

Белгілеулер және тұрақтылар

N — бөлшектер саны; v — зат мөлшері;

$n = N/V$ — сандық концентрация;

p — қысым, ал фазалық есептердегі p — импульс;

$\beta = 1/(k_B T)$. C_V — бүкіл жүйенің,

$C_{V,m}$ — бір мольдің жылу сыйымдылығы.

Барлық логарифмдер — натурал логарифмдер.

$k_B = 1.380649 \times 10^{-23}$ J/K;

$N_A = 6.02214076 \times 10^{23}$ mol⁻¹;

$R = N_A k_B = 8.314462618$ J/(mol K).

$h = 6.62607015 \times 10^{-34}$ J s;

$\hbar = h/(2\pi)$;

$c = 2.99792458 \times 10^8$ m/s;

1 eV = $1.602176634 \times 10^{-19}$ J.

Әлсіз идеал емес газдың вириалдық түзетуі

Әлсіз идеал емес біратомды газ.

Шарты. Диаметрі $d = 0.300 \text{ nm}$ қатты шарлардан тұратын классикалық біратомды газдың концентрациясы $n = 1.00 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$, көлемі $V = 1.00 \times 10^{-3} \text{ m}^3$, температурасы $T = 300 \text{ K}$. Екінші вириалдық коэффициентті, бірінші тығыздық түзетуін ескерген қысымды және ішкі энергияны табыңыз. Идеалдықтан ауытқудың аз екенін тексеріңіз.

Модель. Қос бөлшектің потенциалы $r < d$ кезінде шексіз, $r \geq d$ кезінде нөл. Кванттық алмасу әсерлері ескерілмейді. Қысым үшін $p = nk_B T [1 + B_2 n + \dots]$ өрнегін қолданамыз.

1. Екінші вириалдық коэффициент. Майер функциясы $f(r) = e^{-\beta u(r)} - 1$: шарлар қабысатын аймақта $f = -1$, сыртында $f = 0$. Сондықтан

$$B_2 = -\frac{1}{2} \int f(r) d^3r = -\frac{1}{2} 4\pi \int_0^d r^2 dr = \frac{2\pi d^3}{3}.$$

Диаметрді метрге ауыстырамыз: $d = 3.00 \times 10^{-10} \text{ m}$.

$$B_2 = 5.65487 \times 10^{-29} \text{ m}^3, \quad nB_2 = 5.65487 \times 10^{-3} \ll 1.$$

2. Қысымды есептеу. Идеал газ қысымы:

$$p_{\text{id}} = nk_B T = 4.141947 \times 10^5 \text{ Pa}.$$

Бірінші вириалдық түзетумен

$$p \simeq p_{\text{id}}(1 + nB_2) = 4.165369 \times 10^5 \text{ Pa}.$$

Салыстырмалы өсім $(p - p_{\text{id}})/p_{\text{id}} \simeq nB_2 = 0.5655\%$. Тебілу газ қысымын арттырады.

3. Ішкі энергияны табу. Бірінші түзету деңгейінде $F_{\text{ex}} = Nk_B T n B_2(T)$. $U = F - T(\partial F / \partial T)_{V,N}$ бойынша

$$U_{\text{ex}} = -Nk_B n T^2 \frac{dB_2}{dT} = 0,$$

өйткені қатты шарлардың B_2 коэффициенті температураға тәуелсіз. Рұқсат етілген конфигурацияларда потенциалдық энергия нөл, сондықтан классикалық қатты шарлар үшін ішкі энергия тек кинетикалық болады:

$$N = nV = 10^{23}, \quad U = \frac{3}{2} Nk_B T = 621.292 \text{ J}.$$

Жауабы. $B_2 = 5.655 \times 10^{-29} \text{ m}^3$; $p \simeq 416.5 \text{ kPa}$; қысым түзетуі 0.5655% ; $U = 621.3 \text{ J}$.

Түсіндіру. «Әлсіз идеал емес» дегеніміз бұл есепте потенциалдың әлсіздігі емес, тығыздыққа байланысты макроскопиялық түзетудің аздығы. Қатты өзек потенциалы күшті болса да, сиретілген газ үшін вириалдық жіктеу жарамды. Жоғары вириалдық мүшелер есептелген қысымда ескерілмеген.