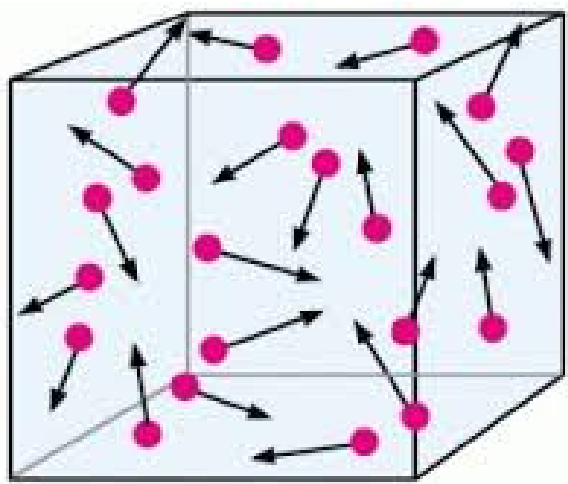
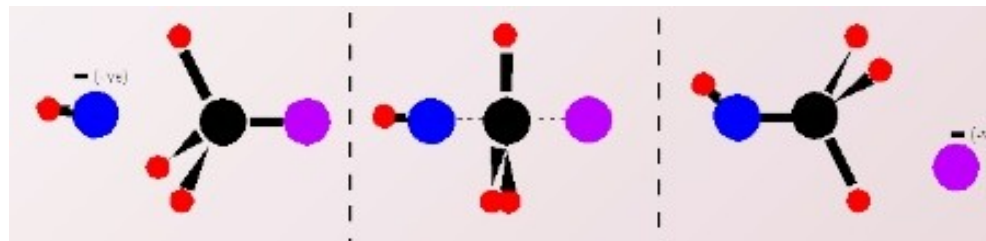


Kinetická teorie ideálního plynu

Přednáška 8



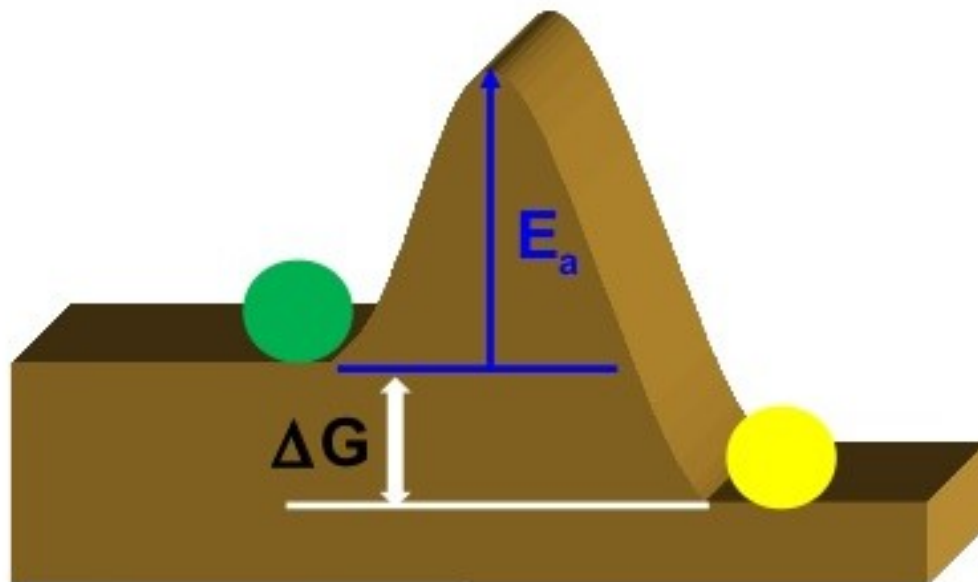
+



Pochopení rychlostních zákonů
chemických reakcí

Termodynamika vs. kinetika

Základní otázka chemické termodynamiky?



2 základní otázky chemické kinetiky:

Jaká je rychlost chemického procesu?

Jaký je mechanismus reakce (vzniká nějaký meziprodukt?)

Nutná podmínka bimolekulární elementární reakce?

Molecularity

Unimolecular

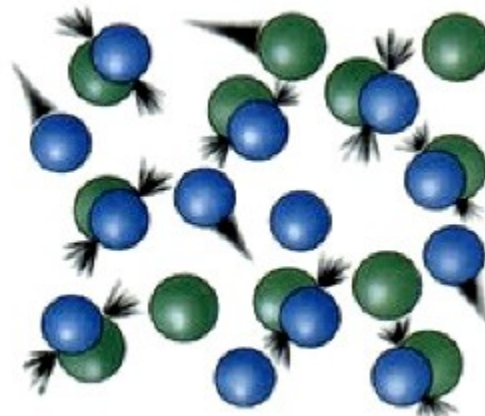
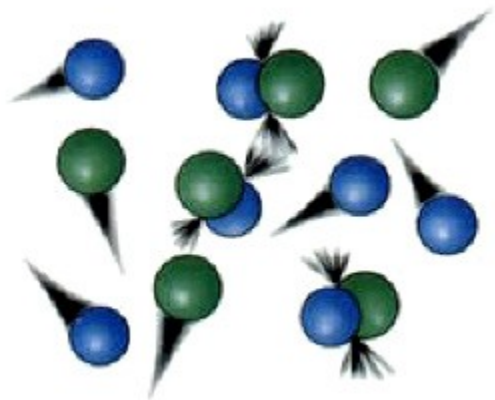
Bimolecular

Elementary step

$A \rightarrow \text{product}$

$A + B \rightarrow \text{product}$

$A + A \rightarrow \text{product}$



Hybnost a kinetická energie pro nepružnou srážku



Před

Po

Veličina? $m_1 v_1$

$(m_1 + m_2)v_2$

Veličina? $\frac{1}{2} m_1 v_1^2$

$\frac{1}{2} (m_1 + m_2)v_2^2$

Ze zákona zachování čeho?

$$m_1 v_1 = (m_1 + m_2)v_2 \Rightarrow v_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_1$$

Tj. pro obecnou (nepružnou) srážku se zachovává

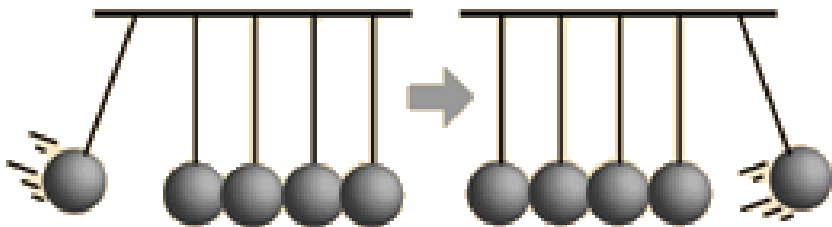
- Celková hybnost
- Celková hmotnost
- Celková energie ($E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$)

(úloha 8.1 v seminárním cvičení – až 24.11. !)

Hybnost a kinetická energie pro pružnou srážku

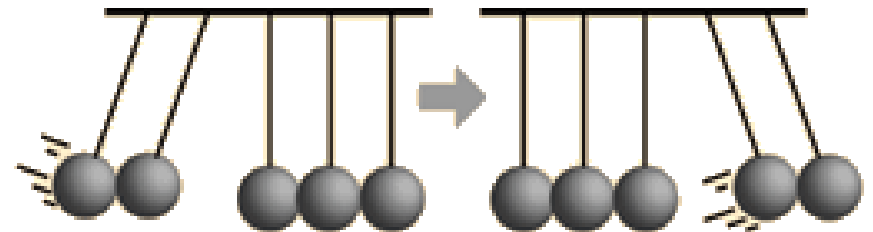
Hybnost dovnitř = mv = hybnost ven

$$E_{\text{kin}} \text{ dovnitř} = \frac{1}{2}mv^2 = E_{\text{kin}} \text{ ven}$$



Hybnost dovnitř = $2mv$ = hybnost ven

$$E_{\text{kin}} \text{ dovnitř} = \frac{1}{2}mv^2 = E_{\text{kin}} \text{ ven}$$



Tj. pro pružnou srážku se navíc zachovává

- Celková E_{kin}

Přepis v prezentaci PK, 08/3/29:

(3) Částice interagují jen pružnými srážkami (zachovává se hybnost)

patří sem **kinetická energie**



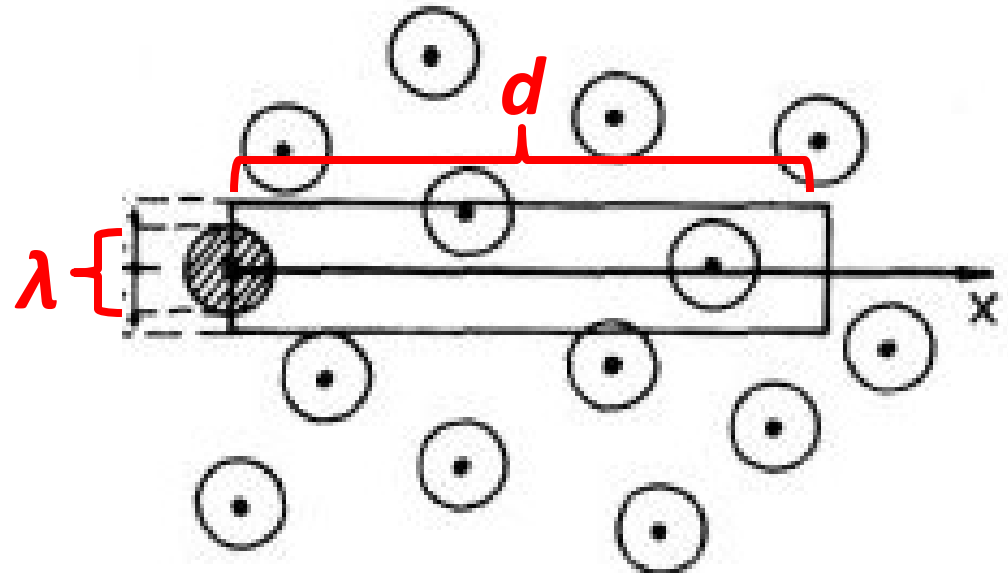
This is why science teachers aren't allowed to monitor recess...



Kromě pružných srážek v kinetické teorii id. plynu předpokládáme ještě

- Plyn = soubor velkého počtu kulových částic o hmotnosti m a průměru d , které vykonávají *náhodné translační pohyby*

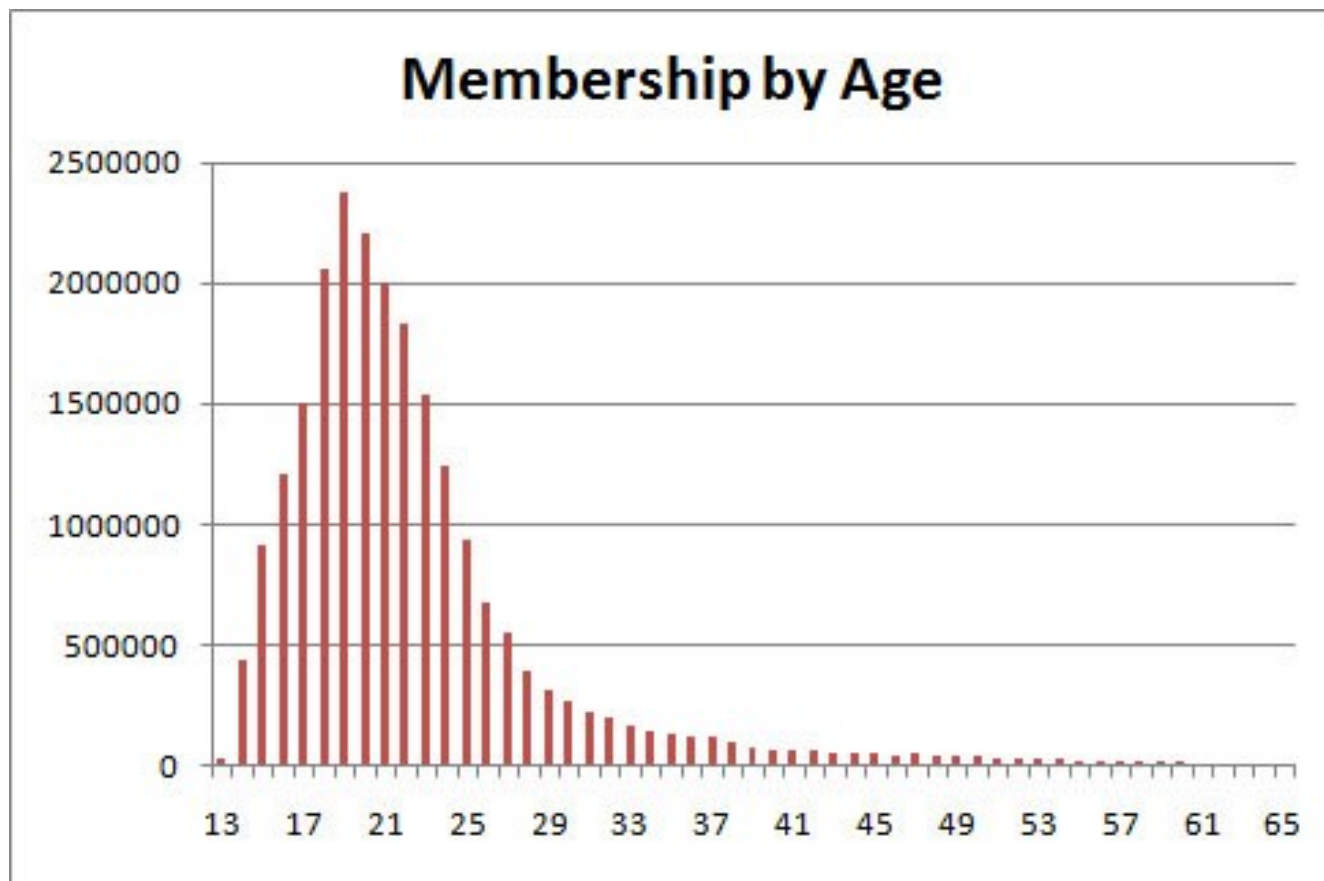
- $d \ll \lambda =$ *střední volná dráha mezi dvěma srážkami*



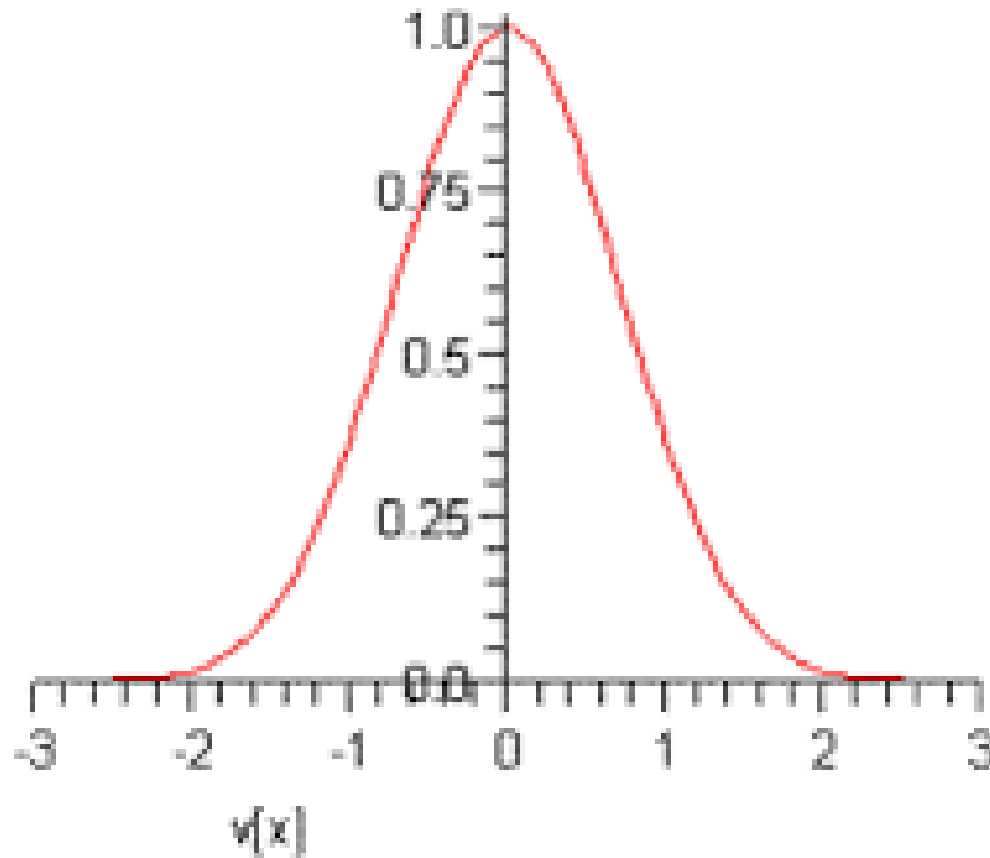
I have done demographic research on social networks with a data set of **all Facebook members**

living in the United States which is a total of **22,000,000 people**.

Other countries and other social networking websites will most likely have similar demographics so this research will pertain to social networking in general.



Boltzmannova distribuce rychlostí ve směru x



Výpočet pravděpodobnosti složek vektoru rychlosti vybrané molekuly v rozsahu $v_x \dots v_x + dv_x$, $v_y \dots v_y + dv_y$, $v_z \dots v_z + dv_z$ z Boltzmannova rozdělení

1. Boltzmannova rozdělovací funkce:

$$\leftarrow f(v_x, v_y, v_z) = \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} e^{-m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) / 2 kT}$$

Zde je použito malé „f“ pro Boltzmannovu a velké „F“ pro Maxwell-Boltzmannovu distribuci. V prezentacích doc. Kubáčka je použito velké F již pro Boltzmannovu distribuci ve 3 rozměrech.

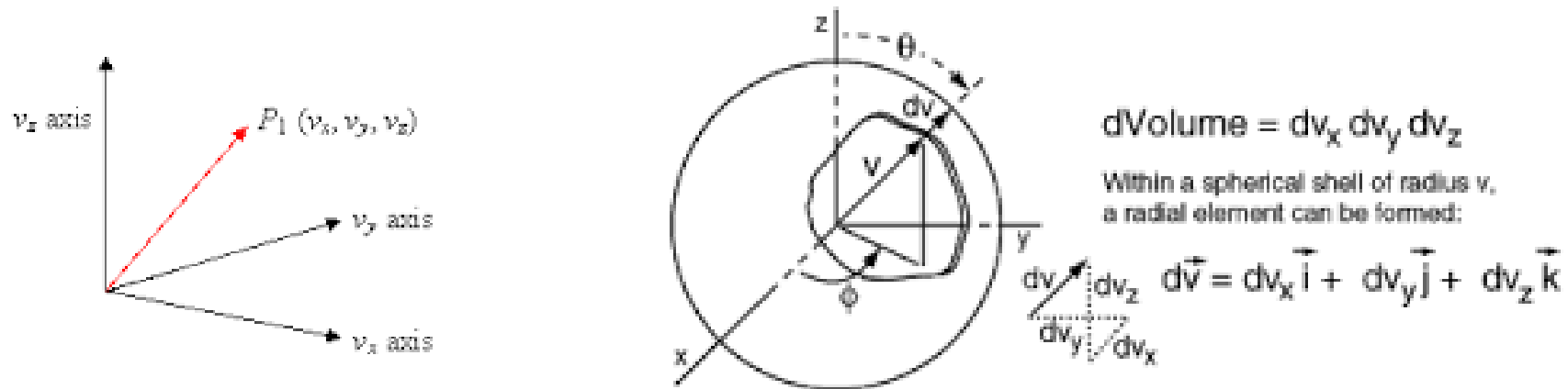
Na označení samozřejmě nezáleží, o jakou distribuci se jedná, snadno poznáme podle specifikace závislosti – v_x nebo v_x, v_y, v_z (obojí Boltzmann) nebo v bez indexu (Maxwell-Boltzmann)

$$= \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} e^{-mv^2 / 2 kT}$$

$$\text{using } v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$$

2. velikost objemového elementu vztahem:

a obrázkem:

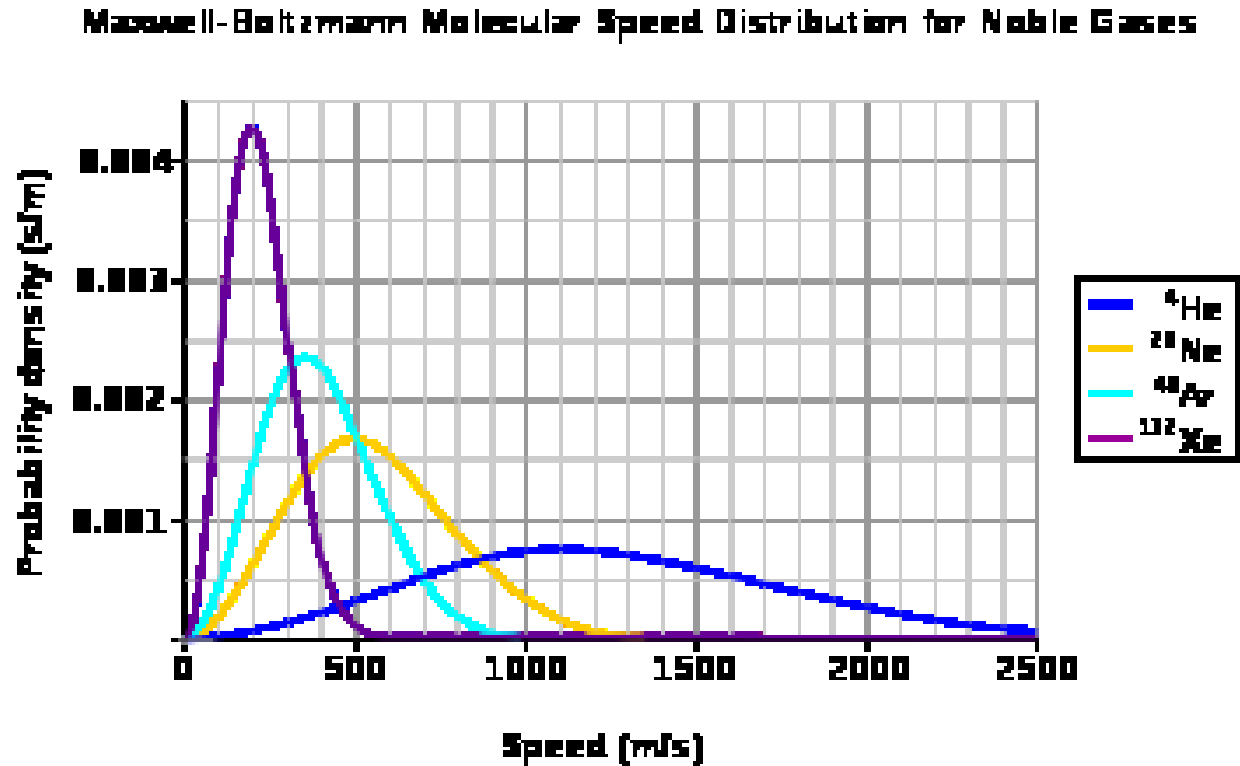


Point P_1 represents the location of one molecule in velocity space

3. výpočet pravděpodobnosti:

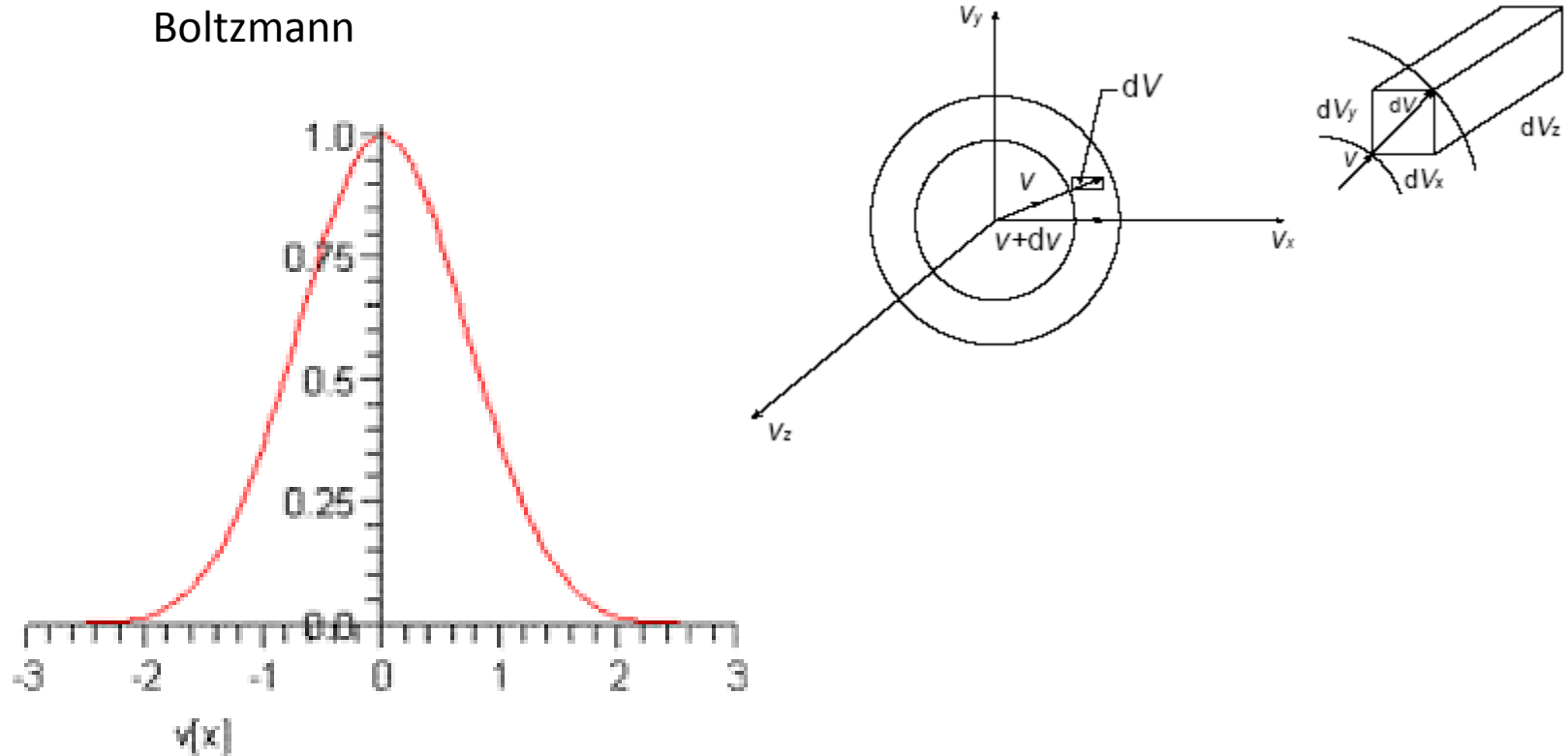
() ()

Maxwell-Boltzmannova distribuce rychlostí (bez specifikace směru)



Jak tuto distribuci získám z Gaussovy křivky Boltzmannova rozdělení se specifikací směrů?

Maxwell-Boltzmannova distribuce rychlostí bez specifikace směrů vychází z Boltzmannovy distribuce, závisující na směrech x , y , z



Boltzmannův graf (symetrická Gaussova křivka), který platí pro každý směr rychlosti stejně, násobíme křivkou $y = v^2$, jež charakterizuje, jak rychle roste se vzdáleností od nuly angulární prostor pro stejně velké, ale různě směřované rychlosti.

Totěž, co jsme vysvětlili výše, v převzetí z jiné prezentace:

Maxwell Speed Distribution

- Radial distribution $F(r)$.
- $F(r) dr$ = the probability of finding a particle between $r + dr$.
- The volume of the spherical shell is $4\pi r^2 dr$.

$$F(r) dr = f(x, y, z) 4\pi r^2 dr$$

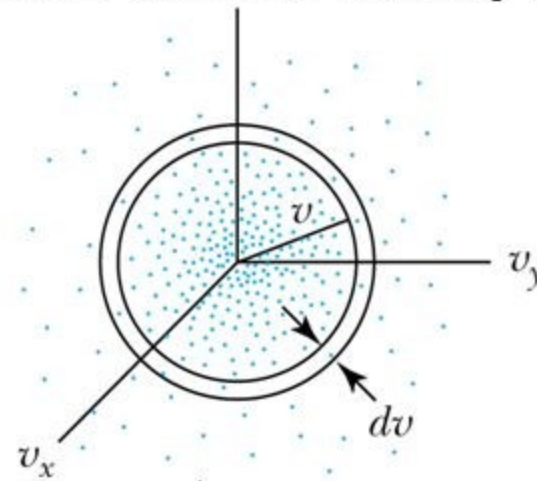
→ replace the coordinates x , y , and z with the velocity space coordinates v_x , v_y , and v_z .

→ $F(v) dv = f(\vec{v}) 4\pi v^2 dv$

- **Maxwell speed distribution:**

$$F(v) dv = 4\pi C \exp\left(-\frac{1}{2}\beta m v^2\right) v^2 dv$$

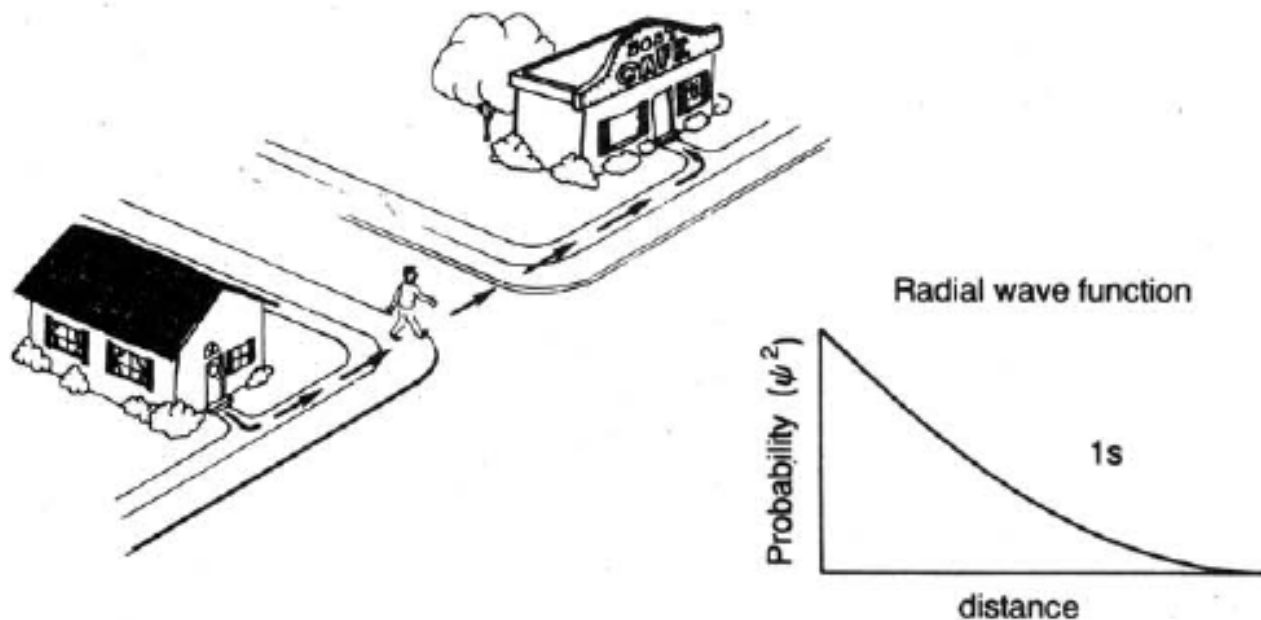
It is only valid in the classical limit.



**Motivace funkční závislosti Boltzmannova rozdělení I: Exponenciální pokles s kvadrátem rychlosti
v analogii s radiální vlnovou funkcí pro orbital 1s**

Most Probable Distance of Electron from the Nucleus

My friend is most likely found in a restaurant
most convenient (closest) to his home.

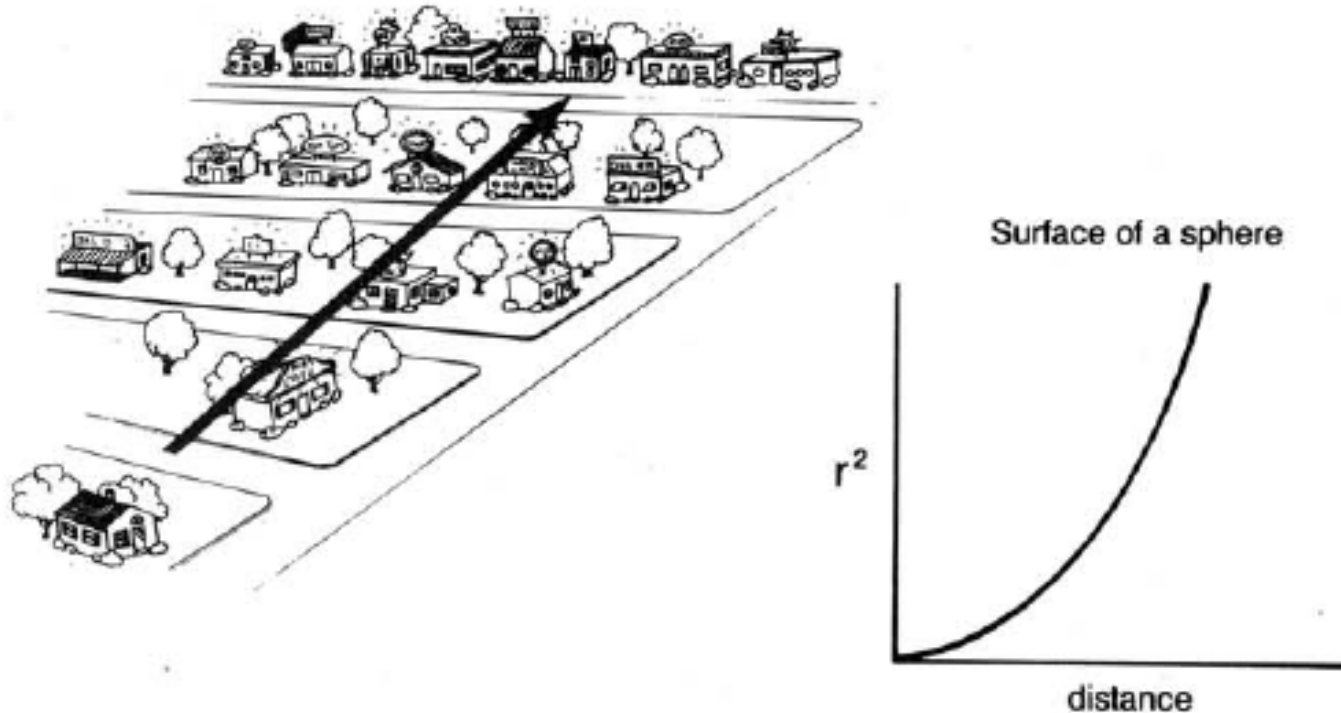


**1s electron has greatest probability closest
to the nucleus.**

Figure 1. Analogy to an s type radial wave function.

Motivace funkční závislosti Boltzmannova rozdělení II: Nárůst angulárního prostoru s v^2 v analogii s nárůstem angulárního prostoru s r^2 v případě radiální distribuční funkce elektronu

However, he does move around and there are more restaurants further away



At greater radial distances there are more positions

Figure 2. Analogy to the radius squared plot, or the surface of a sphere.