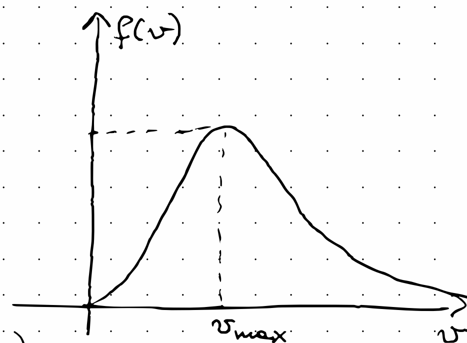
Dostajemy ostatecznie

$$f(v) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} 4\pi v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_BT}\right)$$

6 Rozkład prędkości cząsteczek pewnego gazu doskonałego jest dany rozkładem Maxwella-Boltzmanna. Znaleźć szybkość najbardziej prawdopodobną, a także średnią wartość szybkości $\langle v \rangle$.

Rozwiązanie:

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{3/2} v^2 e^{-\beta v^2}$$



Najbardziej prawdopodobna wartość prędkości:

$$\frac{df}{dv} = 4\pi \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{3/2} 2v \exp(-\beta v^2) +$$

$$+ 4\pi \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{3/2} v^2 (-\beta)\, 2v \exp(-\beta v^2) = 0$$

$$\Rightarrow \beta v_{max}^2 = 1 \Rightarrow v_{max} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} = \sqrt{\frac{2k_BT}{m}}$$

Wartość średnia prędkości:

$$\langle v \rangle = \frac{\int_0^\infty v f(v)\, dv}{\underbrace{\int_0^\infty f(v)\, dv}_{=1}} = \int_0^\infty v f(v)\, dv$$

$$\int_0^\infty v^3 \exp(-\beta v^2)\, dv = \left\{ \begin{matrix} u = x^2 \\ du = 2x\,dx \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \int_0^\infty u e^{-\beta u}\, du =$$

$$= \left\{ \begin{matrix} t = \beta u \\ dt = \beta du \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{1}{\beta^2} t e^{-t}\, dt = \frac{1}{2\beta^2} \underbrace{\int_0^\infty t e^{-t}\, dt}_{\text{funkcja } \Gamma} =$$

$$= \frac{\Gamma(1)}{2\beta^2} = \frac{1}{2\beta^2}, \quad \text{czyli}$$

$$\langle v \rangle = 4\pi \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{3/2} \frac{1}{2\beta^2} = 2\sqrt{\frac{1}{\pi\alpha}} = \sqrt{\frac{8k_BT}{m\pi}}$$

Dla cząsteczki azotu N_2 o $m = 28u$ $(1u = 1{,}66 \cdot 10^{-27}\ kg)$ w temperaturze $T = 300\ K$ mamy:

$$v_{max} = 422{,}1\ \frac{m}{s}$$

$$\langle v \rangle = 476{,}3\ \frac{m}{s}$$