

# 4. Přednáška / PS 2018

BEZ PŘEZENTACE

Molekulové ledliny  
Energie a jejího pozorování

ALÉ

S OSN.

PWA

M<sub>1</sub> K<sub>1</sub>

sestav LIV

FENOMENOLOGICKÁ

TERMODYNAMIKA  
PRO MAKROSKOPICKÉ  
OBJEKTY

(H, S, G zaváděno v JS)

Zpřesňování

Statistickou

HLADINŮ ENERGIE  
УРОВНИЙ ЭНЕРГИИ  
МОЛЕКУЛ

↑ teorie MO

(energie elektronové,  
energie rotační a vibrační  
votačů a translační molekule)

Zde uvedeme základní výsly vložení ledlin E molekul

+ Základní popis jeřich PV úměřného os sestavi.

Více o ledlinách E uved: Pov. pí. deou. sturktura v kv. stadiu.

# Atkins 8.2

## VIŠĀĀĢĪTĀ HĻĀDĪNĀ MOLEKULĀ



Pro  
ur A<sub>2</sub> mūkstnost ģ.A

Obseruētāžu rezultāti

Optimālā atstāvēšana

$E_1 = (1 + \frac{1}{2})\hbar\omega$   
 $E_2 = (2 + \frac{1}{2})\hbar\omega$   
 $E_3 = (3 + \frac{1}{2})\hbar\omega$

F(x) = -kx  
 F<sub>pot</sub> pro pētījuma  
 (vēl. E elektronu + o puz. nu)  
 Harmoniskā oscilācija  
 Praudz. uzturēšana

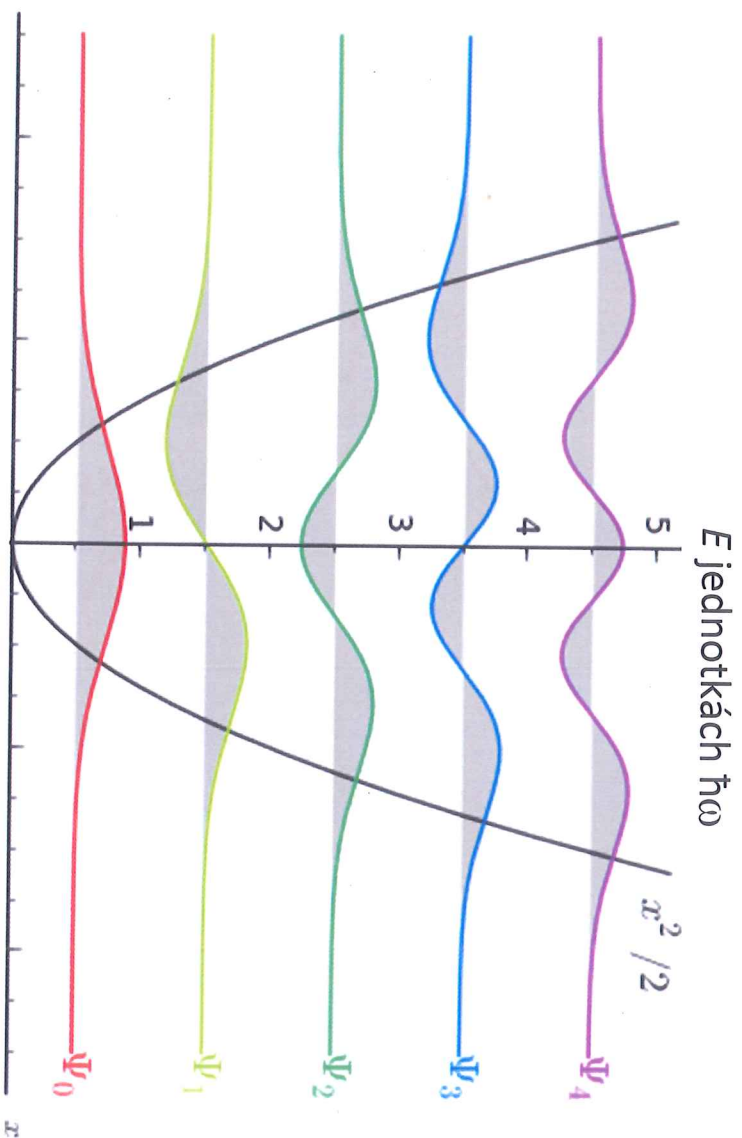
Skat. pētījumu  
 Maximāla spēka  
 pabeigšana

Oskilācijas opt. uzturēšana

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} = \frac{1}{m_N} + \frac{1}{m_N} = \frac{2}{m_N}$$

$$\mu_{N2} = \frac{m_N}{2}$$

Obr. 8.22 Vlnové funkce harmonického oscilátoru (v přehlednější reprezentaci - vlnové funkce odsazeny od nuly na jednotlivé hladiny energie)



Požadované rovnice:

(8.21)

(8.22)

(8.24)

15.1

ROZDĚLENÍ

MOLEKULOVÝCH

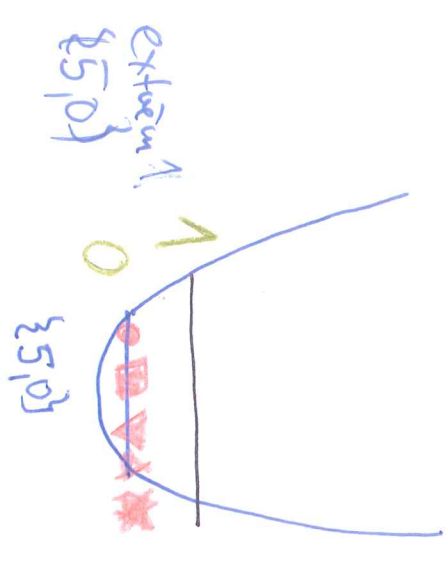
STAVŮ

15.1.1. konfigurace a váhy

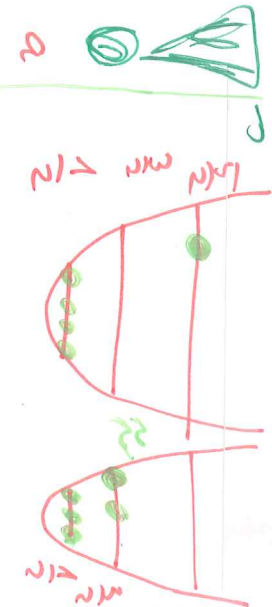
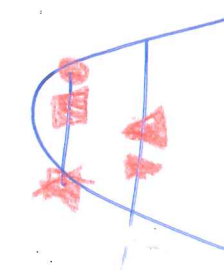
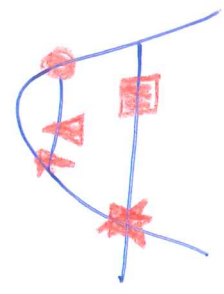
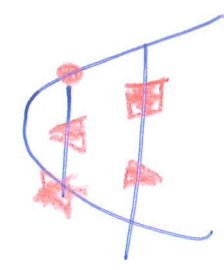
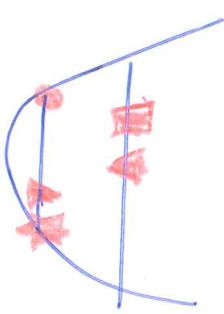
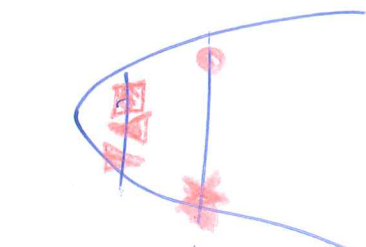
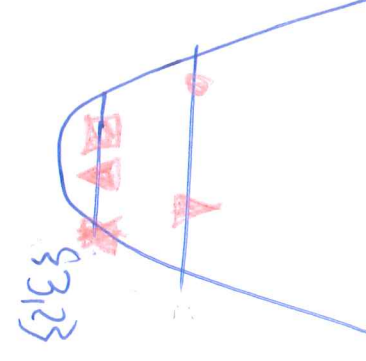
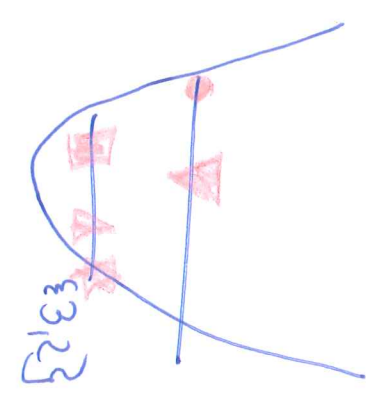
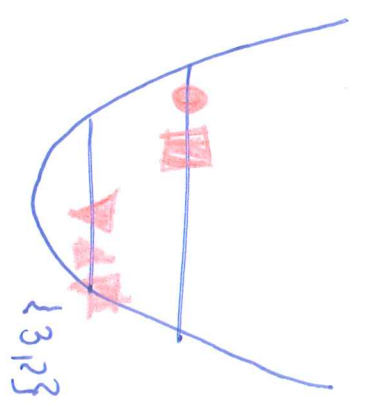
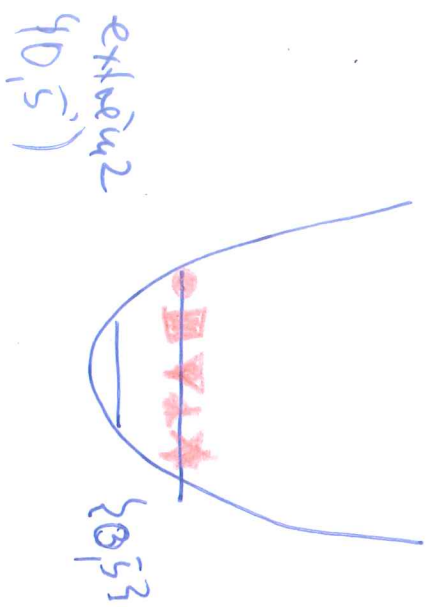
15.1.1.1 Okamžitá konfigurace

Pr. Předpokládáme, že 3 molekuly můžeme usadit  $E_0 = \frac{1}{2} h \nu$  nebo  $E_1 = \frac{3}{2} h \nu$  a pro zbytek nás rozepíšeme, jak to bude následně poradit jde o  $E_{celk}$ .

Experimentálně [pro to udělat]



us. kombinovan. může vzniknout  $(2, 1, 3)$



Specificaer Populæar Ulatiön {  $N_0, N_1, N_2, \dots$  } = Tæv. ÖLÖMÆITÆ körf.

ÖSÖMÆITÆ :

$$W = \frac{N!}{N_0! N_1! N_2! \dots}$$

Upp. vægðer (Væðing) (ÖLÖMÆITÆ)

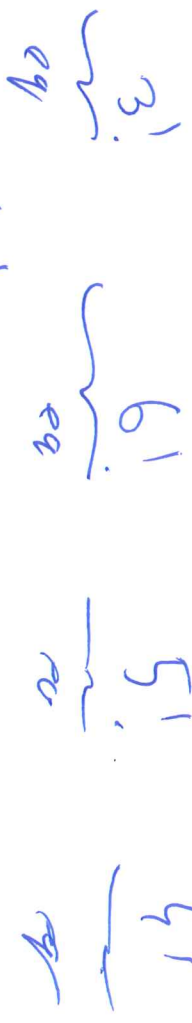
$$W = 18 \cdot 20 \cdot 18$$

ÖLÖMÆITÆ : Væðing körf

= þetta vægðer Zþæðing,

þetta væðing öf dæmi

körf. ÖSÖMÆITÆ



$N!$  ÖSÖMÆITÆ

$$W = \frac{18!}{3! 6! 5! 4!}$$

Lépe vež s W se pracuje s  $\rho_n W$

$$\rho_n W = \rho_w \left( \frac{N!}{N_0! N_1! N_2! \dots} \right) = \rho_w N! - \rho_w (N_0! N_1! N_2! \dots)$$

protože  $\rho_w(x \cdot y) = \rho_w x + \rho_w y$  | protože  $\rho_n \left( \frac{x}{y} \right) = \rho_n x - \rho_n y$

$$\uparrow = \rho_w N! - (\rho_w N_0! + \rho_w N_1! + \rho_w N_2! + \dots) =$$

$$= \boxed{N \rho_w N - \sum_i N_i \rho_w N_i} \quad (15.3)$$

\* Stirlingova aproximace

$$\rho_w(x!) \approx x \cdot \rho_w x - x \quad x \geq 10$$

# 15.1.12 Boltzmannova rozdělina

konfigurace

{ 3, 2, 0, 0, ... } má větší zastoupení než

Váha: 10  $W=10$

[přibližně E je pro vibraci velkou

konfig

{ 4, 0, 1, 0, ... }

Váha: 5  $W=5$

v harm. aproximaci stejná ]  
 $E_{\text{celk}} = \frac{q}{2} T \omega$

Seminář: Vysší počet molekul i větší  $E_{\text{celk}}$

→ více širších možných konfigurací

? Rozložit se  $W$  rovnoměrněji vlní 10 a 5 nebo

naproti extrémněji?

Váha dominující  
 ↑  
 kon!

ve směři  $k \log W$

JS:  $S = k \cdot \ln W$  hrob L. Boltzmannovi vícev. Benthel fice slast



born Vienna

Ludwig Boltzmann (1844-1906), physicist, Fa physicist

→ very statistical mechanics (during 14 years in Graz)

1894 succeeded his teacher Joseph Stefan in Vienna

Kinetic theory of gases - prep. about a material (ie. weights)

(Resurrection of entropy theory by Planck: 1900)

Opposti: Ernst Mach Wilhelm Ostwald  
↓  
various o Bred - Quilicity

1890 Comptons - aspolitik atonality i atf atonality

about → Bilder (molecules)

atomi: how to explain

atf atonality: alle besetzen model

Spolarys  
wasy  
nikdo

filozof. vġhady → stu se filozofuw lewli ugwācu

1904 konf. St Louis → wāṡiwas tgrilla odwixxa

Atawg a wəyq Porwūn hq

FWe

(1867 Kowdeleriwuq Palsiwa!)

Statistika.. system se budo wachqret bud' tēwāi vġhady

u jgħiwē (fav. DOMINANTĪ KONFIGURAZ)

wəso u wəwərika, kweē so od DOM. JEN pəlo cist

? Dom. konfig? Hledāwəs tawwē hodyokly Ni

(populawo stawi), kweē mawimawizari W (h w)



15. 1. 2

# MOLEKULOVÁ PARTIČNÍ FUNKCE

Boltzmannovo

rozdělení

$$\frac{N_i}{N} =$$

$$\frac{e^{-\beta \epsilon_i}}{\sum_j e^{-\beta \epsilon_j}}$$

indikátor  $\omega_i$   
0 už není řád

sumaci index

globální popis

rozdělení vlastní energie,  
pro jakou každou

vlastní vážený  $T$

má nás i pro sam. part. i

$$q = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i}$$

DEFINICE

(tzn. Populace stavu i)

Označuje  $P_i$

(disk. part. i): rozdělení

Angular Partition

disk. i  
víc  
stavů

rozdělení

ustávené, že rozložení  $E$

rozdělení  $T$  - nás.

na tyto vlastní

MOLEKULOVÁ

PARTIČNÍ FUNKCE

(už máji pane  $\epsilon_j$  a  $T$ )

rozdělení

funkce

$$\sum_j e^{-\beta \epsilon_j}$$

už už mám



Boltzmannovská populace kládů

pro ekvidistantní usložení

při výšce  $T$

