

2012-2013 уч. год. Факультет электроники.
“Статистическая физика”
(задания по курсовой работе)

**Тема I. Термодинамика молекулярных газов.
Влияние электронных возбуждений.**

Теоретическая часть:

1. Модель Больцмановского газа. Область применимости модели.
2. Вывод выражений для основных термодинамических величин Больцмановского газа:

$F(T, V, N)$	(Свободная энергия)
$G(T, p, N)$	(Термодинамический потенциал Гиббса)
$U(T, V, N)$ и $U(T, p, N)$	(Внутренняя энергия)
$S(T, V, N)$ и $S(T, p, N)$	(Энтропия)
$\mu(T, V, N)$ и $\mu(T, p, N)$	(Химический потенциал)
$C_V(T, V, N)$ и $C_p(T, V, N)$	(Теплоемкости)

3. Вывод формул для вкладов электронных возбуждений в свободную энергию, во внутреннюю энергию, в энтропию, и в теплоемкость C_V молекулярного газа.

Расчетная часть:

Вариант Ia. Основной электронный терм молекулы NO есть дуплет (два близко расположенных уровня энергии), расстояние между которыми составляет $\Delta = 0,0153$ ЭВ. Оба уровня дуплета двукратно вырождены.

- 1) Оценить температуру $T_{эл}$, при которой $kT_{эл} \approx \Delta$. Какой физический смысл имеет эта температура?
- 2) Вывести формулу для вклада электронного дуплета $F_{эл}$ в свободную энергию газа.
- 3) Вывести формулу для вклада электронного дуплета $C_{эл}$ в молярную теплоемкость газа.
- 4) Вывести и обсудить приближенные выражения для $F_{эл}$ и $C_{эл}$ в предельных случаях $T \ll T_{эл}$ и $T \gg T_{эл}$.
- 5) Оценить вклад электронного дуплета в молярную теплоемкость газа NO при комнатных температурах $T \approx 20^\circ\text{C}$ и сравнить его с вкладом поступательного движения молекул.
- 6) Построить и обсудить графики зависимости $F_{эл}$ и молярной теплоемкости $C_{эл}$ от температуры. (**Графики строятся с использованием компьютера**).

Указание: Для наглядности следует строить графики зависимости свободной энергии на одну молекулу $F_{эл}/N$ (в ЭВ) и безразмерной теплоемкости $C_{эл}/R$ (R — газовая постоянная) от безразмерной температуры $T/T_{эл}$.

Вариант Ib. Основной электронный терм молекулы O_2 трехкратно вырожден (по значениям проекции спина молекулы), а первый возбужденный уровень энергии электронов (двукратно вырожденный) отделен от основного терма щелью $\Delta E = 0,974$ ЭВ.

- 1) Оценить температуру $T_{эл}$, при которой $kT_{эл} \approx \Delta E$. Какой физический смысл имеет эта температура?
- 2) Вывести формулу для вклада возбужденного электронного уровня $U_{эл}$ во внутреннюю энергию газа.
- 3) Вывести формулу для вклада возбужденного электронного уровня $C_{эл}$ в молярную теплоемкость газа.
- 4) Вывести и обсудить приближенные выражения для $U_{эл}$ и $C_{эл}$ в предельных случаях $T \ll T_{эл}$ и $T \gg T_{эл}$.
- 5) Оценить вклад возбужденного электронного уровня в молярную теплоемкость газа O_2 при комнатных температурах $T \approx 20^\circ\text{C}$ и сравнить его с вкладом поступательного движения молекул.
- 6) Построить и обсудить графики зависимости $U_{эл}$ и $C_{эл}$ от температуры. (**Графики строятся с использованием компьютера**).

Указание: Для наглядности следует строить графики зависимости внутренней энергии на одну частицу $U_{эл}/N$ (в ЭВ) и безразмерной теплоемкости $C_{эл}/R$ (R — газовая постоянная) от безразмерной температуры $T/T_{эл}$.

Тема II. Термодинамика молекулярных газов. Влияние колебаний атомов.

Теоретическая часть:

1. Модель Больцмановского газа. Область применимости модели.
2. Вывод выражений для основных термодинамических величин Больцмановского газа:

$F(T, V, N)$	(Свободная энергия)
$G(T, p, N)$	(Термодинамический потенциал Гиббса)
$U(T, V, N)$ и $U(T, p, N)$	(Внутренняя энергия)
$S(T, V, N)$ и $S(T, p, N)$	(Энтропия)
$\mu(T, V, N)$ и $\mu(T, p, N)$	(Химический потенциал)
$C_V(T, V, N)$ и $C_p(T, V, N)$	(Теплоемкости)

3. Вывод формул для вкладов колебаний атомов в свободную энергию, во внутреннюю энергию, в энтропию, и в теплоемкость C_V молекулярного газа.

Расчетная часть:

Вариант Па. Экспериментальное значение характеристической температуры для колебаний атомов в молекуле кислорода O_2 составляет $T_v = 2230^\circ K$.

- 1) Вывести приближенные выражения для вклада колебаний атомов $U_{\text{кол}}$ во внутреннюю энергию газообразного кислорода в предельных случаях $T \ll T_v$ и $T \gg T_v$.
- 2) Вывести приближенные выражения для вклада колебаний атомов $C_{\text{кол}}$ в молярную теплоемкость газообразного кислорода в предельных случаях $T \ll T_v$ и $T \gg T_v$.
- 3) Оценить вклад колебаний молекул в молярную теплоемкость газа при комнатных температурах $T \approx 20^\circ C$ и сравнить его с вкладом поступательного движения молекул.
- 4) Построить и обсудить графики зависимости $U_{\text{кол}}$ и $C_{\text{кол}}$ от температуры T для газообразного кислорода. (**Графики строятся с использованием компьютера**). Определить по графику, чему равно отношение $C_{\text{кол}}$ к классическому результату при температурах $T \approx 1000^\circ C$.

Указание: Для наглядности следует строить графики зависимости внутренней энергии на одну молекулу $U_{\text{кол}}/N$ (в ЭВ) и безразмерной теплоемкости $C_{\text{кол}}/R$ (R — газовая постоянная) от безразмерной температуры T/T_v .

Вариант Пб. Экспериментальное значение характеристической температуры для колебаний атомов в молекуле NO составляет $T_v = 2690^\circ K$.

- 1) Вывести приближенные выражения для вклада колебаний атомов $S_{\text{кол}}$ в энтропию газообразного NO в предельных случаях $T \ll T_v$ и $T \gg T_v$.
- 2) Вывести приближенные выражения для вклада колебаний атомов $C_{\text{кол}}$ в молярную теплоемкость газообразного NO в предельных случаях $T \ll T_v$ и $T \gg T_v$.
- 3) Оценить вклад колебаний молекул в молярную теплоемкость газа NO при комнатных температурах $T \approx 20^\circ C$ и сравнить его с вкладом поступательного движения молекул.
- 4) Построить и обсудить графики зависимости $S_{\text{кол}}$ и $C_{\text{кол}}$ от температуры T для газа NO. (**Графики строятся с использованием компьютера**). Определить по графику, чему равно отношение $C_{\text{кол}}$ к классическому результату при температуре $T = 1000^\circ C$.

Указание: Для наглядности следует строить график зависимости безразмерной энтропии на одну частицу $S_{\text{кол}}/Nk$ и безразмерной теплоемкости $C_{\text{кол}}/R$ (R — газовая постоянная) от безразмерной температуры T/T_v .

Вариант Пв. Экспериментальное значение характеристической температуры для колебаний атомов в молекуле азота N_2 составляет $T_v = 3340^\circ K$.

- 1) Вывести приближенные выражения для вклада колебаний атомов $F_{\text{кол}}$ в свободную энергию газообразного азота в предельных случаях $T \ll T_v$ и $T \gg T_v$.
- 2) Вывести приближенные выражения для вклада колебаний атомов $C_{\text{кол}}$ в молярную теплоемкость газообразного азота в предельных случаях $T \ll T_v$ и $T \gg T_v$.
- 3) Оценить вклад колебаний молекул в молярную теплоемкость азота при комнатных температурах $T \approx 20^\circ C$ и сравнить его с вкладом поступательного движения молекул.
- 4) Построить и обсудить графики зависимости $F_{\text{кол}}$ и $C_{\text{кол}}$ от температуры T для газообразного азота. (**Графики строятся с использованием компьютера**). Определить по графику, чему равно отношение $C_{\text{кол}}$ к классическому результату при температуре $T = 1500^\circ C$.

Указание: Для наглядности следует строить графики зависимости свободной энергии на одну молекулу $F_{\text{кол}}/N$ (в ЭВ) и безразмерной теплоемкости $C_{\text{кол}}/R$ (R — газовая постоянная) от безразмерной температуры T/T_v .