
NATUURKUNDE 3

Statistische mechanica: Energie

Energy moves the world

gezegde

The kind of motion we call heat

Rudolf Clausius (1822-1888)

Kernbegrippen

$$\Delta E = Q - P \Delta V$$

eerste hoofdwet

energie en energiebehoud

interne energie

Maxwell – verdeling

temperatuur

thermisch evenwicht

warmte

Inleiding

▼ Energiebehoud

Energie is het vermogen om arbeid te verrichten. Energie kan zijn:

- mechanische energie,

- elektrische energie,
- chemische energie,
- zonne-energie en nog veel meer.

Alle fysische processen die plaats vinden op aarde en in het heelal hebben te maken met omzettingen tussen verschillende vormen van energie. Daarbij blijft de totale hoeveelheid energie behouden:

$$E = \text{const} \quad (1)$$

Voor zover we weten is dit een behoudswet die van toepassing is op alle fysische processen.

Volgens de moderne natuurkunde hebben alle vormen van energie een gemeenschappelijke bron, namelijk de wisselwerking tussen de deeltjes waaruit een systeem bestaat: atomen, moleculen, of elementaire deeltjes, zoals elektronen (plasma), protonen, neutronen, fotonen, neutrino's, quarks, etc. In dit hoofdstuk bespreken we diverse vormen van energie, i.h.b. mechanische energie en warmte op basis van dit "atomaire wereldbeeld".

▼ Eerste hoofdwet

In de natuurkunde maakt men onderscheidt tussen "open" en "gesloten" systemen. Voor een gesloten systeem geldt dat het systeem geen wisselwerking heeft met enig ander systeem en dat de energie strikt behouden is:

$$\Delta E = 0. \quad (2)$$

Een open systeem daarentegen kan energie uitwisselen met de omgeving. De energie van het systeem verandert dan door processen zoals verwarming, het absorberen van deeltjes, arbeid die verricht wordt op het systeem, etc. Afhankelijk van de processen die optreden kunnen we een energiebalans opschrijven, bijvoorbeeld:

$$\Delta E = Q + W + S \quad (3)$$

waarbij Q staat voor de opgenomen warmte, W voor de arbeid die op het systeem wordt verricht en S voor de opgenomen stralingsenergie. Omdat energie behouden is moet de toegevoerde energie opgeslagen worden in het systeem. Dit noemt men de *eerste hoofdwet van de thermodynamica* (warmteleer), maar zou eigenlijk de eerste hoofdwet van de natuurkunde moeten heten.

▼ Thermodynamica

Het vakgebied dat zich bezighoudt met de warmte uitwisseling tussen systemen heet de *thermodynamica* (warmteleer). Deze natuurkundige theorie werd ontwikkeld aan het begin van de vorige eeuw op basis van een aantal empirische relaties. Het zeer praktische doel was een beschrijving te geven van stoommachines en andere machines waarmee warmte wordt omgezet in arbeid. De theorie is gebaseerd op twee hoofdwetten: de eerste hoofdwet (energiebehoud), en de tweede hoofdwet (toename van entropie; zie natuurkunde 4). De wet van energiebehoud wordt gewoonlijk toegeschreven aan de Duitse fysicus Julius Robert Mayer (1814-1878), maar werd ook door anderen ontdekt in de periode 1830-1850. De tweede wet is het werk van Rudolf Julius Emmanuel Clausius (1850). Pas later kwam het inzicht dat warmte een vorm van bewegingsenergie is van de moleculen, en thermische processen verklaard kunnen worden uit de moleculaire samenstelling van de materialen. Voor technische toepassingen waarbij warmte een belangrijke rol speelt is ook nu nog de thermodynamica van zeer veel belang.

Theorie

▼ Mechanica

▼ Mechanische arbeid

In de mechanica wordt het begrip energie gewoonlijk ingevoerd via het begrip arbeid. Deze begrippen worden hieronder gedefinieerd voor het eenvoudigste geval van een enkel deeltje in een potentiaalveld, maar deze kunnen direct worden uitgebreid naar de veel-deeltjes systemen die men in de thermodynamica bestudeert.

In de natuurkunde wordt *arbeid* gedefinieerd als

$$W = F s \quad (4)$$

waarbij F de kracht is en s de afgelegde weg. Als de weg en de kracht verschillende richtingen hebben die een hoek θ met elkaar maken, schrijven we:

$$W = F s \cos(\theta) \quad (5)$$

In vector-notatie wordt dit

$$W = \mathbf{F} \cdot \mathbf{s} = F_x s_x + F_y s_y + F_z s_z \quad (6)$$

- De arbeid is positief als kracht en weg in dezelfde richting wijzen en negatief als de twee richtingen tegengesteld gericht zijn; dan moet immers de arbeid verricht worden tegen de kracht in.
- Als kracht en weg loodrecht op elkaar staan, wordt er geen arbeid verricht.

Nog algemener, voor een gegeven baan $\mathbf{r}(t)$, $\mathbf{v}(t)$ van een deeltje en een kracht $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ die afhangt van de plaats wordt de formule voor de arbeid die verricht wordt tussen twee tijdstippen t_1 , t_2 :

$$W(t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} [F_x v_x + F_y v_y + F_z v_z] dt \quad (7)$$

met $\mathbf{v}(t)$ de snelheid:

$$\mathbf{v}(t) = \left(\frac{dr_x(t)}{dt}, \frac{dr_y(t)}{dt}, \frac{dr_z(t)}{dt} \right) = (v_x(t), v_y(t), v_z(t)) \quad (8)$$

Voor de eenvoud beschouwen we nu verder een 1-dimensionale baan $x(t)$, $v(t)$ die een oplossing is van de wet van Newton

$$m a(t) = F(x(t)). \quad (9)$$

Vermenigvuldigen met de snelheid geeft het resultaat:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} m v(t)^2 \right) = F(x(t)) v(t) \quad (10)$$

Integratie tussen de tijdstippen t_1 en t_2 leidt tot de volgende relatie tussen arbeid en kinetische energie

$$\frac{1}{2} m v(t_2)^2 - \frac{1}{2} m v(t_1)^2 = \int_{t_1}^{t_2} F(x(t)) v(t) dt \quad (11)$$

- Dus de arbeid die verricht wordt op een deeltje wordt omgezet in kinetische energie. Dit is geen nieuwe wet maar het gevolg van onze definitie van arbeid en de tweede wet van Newton. Uit deze relatie volgt geen behoudswet zonder een verdere veronderstelling.

historische noot: de bovenstaande relatie tussen arbeid en kinetische energie werd reeds afgeleid door Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716).

▼ Potentiaal

Conservatieve kracht

Een kracht $F(x)$ wordt *conservatief* genoemd als de arbeid verricht langs de baan $x(t)$ van een deeltje tussen twee tijdstippen t_1 en t_2

$$W(t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} F(x(t)) v(t) dt \quad (12)$$

geschreven kan worden als een potentiaalverschil

$$W(t_1, t_2) = V(x(t_1)) - V(x(t_2)) \quad (13)$$

met de potentiaal $V(x)$ een functie van de plaats x . Het is eenvoudig in te zien dat hieraan voldaan wordt als de kracht te schrijven is als de afgeleide naar de plaats van deze potentiaal

$$F = - \frac{dV}{dx} \quad (14)$$

Men kan bewijzen dat alle conservatieve krachten van deze vorm moeten zijn. Voor een kracht die een vector is in de 3-dimensionale ruimte is de generalisatie

$$(F_x, F_y, F_z) = \left(-\frac{dV}{dx}, -\frac{dV}{dy}, -\frac{dV}{dz} \right) \quad (15)$$

met $V = V(x, y, z)$ nu een functie van de drie ruimtecoördinaten.

Lineaire potentiaal

Een constante kracht is een triviaal voorbeeld van conservatieve kracht. De potentiaal neemt lineair toe met de afstand.

Harmonische potentiaal

De harmonische beweging wordt gekarakteriseerd door een potentiaal functie

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 \quad (16)$$

Deze potentiaal wordt veel gebruikt in eenvoudige modellen voor een gebonden toestand.

Zwaartekrachts potentiaal

De zwaartekracht tussen twee massas m en M op afstand r van elkaar is:

$$F = -\frac{dV}{dr} \quad (17)$$

$$V(r) = -G \frac{mM}{r}$$

Als gevolg van de zwaartekracht ondergaat een massa m een valversnelling

$$g = \frac{GM}{r^2} \quad (18)$$

Voor de potentiaal kunnen we dus ook schrijven

$$V(r) = -m g r \quad (19)$$

Voor meerdere massa's worden de potentialen opgeteld. Ieder lichaam met massa voelt de potentiaal van alle andere massieve lichamen in het heelal en ondergaat de valversnelling die daarvan het gevolg is.

Moleculaire potentiaal

Tengevolge van de elektromagnetische wisselwerking tussen atomen en moleculen ontstaat een potentiaal die

- afstotend is voor korte afstanden
- aantrekkend voor grote afstanden.

De afstoting is een direct gevolg van de Coulomb afstoting tussen de elektronen en de aantrekking een gevolg van de vervorming van de elektronenschil. De berekening van deze potentialen voor een gegeven atoom of molecuul is een zeer ingewikkeld probleem, maar het blijkt empirisch dat voor eenvoudige atomen een goede benadering wordt verkregen met de z.g. *Lennard-Jones 6-12* potentiaal

$$V[\mathbf{r}] := 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

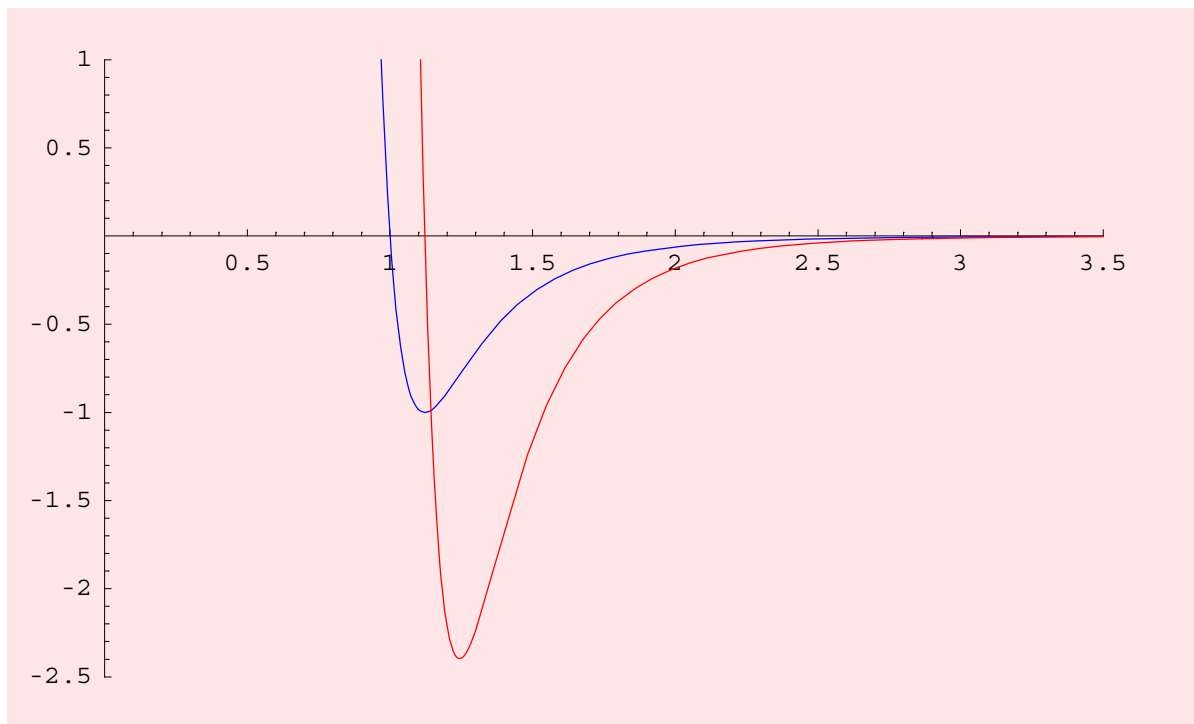
De constanten ϵ en σ worden aangepast aan het experiment. Typische waarden voor bijvoorbeeld het gas Argon zijn:

$$\sigma = 0.341 \text{ nm}$$

$$\frac{\epsilon}{k_B} = 119.8 \text{ K} \quad (20)$$

De potentiaal is een functie van de onderlinge afstand van de moleculen en heeft de vorm van een diepe put:

```
<< Graphics`Colors`
Plot[{V[r] /. {ε -> 1, σ -> 1}, -V'[r] /. {ε -> 1, σ -> 1}},
  {r, 1/2, 3.5}, PlotRange -> {{0, 3.5}, {-2.5, 1}},
  PlotStyle -> {RGBColor[0, 0, 1], RGBColor[1, 0, 0]}, PlotRange -> All];
```



De kracht tussen twee moleculen is nul op de afstand waar de potentiaal een minimum heeft.

Fundamentele krachten

In de moderne natuurkunde wordt aangenomen dat alle krachten herleid kunnen worden tot vier fundamentele krachten:

- de *zwaartekracht*, werkzaam tussen alle massieve lichamen
- de *elektromagnetische kracht*, werkzaam tussen elektrische ladingen
- de *sterke kracht* die de kern van atomen bijeenhoudt
- de *zwakke kracht* die verantwoordelijk is voor bepaalde vervalsprocessen in atoomkernen

Men veronderstelt dat al deze krachten een potentiaal hebben van de algemene vorm

$$V(r) = \alpha h c \frac{e^{\left(-\frac{r}{D}\right)}}{r} \quad (21)$$

Hierin is r de afstand tussen twee deeltjes, en D de dracht van de potentiaal. In de tabel hieronder is aangegeven dat de dracht van de elektromagnetische en zwaartekracht oneindig is, maar dat de sterke en zwakke kracht juist een zeer korte dracht hebben.

De coefficient α is een dimensieloze constante die de sterkte van de wisselwerking bepaalt. Uit de tabel blijkt dat de zwaartekracht verreweg het zwakst is, vele orden van grootte zwakker dan de elektromagnetische kracht.

Verder zijn h en c respectievelijk de plankse constante en de lichtsnelheid.

Bij iedere wisselwerking hoort ook een karakteristiek deeltje dat de kracht overbrengt; voor het elektromagnetisme is dat het bekende foton. De namen van de andere deeltjes staan in de tabel.

<i>kracht</i>	<i>dracht</i>	<i>sterkte</i>	<i>krachtdragend deeltje</i>
F	D	α	–
gravitatie – zonnestelsel	∞	10^{-39}	graviton
elektromagnetisme – atoom	∞	$\frac{1}{137}$	foton
sterke kracht – kern	10^{-15} m	1	gluon
zwakke kracht – bèta verval	10^{-18} m	10^{-5}	W / Z boson

▽ Energiebehoud

Notatie

de energie van een enkel deeltje: ϵ

de energie van een systeem met meerdere deeltjes: $E = \sum_i \epsilon_i$

Potentiële energie

Voor conservatieve krachten kan de relatie tussen arbeid en kinetische energie die werd afgeleid in de paragraaf mechanische arbeid, formule (11) gecombineerd worden met de potentiaal-uitdrukking voor de arbeid afgeleid in de paragraaf conservatieve kracht

$$\int_{t_1}^{t_2} F(x(t)) v(t) dt = V(x(t_1)) - V(x(t_2)) \quad (22)$$

Dit leidt tot de behoudswet

$$\frac{1}{2} m v(t_1)^2 + V(x(t_1)) = \frac{1}{2} m v(t_2)^2 + V(x(t_2)) \quad (23)$$

voor de totale energie van een deeltje:

$$\epsilon = \frac{1}{2} m v^2 + V(x) \quad (24)$$

De energie is de som van de kinetische energie en de potentiaal, die in dit verband *potentiële energie* wordt genoemd.

- De energie van de harmonische oscillator is

$$\epsilon = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{1}{2} k x^2 \quad (25)$$

- Voor een deeltje in 3D is de uitdrukking voor de energie:

$$\epsilon = \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) + V(x, y, z) \quad (26)$$

Elastische botsing

In een botsing tussen twee of meer deeltjes is de totale energie altijd behouden. De botsing heet *elastisch* als de interne structuur van de deeltjes geen rol speelt. In dat geval is de totale energie de som van de kinetische en potentiële energie

$$E = \sum_i \frac{1}{2} m v_i^2 + V(r) \quad (27)$$

met $V(r)$ de potentiaal als functie van de onderlinge afstand van de deeltjes. Ver voor de botsing en ver na de botsing is de bijdrage van $V(r) = 0$ omdat we mogen aannemen dat de deeltjes elkaar niet voelen als ze ver van elkaar verwijderd zijn. Dus in een elastische botsing is de totale energie

$$E = \sum_i \frac{1}{2} m v_i^2 \quad (28)$$

gemeten ver vóór en na de botsing behouden.

Inelastische botsing

In een inelastische botsing tussen twee of meer deeltjes kan er energie worden uitgewisseld met de interne vrijheidsgraden. De totale behouden energie wordt gegeven door

$$E = \sum_i \frac{1}{2} m v_i^2 + V(r) + \sum_i \epsilon_{\text{int},i} \quad (29)$$

met $V(r)$ de potentiaal als functie van de onderlinge afstand van de deeltjes en $\epsilon_{\text{int},i}$ de *interne energie* van ieder van de deeltjes. Ver voor de botsing en ver na de botsing is de bijdrage van $V(r) = 0$ omdat we mogen aannemen dat de deeltjes elkaar dan niet voelen. Dus in een inelastische botsing is de som van kinetisch energie en interne energie

$$E = \sum_i \frac{1}{2} m v_i^2 + \sum_i \epsilon_{\text{int},i} \quad (30)$$

voor en na de botsing gelijk. Kinetische energie kan omgezet worden in interne energie en vice versa.

▼ Thermodynamica

▼ Macroscopisch systeem

Zelfs een kleine hoeveelheid materie, of het nu een vaste stof is, of een vloeistof of een gas, bestaat uit een zeer groot aantal moleculen. Het *getal van Avogadro* $N_A \sim 10^{23}$ geeft een indicatie van het immense aantal atomen dat is bevat in een dergelijk systeem. Men spreekt van een *macroscopisch* systeem. Om zulke systemen te beschrijven introduceren we de begrippen massadichtheid, druk, temperatuur en warmte.

▼ Deeltjes- en massadichtheid

Grootheden per volume-eenheid worden dichtheden genoemd. Een voorbeeld is de gemiddelde *deeltjesdichtheid*. Deze grootheid is gedefinieerd als het totaal aantal deeltjes N (atomen, moleculen, etc) bevat in een systeem gedeeld door het volume V :

$$n = \frac{N}{V} \quad (31)$$

De dimensie is aantal per m^{-3} . De *massadichtheid* wordt hieruit verkregen door te vermenigvuldigen met de massa van de deeltjes:

$$\rho = m n \quad (32)$$

De massadichtheid wordt gemeten in kg/m^3 .

▽ Druk

De definitie van druk is kracht per oppervlakte eenheid:

$$P = \frac{F}{O} \quad (33)$$

met de kracht F loodrecht op het oppervlak O .

- De SI eenheid voor druk is de *pascal*: 1 pascal = 1 Pa = 1 N/m². De bar en de millibar zijn gedefinieerd als: bar = 10⁵ Pa, millibar = 100 Pa. De millibar wordt vaak gebruikt in de meteorologie. De normale atmosferische druk op zeehoogte is 1 atmosfeer (atm) gedefinieerd als 1.013 10⁵ Pa = 1.013 bar = 1013 millibar.

Druk ontstaat omdat deeltjes (moleculen, atomen) tegen de wand van een vat botsen. Als de wand loodrecht staat op de x -as, en als we aannemen dat de wand veel zwaarder is dan het botsende deeltje, dan wordt per elastische botsing met de wand een impuls

$$\Delta p_x = 2 m v_x \quad (34)$$

overgedragen op de wand.

Stel nu dat alle moleculen dezelfde snelheid v_x hebben. Het aantal moleculen dat dan in een tijdsverloop Δt zal botsen op een bepaald deel van de wand met oppervlak O is

$$\# \text{ botsingen} = \frac{1}{2} n O v_x \Delta t \quad (35)$$

met n de dichtheid van de deeltjes. We delen door twee omdat gemiddeld de helft van de deeltjes naar de wand zal bewegen en de andere helft ervan af. Dus de totale impulsoverdracht per tijdseenheid is

$$\frac{\Delta P_x}{\Delta t} = n O m v_x^2 \quad (36)$$

De kracht per oppervlakte eenheid, d.w.z. de druk, is dus

$$P = n m v_x^2 \quad (37)$$

Het is natuurlijk onrealistisch te veronderstellen dat de snelheden van alle deeltjes hetzelfde zijn, maar ook in het algemene geval blijft de bovenstaande formule geldig, mits we v_x^2 vervangen door het gemiddelde:

$$P = n m (v_x^2)_{\text{gem}} \quad (38)$$

Verder kunnen we de component v_x eenvoudig relateren aan de grootte van de snelheid van de deeltjes, die gegeven is door

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \quad (39)$$

Omdat er geen verschil is tussen de drie ruimtelijke richtingen hebben we het verband

$$(v^2)_{\text{gem}} = 3 (v_x^2)_{\text{gem}} \quad (40)$$

- Dus voor de druk krijgen we uiteindelijk de volgende uitdrukking:

$$P = \frac{1}{3} n m (v^2)_{\text{gem}} \quad (41)$$

- We merken op dat de grootte

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} N m (v^2)_{\text{gem}} \quad (42)$$

gelijk is aan de *gemiddelde kinetische energie* in het systeem.

- Dus voor de druk kunnen we schrijven

$$P V = \frac{2}{3} E_{\text{kin}} \quad (43)$$

hetgeen een direct verband geeft tussen de kinetische energie van een ideaal gas en de druk.

▽ Temperatuur en warmte

Het is een ervaringsfeit dat een gesloten systeem, zoals een gas bestaande uit veel-deeltjes, na enige tijd een toestand bereikt waarin geen waarneembare verandering meer optreedt. Dit heet de toestand van *thermisch evenwicht*. De energie die in het systeem is opgeslagen noemt men *interne energie*, of ook wel *thermische energie*. Een systeem met veel thermische energie heet "warm" en met weinig "koud". De maat hiervoor is *temperatuur* gemeten in kelvin.

Als twee systemen in thermisch evenwicht, maar met verschillende temperatuur, met elkaar in contact gebracht worden, kan energie worden uitgewisseld. Deze energieoverdracht heet *warmte*. De eenheid van warmte is de calorie (cal), gedefinieerd als de hoeveelheid warmte die nodig is om de temperatuur van 1 gram water van 14.5°C te verhogen naar 15.5°C. De kilocalorie (kcal) is 1000 calorieën = 4190 J. Deze eenheid wordt vaak gebruikt om de energiewaarde van voedsel in uit te drukken.

▽ Warmte capaciteit

Als warmte wordt toegevoerd aan een systeem zal in het algemeen de temperatuur toenemen. Experimenteel wordt gevonden dat de hoeveelheid warmte ΔQ die nodig is om de temperatuur T van een hoeveelheid massa M van een bepaalde stof met ΔT te verhogen evenredig is met de temperatuur toename

$$\Delta Q = \text{const} \Delta T \quad (44)$$

Ook blijkt deze hoeveelheid warmte evenredig te zijn met M . Men definieert daarom de specifieke warmtecapaciteit C van een stof via de relatie

$$C = \frac{\Delta Q}{M \Delta T} \quad (45)$$

- de specifieke warmtecapaciteit van water is ongeveer $C = 4190 \text{ J/kg K}$. De waarde hangt enigszins af van de temperatuur.

▽ Gasthermometer en gaswet

Bij constant volume neemt de druk van een verdund gas lineair af met de temperatuur volgens de gaswet

$$P V = \text{const} (T + T_0) \quad (46)$$

met T_0 een nader te bepalen temperatuur. Door de druk te meten voor twee temperaturen, zeg 0 Celsius en 100 Celsius, bij constant volume, kunnen we de druk uitzetten tegen de temperatuur voor alle temperaturen. Als de lijn voor de druk in het PT-diagram door wordt getrokken tot waar de druk nul wordt, vinden we een nulpuntstemperatuur van

$$T_0 = -273.15 \text{ Celsius} \quad (47)$$

Deze waarde blijkt vrijwel onafhankelijk van het gebruikte gas. De temperatuur schaal die begint bij dit nulpunt heet de Kelvin schaal.

Voor de constante in de gaswet wordt gevonden dat deze evenredig is met het deeltjes aantal N . We kunnen de gaswet dus ook schrijven als

$$P = n k_B T \quad (48)$$

met $n = N/V$ de deeltjes dichtheid, d.w.z. het aantal deeltjes per volume eenheid. De constante $k_B = 1.38054 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ is de *constante van Boltzmann*. De gaswet is nu volledig bekend en kan gebruikt worden voor bepaling van de temperatuur uit drukmetingen. Een apparaat om dat te doen heet een gasthermometer.

Historische noot: de Boltzmann constante is ingevoerd door Max Planck in 1900 bij zijn beschrijving van thermische straling in termen van lichtquanta.

▼ Mol en gasconstante

Het aantal deeltjes in een gas is groot; van de orde van het getal van Avogadro N_A . Het daarom vaak handig om het deeltjesaantal uit te drukken in dit getal. Dit definieert het aantal mol van een stof als

$$n_m = \frac{N}{N_A} \quad (49)$$

Men kan de gaswet dan ook schrijven als

$$P V = n_m R T \quad (50)$$

waarin n_m het aantal mol is en R de gasconstante gegeven door

$$R = N_A k_B \quad (51)$$

Merk op dat de gasconstante R een getal van de orde één is: 8.314 J/K mol .

▼ Arbeid in compressie/expansie

Als een gas wordt samengeperst moet arbeid worden verricht tegen de drukkracht P in. Stel we beschouwen een cilindrisch vat met een beweegbare zuiger. Als de zuiger een oppervlak O heeft en de druk is P , dan is de kracht $F = P O$. We verrichten dus de arbeid

$$\Delta W = F \Delta L \quad (52)$$

als de zuiger wordt verplaatst over de afstand ΔL . Uitgedrukt in P wordt dit

$$\Delta W = P \Delta V \quad (53)$$

met

$$\Delta V = O \Delta L \quad (54)$$

Voor een eindige verandering van volume krijgen we

$$W = \int_{V_1}^{V_2} P dV \quad (55)$$

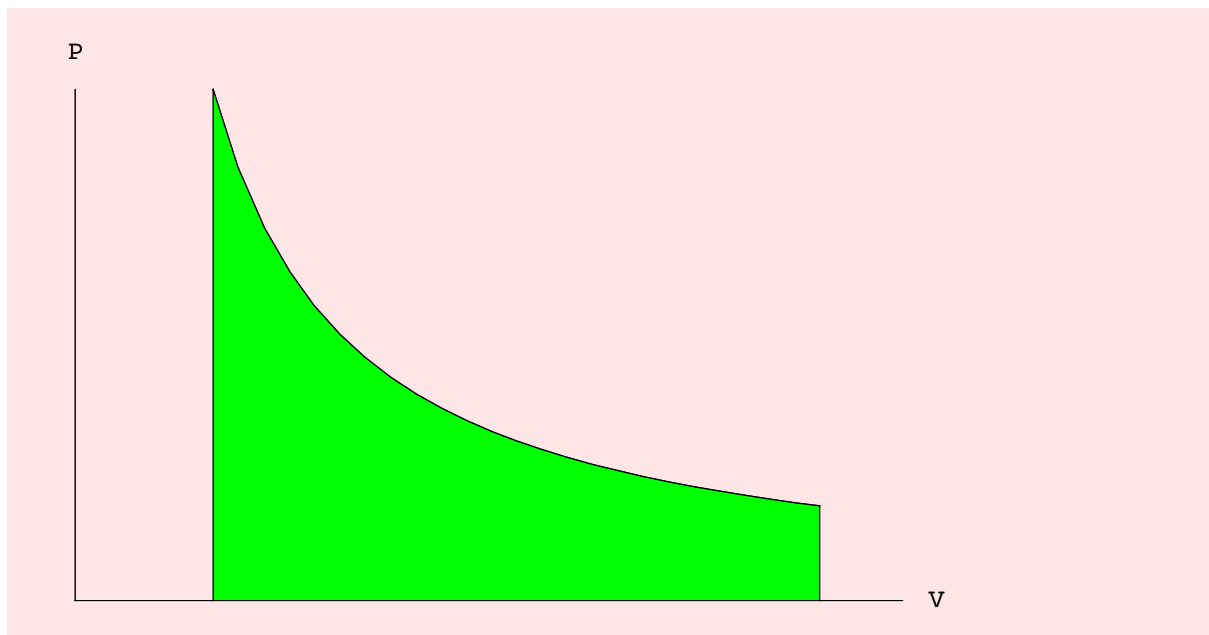
Deze integraal geeft het oppervlak onder een kromme in het $P V$ -diagram tussen de waarden V_1 en V_2 .

```
Remove["Global`*"]
<< Graphics`FilledPlot`
```

```

plaatje = FilledPlot[ $\frac{1}{V}$ , {V, 1/6, 9/10},
  Fills -> {RGBColor[0, 1, 0]}, PlotRange -> {{0, 1}, {0, 6}},
  Ticks -> False, AxesLabel -> {"V", "P"}, DisplayFunction -> Identity];
lijn1 = Graphics[Line[{{1/6, 0}, {1/6, 6}}]];
lijn2 = Graphics[Line[{{9/10, 0}, {9/10, 10/9}}]];
Show[{plaatje, lijn1, lijn2}, DisplayFunction -> $DisplayFunction]

```



- Graphics -

- Dit is de arbeid die wij moeten verrichten om het systeem te comprimeren of te expanderen. Als het volume kleiner wordt (compressie) is de arbeid positief, en als deze groter wordt (expansie) negatief.

▼ Interne Energie

De energie die in een systeem is opgeslagen heet *interne energie*; als het systeem in thermisch evenwicht is spreekt men ook wel van *thermische energie*. In een systeem bestaande uit deeltjes $i = 1, 2, \dots, N$ (atomen, moleculen, elementaire deeltjes etc) is de interne energie opgeslagen als een som van drie bijdragen:

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} + E_{\text{int}} \quad (56)$$

- 1) De eerste term is de kinetische energie van de deeltjes E_{kin} . Dit is de som van de individuele kinetische energieën

$$E_{\text{kin}} = \sum_i \epsilon_{\text{kin}}(i) \quad (57)$$

- 2) De tweede bijdrage is de potentiële energie tengevolge van de onderlinge wisselwerking:

$$E_{\text{pot}} = \sum_{i < j} \epsilon_{\text{pot}}(i, j) \quad (58)$$

Bij ieder paar deeltjes hoort een bijdrage $\epsilon_{\text{pot}}(i, j)$ die in het algemeen een functie zal zijn van de onderlinge afstand. De wisselwerking tussen moleculen en atomen is het gevolg van de elektromagnetische kracht en heeft als algemeen kenmerk dat op korte afstand de deeltjes elkaar sterk afstoten en op lange afstand aantrekken (zie moleculaire potentiaal).

3) Ten derde, er is in ieder van de deeltjes zelf ook nog interne energie opgeslagen, b.v. omdat het deeltje een atoom is dat zelf weer uit elektronen en nucleonen bestaat

$$E_{\text{int}} = \sum_i \epsilon_{\text{int}}(i) \quad (59)$$

In elastische botsingen blijft deze interne energie behouden, maar bij inelastische botsingen tussen atomen of andere deeltjes kan de interne toestand veranderen, doordat b.v. het atoom in een aangeslagen toestand komt.

- In ieder geval heeft ieder deeltje een rustenergie mc^2 . In botsingen met zeer hoge energie is massa niet behouden en kunnen deeltjes met andere massa's ontstaan. De wet van energiebehoud geldt echter onverminderd voor het totaal van energie inclusief rustenergie.

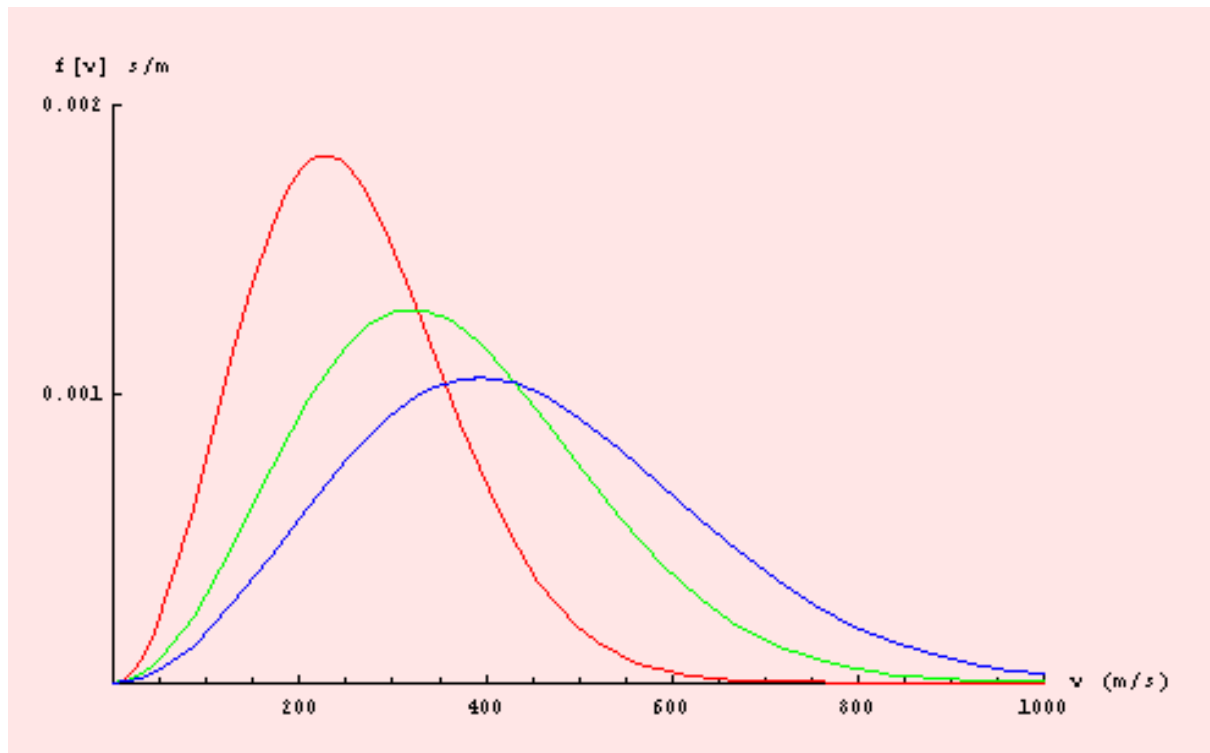
▼ Statistiek

▼ Maxwell distributiefunctie

Een gas bestaat uit deeltjes (atomen, moleculen). Deze deeltjes botsen voortdurend met elkaar en met de wand en volgen daardoor een zeer grillige beweging, waarbij hun snelheid steeds verandert. Op een gegeven tijdstip zullen er dus sommige deeltjes bewegen met grote snelheid en sommige met kleine snelheid en andere deeltjes met snelheden daartussen in. Het blijkt dat bij een gegeven temperatuur precies te voorspellen is hoeveel deeltjes gemiddeld genomen een bepaalde snelheid zullen hebben. De functie die deze verdeling van de snelheden in een gas in evenwicht bij temperatuur T beschrijft is de *Maxwell verdeling*, meestal *Maxwell distributiefunctie* genoemd (zoals de naam al aangeeft het eerst gevonden door J.C. Maxwell in 1860) :

$$f[v] := v^2 \exp\left[-\frac{m v^2}{2 k_B T}\right] \quad (60)$$

Hierin is m de massa van de deeltjes, T de temperatuur, en k_B de Boltzmann constante. Hieronder hebben we het verloop van de Maxwell verdeling getekend voor zuurstof bij 100 K (rood), 200 K (groen) en 300 K (blauw).



- Bij iedere temperatuur zijn er dus moleculen met alle mogelijke snelheden. Maar als de temperatuur toeneemt, neemt het aantal snelle moleculen t.o.v. het aantal langzame moleculen toe.

We kunnen de Maxwell verdeling ook schrijven als een functie van de energie

$$f = 2 \frac{\epsilon}{m} \exp\left(-\frac{\epsilon}{k_B T}\right) \quad (61)$$

met daarin de dimensieloze verhouding van de kinetische energie $\epsilon = m v^2 / 2$, en de temperatuur, vermenigvuldigd met de Boltzmann constante. De kans om een deeltje met energie ϵ aan te treffen neemt dus exponentieel af voor energieën ϵ die groot zijn t.o.v. $k_B T$.

- De e-macht in de Maxwell-verdeling wordt de *Boltzmann factor* genoemd

$$\text{Boltzmann factor} = \exp\left(-\frac{\epsilon}{k_B T}\right) \quad (62)$$

Boltzmann was de eerste die inzag dat de Maxwell verdeling ook toepasbaar is op het geval van een deeltje in een potentiaal door de vervanging $\epsilon \rightarrow \epsilon + V$.

- Nog algemener, voor ieder (klassiek) systeem in thermisch evenwicht blijkt de verdeling over de diverse energieën ϵ gegeven te worden door de Boltzmann factor.

▽ Gemiddelde waarden

Als we de Maxwell distributiefunctie integreren over alle waarden van de snelheid krijgen we

```
Remove["Global`*"]
f[v_] := v^2 Exp[-(m v^2)/(2 k_B T)]
```

$$\text{Integrate}\left[f[v], \{v, 0, \infty\}, \text{Assumptions} \rightarrow \left\{\text{Re}\left[\frac{m}{k_B T}\right] > 0\right\}\right]$$

$$\frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}}}{\left(\frac{m}{T k_B}\right)^{3/2}}$$

Om de Maxwell-verdeling te kunnen interpreteren als de kansdichtheid om een enkel deeltje met een bepaalde snelheid aan te treffen moeten we normeren op de waarde één. We definiëren daarom een nieuwe Maxwell verdeling als

$$f_M[v] := 4 \pi \left(\frac{m}{2 \pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} v^2 \text{Exp}\left[-\frac{m v^2}{2 k_B T}\right]$$

$$\text{Integrate}\left[f_M[v], \{v, 0, \infty\}, \text{Assumptions} \rightarrow \left\{\text{Re}\left[\frac{m}{k_B T}\right] > 0\right\}\right]$$

1

De normering is dan inderdaad één.

Met deze Maxwell-distributiefunctie kunnen we diverse gemiddelden bepalen, b.v. de *gemiddelde snelheid* van deeltjes in een gas bij temperatuur T :

$$\langle v \rangle_{\text{gem}} = \int_0^{\infty} v f_M(v) dv \quad (63)$$

de *middelbare snelheid*

$$\langle v^2 \rangle_{\text{gem}} = \int_0^{\infty} v^2 f_M(v) dv \quad (64)$$

en de *gemiddelde kinetische energie* per deeltje

$$\langle \epsilon \rangle_{\text{gem}} = \int_0^{\infty} \epsilon f_M(v) dv \quad (65)$$

Aangezien de piek van de distributiefunctie ligt bij de energie $k_B T$, verwachten we dat het antwoord evenredig zal zijn met $k_B T$. De integralen zijn exact te doen (zie paragraaf gaussische integralen) en we vinden voor de gemiddelde kinetische energie:

$$\epsilon_{\text{gem}} = \frac{3}{2} k_B T \quad (66)$$

- Per vrijheidsgraad is er een bijdrage $k_B T/2$ aan de gemiddelde energie.

▽ Gaussische integralen

In de statistische mechanica komen vaak gaussische integralen voor van de vorm:

$$I_n = \int_0^{\infty} v^n e^{-a v^2} dv \quad (67)$$

De parameter $a = m/(2k_B T)$ is een combinatie van de massa, de Boltzmann constante en temperatuur; dus is a positief. Deze integraal voor willekeurige n is door differentiatie naar de parameter a af te leiden uit twee basisintegralen:

```
Remove["Global`*"]
I_0 = Integrate[Exp[-a v^2], {v, 0, ∞}, Assumptions -> {a > 0}]
```

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2 \sqrt{a}}$$

en

```
I_1 = Integrate[v Exp[-a v^2], {v, 0, ∞}, Assumptions -> {a > 0}]
```

$$\frac{1}{2 a}$$

- De algemene formules voor de twee gevallen van een even en een oneven macht zijn:

$$I_{2n} = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{2 (2a)^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (68)$$

en

$$I_{2n+1} = \frac{n!}{2 a^{n+1}} \quad (69)$$

▼ Straling

Volgens de quantummechanische theorie van elektromagnetische straling bestaat een elektromagnetische golf uit massalose fotonen met energie en impuls gegeven door

$$\epsilon = \frac{h c}{\lambda}, \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (70)$$

waarbij λ de golflengte is, h de constante van Planck, en c de lichtsnelheid.

De wisselwerking tussen fotonen is volstrekt verwaarloosbaar en een gas van fotonen kan alleen in thermisch evenwicht komen doordat fotonen zich bevinden in een omgeving die zelf in thermisch evenwicht is, bijvoorbeeld het inwendige van een hete ster. De straling uitgezonden door zo'n object heeft een energie die toeneemt met de vierde macht van T :

$$E = 4 V \frac{\sigma}{c} T^4 \quad (71)$$

Dit staat bekend als de *wet van Stephan-Boltzmann* en $\sigma = 5.67 \cdot 10^8 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ heet de *Stephan-Boltzmann constante*.

Deze warmtestraling, ook wel thermische straling genoemd, heeft een karakteristiek spectrum dat wordt beschreven door de verdelingsfunctie van Planck

$$\rho(\epsilon) = \frac{8\pi}{h^3 c^3} \left(\frac{\epsilon^3}{e^{\beta\epsilon} - 1} \right), \quad \beta = 1/(k_B T) \quad (72)$$

gevonden door Max Planck in 1900.

Als we deze formule trachten af te leiden uit de Maxwell-distributiefunctie hebben we twee problemen

fotonen zijn relativistische deeltjes

fotonen zijn quantummechanische deeltjes (bosonen).

Het eerste probleem lossen we eenvoudig op door de Boltzmann factor te schrijven als een functie van de energie ϵ van de fotonen:

$$\rho(\epsilon) = \epsilon^3 e^{-\beta\epsilon} \quad (73)$$

Dit was het voorstel van Wilhelm Wien in 1896. De derde macht van de energie in de voor-factor moet deze waarde hebben om overeenstemming te krijgen met de wet van Stephan-Boltzmann. Immers slechts dan is de totale energie

$$E = a \int_0^{\infty} \epsilon^3 e^{-\beta\epsilon} d\epsilon \quad (74)$$

met a een nader te bepalen constante, evenredig met de vierde macht van de temperatuur, zoals we eenvoudig vinden door de substitutie $x = \beta\epsilon$:

$$E = a T^4 \int_0^{\infty} x^3 e^{-x} dx \quad (75)$$

Nauwkeurige metingen toonden echter aan dat het voorstel van Wien niet juist was. In 1900 wist Max Planck de goede verdelingsfunctie af te leiden door aan te nemen dat licht bestaat uit kleine gequantiseerde energie eenheden en straling te behandelen als een systeem van harmonische oscillatoren.

Testvragen

▼ 1. Lift

Als een lift omhoog wordt gehesen met een constante snelheid dan is de totale arbeid op de lift

☐ positief

☐ negatief

☐ nul?

▼ 2. Kar

Iemand duwt een zeer zware kar over een horizontale vlakke vloer. De arbeid die de zwaartekracht verricht op de kar

- ☐ hangt af van het gewicht
- ☐ kan met deze gegevens niet berekend worden
- ☐ is nul.

▼ 3. Arbeid

Als je positieve arbeid op een deeltje verricht, dan neemt de energie

- ☐ toe
- ☐ af
- ☐ blijft gelijk.

▼ 4. Zwaartekracht

Verricht de aarde arbeid op een persoon die een trap afloopt?

- ☐ ja
- ☐ nee, want er wordt geen potentiële energie omgezet in kinetische energie
- ☐ nee, vanwege actie is reactie

▼ 5. Botsing

In een botsing tussen twee biljartballen

- ☐ is de energie niet behouden als de botsing volledig elastisch is
- ☐ is de impuls niet behouden als de botsing inelastisch is
- ☐ zijn beide behouden.

▼ 6. Conservatieve krachten

Welke kracht is niet conservatief?

☐ de kracht van een veer☐ wrijvingkracht☐ zwaartekracht

▽ 7. Potentiële energie

Stel je kent de potentiële energie die correspondeert met een zekere kracht. Is het dan altijd mogelijk de kracht te berekenen?

☐ ja☐ slechts als de kracht niet conservatief is☐ nee

▽ 8. Potentiaal

De onderstaande figuur geeft de potentiële energie tussen twee moleculen tengevolge van hun onderlinge krachten als functie van de onderlinge afstand. Bij welke op de curve aangegeven punten is de kracht tussen de moleculen nul?

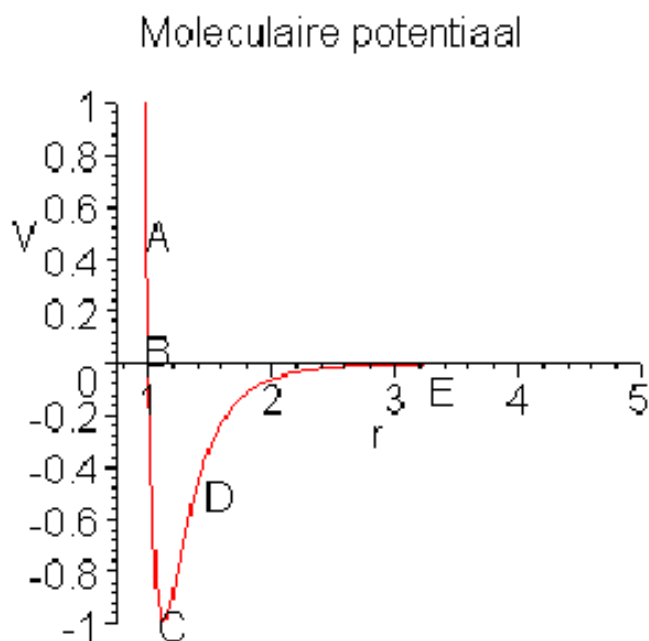


Figure 1

☐ A☐ B☐ C☐ D☐ E

▼ 9. Veer

De potentiële energie van een veer is

☐ evenredig met de uitwijking☐ evenredig met het kwadraat van de uitwijking☐ constant

▼ 10. Auto

Een auto remt af als gevolg van de luchtweerstand. Wat is dan waar?

☐ de kinetische energie van de auto neemt af.☐ er ontstaat warmte☐ de energie van het gehele systeem auto/weg/lucht is constant☐ alle voorgaande beweringen☐ geen van deze beweringen

▼ 11. Heter

Kan men zeggen dat een lichaam twee keer heter is dan een ander?

- ☐ ja
- ☐ nee
- ☐ dat hangt ervan af

▼ 12. Temperatuur

De temperatuur van een lichaam is een maat voor de hoeveelheid warmte die een lichaam bevat. Is deze uitspraak

- ☐ a. juist
- ☐ b. onjuist
- ☐ c. onvolledig

▼ 13. Warmte

Om een lichaam te verhitten moet dan warmte toegevoerd worden? Als warmte wordt toegevoerd, moet dan de temperatuur stijgen?

- ☐ ja, ja
- ☐ ja, nee
- ☐ nee, ja
- ☐ nee, nee

▼ 14. Kinetische energie

De temperatuur van een gas is evenredig met de kinetische energie van de deeltjes. Als een vat met daarin een gas beweegt met een snelheid van 2000 m/s, is de temperatuur van het gas dan

- ☐ hoger
- ☐ lager

- ☐ gelijk

▽ 15. Ideale gaswet

De afleiding van de ideale gaswet is gebaseerd op de veronderstelling dat het aantal deeltjes zeer groot is zodat we de druk konden berekenen als het resultaat van vele botsingen. Maar de gaswet is alleen geldig bij lage druk en deeltjes dichtheid. Is dit inconsistent?

- ☐ ja
- ☐ nee
- ☐ hangt er vanaf

▽ 16. Duiker

Een duiker die omhoog gaat, moet tijdens het stijgen

- ☐ lucht uitblazen
- ☐ lucht inademen
- ☐ geen van beide

▽ 17. Twee vaten

Beschouw twee vaten met verschillende deeltjes. Het volume van beide vaten is gelijk evenals het aantal deeltjes en de gemiddelde snelheid van de deeltjes. Als de massa van de deeltjes in vat 1 groter is dan de massa van de deeltjes in vat 2, is dan de temperatuur in vat 1 groter? En de druk?

- ☐ ja, ja
- ☐ ja, nee
- ☐ nee, ja
- ☐ nee, nee

▽ 18. Verhitten

Als een gesloten vat met een zeker volume wordt verhit, welke uitspraken zijn dan waar?

- ☐ de moleculen bewegen langzamer
- ☐ de druk neemt toe
- ☐ de snelheid van de deeltjes blijft hetzelfde
- ☐ de kracht tussen de moleculen neemt toe

▼ 19. Vaste stof

Hoe zou je deeltjes in een vaste stof bij kamer temperatuur beschrijven?

- ☐ dicht op elkaar en onbeweeglijk
- ☐ dicht op elkaar en trillend
- ☐ dicht bij elkaar en willekeurig bewegend
- ☐ ver uit elkaar en onbeweeglijk

▼ 20. Brownse beweging

We kunnen zien dat kleine rookdeeltjes in een goed verlichte glazen pot kleine grillige bewegingen maken. Deze bewegingen zijn het gevolg van

- ☐ de energie van het licht die de deeltjes doen expanderen
- ☐ de energie van de lichtbron die een convectieve stroming in de pot veroorzaakt
- ☐ statische electriciteit
- ☐ de beweging van de luchtmoleculen in de pot

Mathematica

▼ Packages

Voor dit notebook heb je de volgende packages nodig:

```
<< VisualDSolve`
<< Statistics`DataManipulation`
<< Graphics`Graphics`
<< Graphics`Colors`
```

```
Get::noopen : Cannot open VisualDSolve`.
```

```
$Failed
```

```
Null2
```

▼ Commando's

▼ Integrate

Integreren gaat met het commando **Integrate**. Dit commando heeft minimaal twee argumenten nodig; de functie die je wilt integreren en de variabele waarnaar je wilt integreren.

```
Integrate[Sin[x], x]
```

```
-Cos[x]
```

```
Integrate[Sin[x], y]
```

```
y Sin[x]
```

Als je de integraal expliciet wilt uitrekenen moet je de grenzen opgeven. Dat gaat weer in de vorm van een lijst:

```
Integrate[x^2, {x, 0, 10}]
```

$$\frac{1000}{3}$$

Het kan voorkomen dat je bepaalde constanten gebruikt die je b.v. positief veronderstelt. Dit kun je op de volgende manier aangeven:


```
Integrate[Exp[a x], {x, 0, ∞}, Assumptions -> {a < 0}]
```

$$-\frac{1}{a}$$

▼ Join

Met het commando **Join** kun je twee lijsten verenigen:

```
lijst1 = {1, 2, 3}  
lijst2 = {3, 2, 1}
```

```
{1, 2, 3}
```

```
{3, 2, 1}
```

```
Join[lijst1, lijst2]
```

```
{1, 2, 3, 3, 2, 1}
```

▼ Table

Een lijst kun je maken met **Table**. Dit is vooral handig als de objecten worden gegeven door een en dezelfde uitdrukking waarbij een teller met stappen van 1 loopt:

```
Table[i, {i, 3, 5}]
```

```
{3, 4, 5}
```

▼ Random

Random kiest willekeurig een getal van een bepaald type (b.v. integer of complex) uit een bepaald bereik.

```
Random[Integer, {0, 4}]
Random[Integer, {0, 4}]
Random[Integer, {0, 4}]
Random[Integer, {0, 4}]
```

3

3

2

2

▼ Module

Variabelen in *Mathematica* zijn over het algemeen globale variabelen. Dat betekent dat hun waarde "overall" bekend is. Dat wil zeggen: ook buiten de berekening waar de variabele wordt gebruikt.

Met **Module** kun je een variabele maken die alleen lokaal bekend is. **Module** wordt als volgt gebruikt:

```
f[x_] := Module[{p}, p = N[Log[x]]]
```

```
f[2]
```

0.693147

```
p
```

p

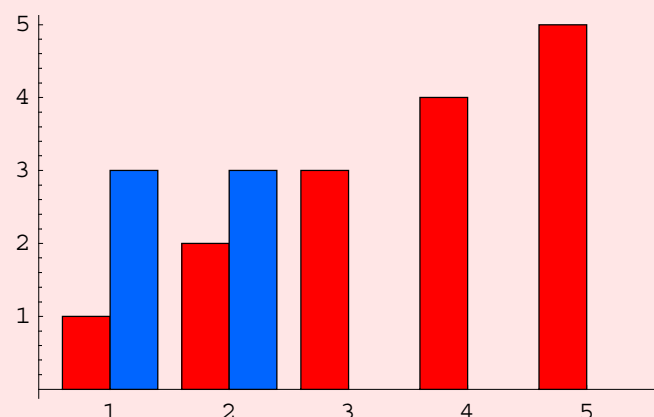
Hierbij is **p** de lokale variabele. Buiten de functie **f** heeft **p** geen waarde.

▼ BarChart

Het maken van histogrammen doe je met **BarChart**.

```
lijst1 = {1, 2, 3, 4, 5};
lijst2 = {3, 3};
```

```
BarChart[lijst1, lijst2];
```



▽ Flatten

Met **Flatten** is het mogelijk de interne structuur van een lijst te verwijderen. Bijvoorbeeld:

```
lijst = {{2, 3}, {2, 3, 4}, 5}
```

```
{{2, 3}, {2, 3, 4}, 5}
```

```
Flatten[lijst]
```

```
{2, 3, 2, 3, 4, 5}
```

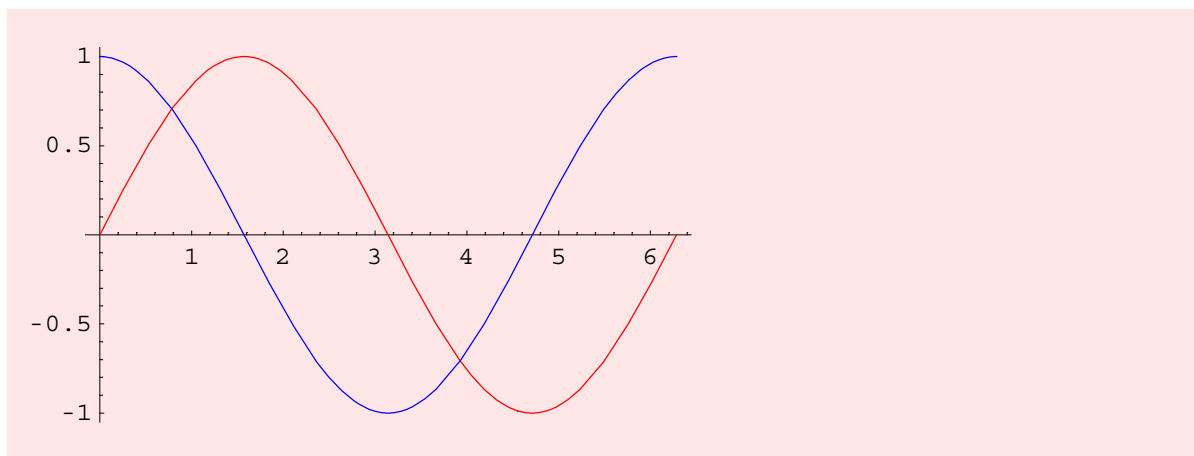
▽ Show

Show is heel handig als je meerdere grafieken in een plot wilt weergeven. Door de optie **DisplayFunction->Identity** binnen **Plot** en de optie **DisplayFunction->\$DisplayFunction** binnen **Show** te gebruiken worden de grafieken pas met het aanroepen van **Show** getoond.

```
functie1[x_] := Sin[x];  
functie2[x_] := Cos[x];
```

```
grafiek1 = Plot[functie1[x], {x, 0, 2 π},  
  PlotStyle -> Red, DisplayFunction -> Identity];  
grafiek2 = Plot[functie2[x], {x, 0, 2 π},  
  PlotStyle -> Blue, DisplayFunction -> Identity];
```

```
Show[grafiek1, grafiek2, DisplayFunction -> $DisplayFunction];
```



▼ Roots

Met **Roots** kun je de wortels van een polynomische vergelijking vinden:

```
polynoom = x^2 + x - 2;
```

```
Roots[polynoom == 0, x]
```

```
x == -2 || x == 1
```

Voorbeelden

▼ Ideale gaswet

In de paragraaf druk wordt een algemene relatie afgeleid tussen de druk en het gemiddelde van het kwadraat van de snelheid:

$$P = \frac{1}{3} n m (v^2)_{\text{gem}}$$

De opdracht is om na te gaan dat voor een ideaal gas in evenwicht hieruit de ideale gaswet is af te leiden.

▼ Gemiddelde kwadratische snelheid

We definiëren het gemiddelde $(v^2)_{\text{gem}}$ voor een willekeurige distributie functie $f(v)$. Stel de distributiefunctie is genormeerd op één

$$\int_0^\infty f(v) dv = 1$$

Het gemiddelde van v^2 wordt dan bepaald door vermenigvuldiging met de desbetreffende waarschijnlijkheidsfunctie $f(v)$ en dan integratie over alle snelheden:

$$\int_0^\infty v^2 f(v) dv = (v^2)_{\text{gem}}$$

Als $f(v)$ niet genormeerd is op 1 moeten we nog delen door de normeringsconstante en krijgen we de meer algemene formule

$$\frac{\int_0^\infty v^2 f(v) dv}{\int_0^\infty f(v) dv} = (v^2)_{\text{gem}}$$

▽ Maxwell-verdeling

We berekenen nu het gemiddelde van v^2 voor de Maxwell verdeling. We definiëren eerst de Maxwell distributiefunctie:

$$f[v] := v^2 \exp\left[-\frac{m v^2}{2 k T}\right]$$

Definieer nu de integralen

$$I_0 = \text{Integrate}\left[f[v], \{v, 0, \infty\}, \text{Assumptions} \rightarrow \left\{\text{Re}\left[\frac{m}{k T}\right] > 0\right\}\right]$$

$$\frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}}}{\left(\frac{m}{k T}\right)^{3/2}}$$

$$I_2 = \text{Integrate}\left[v^2 f[v], \{v, 0, \infty\}, \text{Assumptions} \rightarrow \left\{\text{Re}\left[\frac{m}{k T}\right] > 0\right\}\right]$$

$$\frac{3 \sqrt{\frac{\pi}{2}}}{\left(\frac{m}{k T}\right)^{5/2}}$$

Het gemiddelde van het kwadraat van de snelheid is dan

$$I_2 / I_0$$

$$\frac{3 k T}{m}$$

- De snelheid is groter naarmate de temperatuur groter is , en de massa kleiner is.
- Controleer dat de dimensies in de formule kloppen !

▽ Druk

We berekenen nu de druk.

Aangezien de bovenstaande formule voor de druk algemeen geldig is voor een ideaal gas verwachten we de ideale gaswet te vinden. Laten we dit controleren.

$$P = \frac{1}{3} m n \langle v^2 \rangle_{\text{gem}} / \langle v^2 \rangle_{\text{gem}} \rightarrow \frac{I_2}{I_0}$$

$$k n T$$

Dit is inderdaad de ideale gaswet.

▼ Vrije deeltjes

We beschouwen een gas van vrije deeltjes in een doos die niet met elkaar botsen maar wel met de wanden van de doos. Het gas bevindt zich niet in evenwicht, oftewel de snelheden van de deeltjes zijn niet volgens de Maxwell distributiefunctie verdeeld. We simuleren dit systeem met *Mathematica*.

▼ Snelheidsvector

Voor het gemak kiezen we een 1-dimensionaal systeem en een gas van 10 deeltjes. Een deeltje dat met de wand botst heeft na de botsing dezelfde snelheid maar beweegt in tegengestelde richting. We kiezen de grootte van beginsnelheden gelijk aan 1, gelijk verdeeld over beide richtingen. We maken een vector waarin de beginsnelheden van de deeltjes staan.

```
Remove["Global`*"];
<< Statistics`DataManipulation`;
<< Graphics`Graphics`;
<< Graphics`Colors`
```

```
n = 10;
v = Join[Table[1, {n/2}], Table[-1, {n/2}]]
```

```
{1, 1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1, -1}
```

We kiezen nu random een deeltje dat met de wand botst.

```
kiesdeeltje := Random[Integer, {1, n}];
p = kiesdeeltje
```

```
9
```

Na de botsing beweegt het deeltje in een tegengestelde richting dan voor de botsing, de botsing verandert de richting van de snelheid.

```
v[[p]] = -v[[p]]
```

```
1
```

▽ Botsing

We maken nu een procedure die een deeltje kiest en deze laat botsen met de wand. De procedure heeft dus als input de snelheden van deeltjes op een gegeven moment en als output de snelheden van de deeltjes, nadat een willekeurig deeltje een botsing heeft gemaakt met de wand. We maken deze procedure **botsing** als volgt

```
botsing[v_] := Module[{p, V},
  p = kiesdeeltje;
  V = v;
  V[[p]] = -V[[p]];
  V
]
```

We zullen nu tien botsingen achter elkaar bekijken, daartoe itereren we de procedure **botsing** tien keer m.b.v. de opdracht **Nest**.

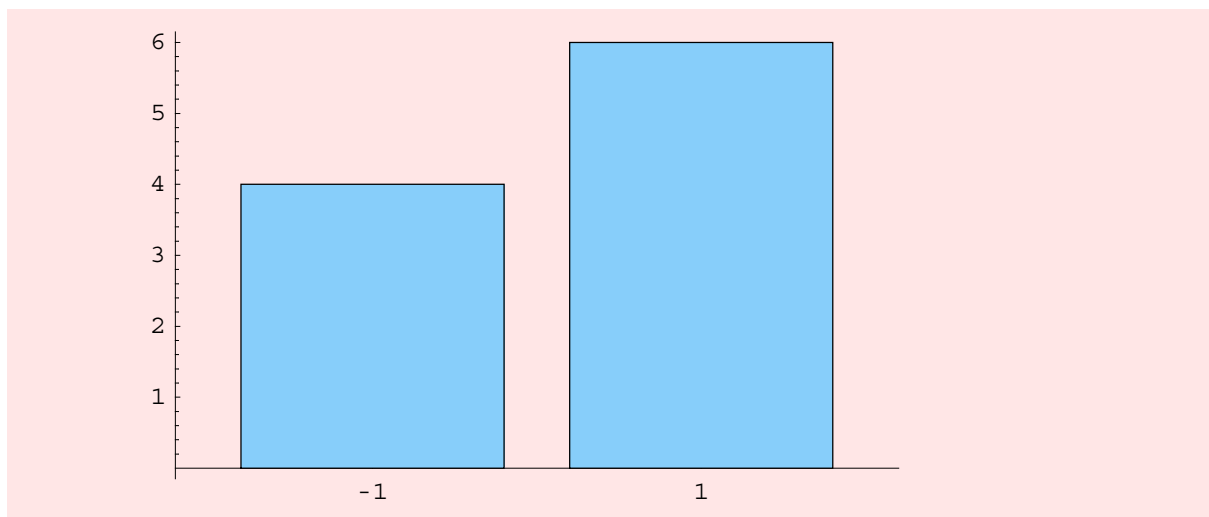
```
v = Nest[botsing, v, 10]
```

```
{-1, -1, -1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, 1}
```

▽ Histogram

We plotten nu de snelheidsverdeling in een histogram:

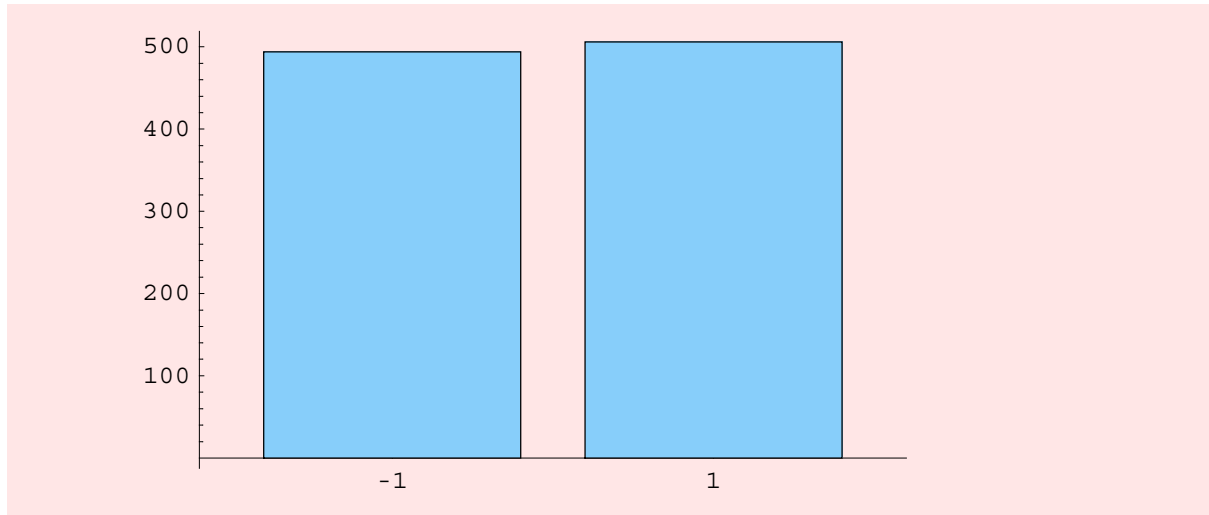
```
BarChart[Frequencies[v], BarStyle -> {LightSkyBlue}];
```



Als je deze procedure een paar keer herhaalt, zul je zien dat n_- (= # snelheden -1) en n_+ (= # snelheden +1) variëren. Er is een kansverdeling van de snelheden waar we in het werkboek Natuurkunde 4 verder op in zullen gaan.

Om meer gegevens te krijgen laten we telkens de tien deeltjes tien keer botsen en zetten vervolgens de snelheden in een lijst. Al deze snelheden plotten we in een histogram.

```
vlist = Table[Nest[botsing, v, 10], {100}];
data = Flatten[vlist];
BarChart[Frequencies[data], BarStyle -> {LightSkyBlue}];
```



We verwachten uiteindelijk een 50%-50% verdeling over de twee mogelijke snelheden, maar bij dit aantal iteraties zien we nog steeds een verschil. Zo'n afwijking van een meest waarschijnlijke toestand noemt men een *fluctuatie*.

Vraagstukken

Aanwijzingen voor het oplossen van vraagstukken..

Nothing beats thinking!

Voor het oplossen van natuurkundige vraagstukken bestaan geen vaste voorschriften. Toch is het verstandig een aantal regels te volgen:

Bezint eer gij begint:

Lees de vraagstelling zorgvuldig door. Probeer de natuurkunde van het probleem te begrijpen voordat je *Mathematica* erop los laat. Geef aan welke variabelen in het probleem gegeven zijn en welke gevraagd worden.

Probleemstelling:

Begin een uitwerking met een omschrijving van de probleemstelling in je eigen woorden en geef aan welke variabelen in het probleem gegeven zijn en welke gevraagd worden.

Teken figuur:

Teken voor jezelf een diagram om het probleem te verduidelijken.

Veronderstellingen:

Ga na wat de veronderstellingen zijn; wees niet bang zelf een veronderstelling te formuleren. Het is vaak mogelijk om een eerste schatting van de numerieke uitkomst te geven door vereenvoudigende veronderstellingen te maken.

Geef uitleg:

Geef in de uitwerking van een vraagstuk bij iedere stap steeds uitleg over wat je aan het doen bent en waarom. Je werk wordt daarop beoordeeld.

Dimensies:

Werk zoveel mogelijk met algebraïsche formules, met de numerieke constanten aangegeven door een symbool (h voor de constante van Planck, c voor de lichtsnelheid etc.). Dit heeft het voordeel dat de dimensies van de tussen-resultaten en het antwoord gecontroleerd kunnen worden.

Onderwerp alle belangrijke uitdrukkingen aan deze controle. Laat dit zien in de uitwerking.

Gebruik wat je weet:

Bekijk alle uitkomsten kritisch en vergelijk eventueel met een ander resultaat dat bekend is. Lijkt het antwoord plausibel? Schrijf je conclusie op.

Tenslotte, hou het ordelijk!

Bedenk dat je niet schrijft voor jezelf maar voor iemand anders.

1. Energie

1.1 Voedingscyclus [2 pu]

Een systeem dat in wisselwerking staat met zijn omgeving heet een open systeem. We beschouwen een proces, een z.g. cyclisch proces, waarbij een dergelijk systeem na een zekere tijd weer in zijn begintoestand komt. Volgens de eerste hoofdwet van de thermodynamica betekent dit dat de nettobalans van de arbeid die het systeem heeft verricht, plus de warmte die het heeft afgestaan, plus de stralingsenergie die het heeft uitgezonden, moet uitkomen op nul.

Bekijk als concreet systeem het menselijk lichaam. Dit is een voorbeeld van een open systeem. Het lichaam verliest energie door het verrichten van arbeid en neemt energie op door voedsel te verbranden. Elke nacht keert het terug in dezelfde (slapende) toestand.

1.1.1 Controleer dat er netto geen energie winst/verlies is geweest in het **schema** voor de voedings-arbeid balans.

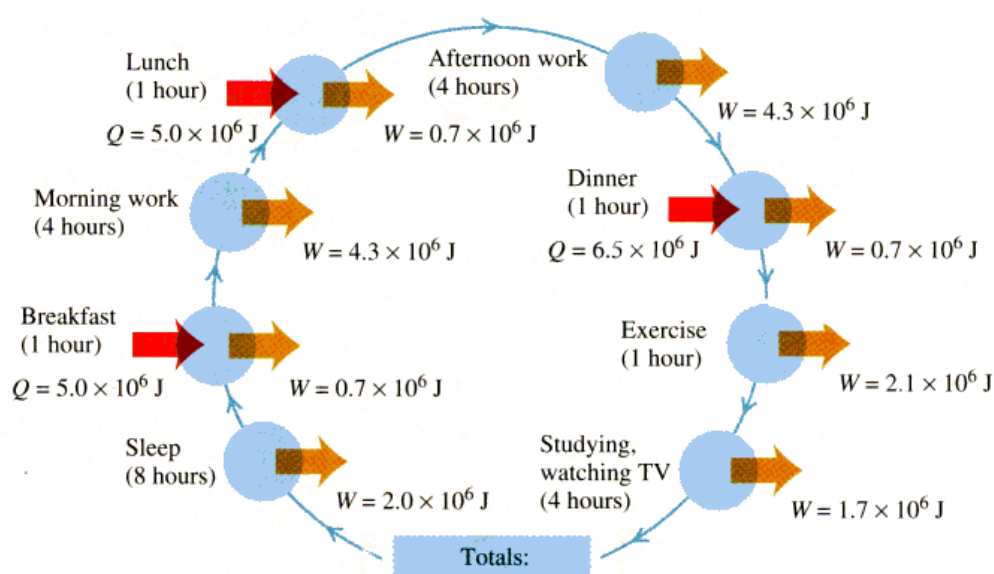


Figure 2

Antwoord

- 1.1.2 Stel de persoon eet een ijsje met slagroom met Calorie waarde 900 (een voedsel Calorie heeft de waarde $1 \text{ kcal} = 4190 \text{ J}$). Hoe hoog moet die persoon klimmen om deze energie weer kwijt te raken? Kies zelf een redelijke waarde voor het gewicht en het rendement van de verbranding.

Antwoord

- 1.1.3 Veronderstel dat deze persoon een trap van vier meter hoogte kan opklimmen in 5 sec. Hoeveel arbeid wordt verricht per seconde en hoeveel kcal moeten daarvoor per seconde verbrand worden. Hoeveel ijsjes is dit per uur? Druk de berekende energie per seconde uit in Watt = joule per seconde. Vergelijk dit met het vermogen van een gloeilamp.

Antwoord**1.2 Energie [3 pu]**

We beschouwen twee vaten ieder gevuld met een ideaal gas. Het eerste vat heeft een volume V_1 en het gas in dit vat heeft een druk P_1 ; het tweede vat heeft een volume V_2 en het gas in dit vat heeft een druk P_2 . Nu zetten we het kraantje open dat de twee vaten verbindt en we wachten tot het systeem in evenwicht is.

- 1.2.1 Wat is de energie van dit systeem?

Antwoord

- 1.2.2 En wat is de druk?

Antwoord

- 1.2.3 Als de temperatuur in het eerste vat T_1 was voordat de kraan werd open gezet, en de temperatuur in het tweede vat T_2 , wat is dan de temperatuur in het totale systeem?

Antwoord**1.3 Moleculaire kristallen [3 pu]**

De wisselwerking tussen paren "eenvoudige" moleculen (bv. stikstof, argon) kan in goede benadering worden beschreven met de empirische Lennard-Jones potentiaal: $v[r] := 4 \epsilon \left(\left(\sigma / r \right)^{12} - \left(\sigma / r \right)^6 \right)$, waarin σ een maat is voor de grootte van de moleculen, ϵ een maat voor de sterkte van de potentiaal en r de afstand tussen de moleculen. Voor het edelgas argon is $\sigma = 0.341$ nm en $\epsilon = 1.656 \cdot 10^{-21}$ Joules. Dergelijke moleculaire systemen vormen vaak dichtgepakte kristallen met een kubische vlakgecentreerde structuur, die tot de meest compressibele vaste stoffen horen. Ieder molecuul heeft 12 naaste buren op afstand R en het beschikbare volume per molecuul is $V = R^3 / \sqrt{2}$. Met behulp van dit model kunnen we redelijk goede schattingen maken voor de energie en dichtheid van een argonkristal bij lage temperatuur T en voor de sublimatiewarmte (d.w.z. de warmte die nodig is om een vaste stof te verdampen).

- 1.3.1** Op welke intermoleculaire afstanden oefenen twee moleculen geen kracht op elkaar uit en op welke afstanden is de potentiaal tussen twee moleculen gelijk aan nul? Beredeneer of, en zo ja welke van deze situaties voorkomen in een kristal en in een damp (bedenk wat de dichtheden zijn in deze aggregatietoestanden).

Antwoord

- 1.3.2** Bereken de molaire dichtheid ρ van een argonkristal voor de intermoleculaire afstanden waarbij $F=0$ (ter vergelijking, de experimentele dichtheid van argon is 0.04433 mol/cc). Bereken de energie U_{kristal} van een argonkristal voor de hoogste dichtheid waarbij de moleculen geen kracht op elkaar uitoefenen. Bereken ook de energie U_{damp} voor een damp (typische dichtheid $\sim 4.4 \cdot 10^{-5}$ mol/cc) en berekend de sublimatiewarmte $U = U_{\text{kristal}} - U_{\text{damp}}$ (de experimentele sublimatiewarmte van argon is 7812 J/mol). Bespreek de verschillen tussen jouw uitkomst en de experimentele waarden, bv. de invloed van verder weg gelegen moleculen in een kristal of van roostertrillingen.

Antwoord

- 1.3.3** In de limiet $T \rightarrow 0$ K kan de druk p op een moleculair kristal worden geschreven als $p = -dU/dV$. Bereken de druk P_1 op een argonkristal voor de dichtheid waarbij de moleculen geen kracht op elkaar uitoefenen en bereken de druk P_2 op een argonkristal voor de (hoge) dichtheid waarbij de moleculen geen potentiaal op elkaar uitoefenen. Is het drukverschil $P_2 - P_1$ groot of klein, beschouwd vanuit je ervaring met de samendrukbaarheid van bijvoorbeeld water (vergelijkbaar met een vaste stof) of gas?

Antwoord

2. Druk

2.1 Hete-lucht ballon [3 pu]

Een hete-lucht ballon zweeft op zekere hoogte boven het aardoppervlak. Op deze hoogte is de temperatuur van de lucht 10 graden Celsius, de temperatuur van de lucht in de ballon is 60 graden Celsius.

2.1.1 Als de luchtdruk op deze hoogte P_L is, wat is dan de druk in de ballon?

Antwoord

2.1.2 Wat is de verhouding tussen de deeltjes-dichtheid in de ballon, n_B , en die van de lucht, n_L ?

Antwoord

2.1.3 Stel de ballon heeft een volume van 1000 m^3 en de massa van 1 m^3 lucht op deze hoogte is gelijk aan 1.2 kg . Wat is dan de massa die de ballon kan dragen?

Antwoord

2.2 Champagne fles [3 pu]

De kurk van een champagne fles kan bij het openen van de fles met een ferme klap de lucht in schieten. De gasdruk van ca. 5 atm. in de hals van de fles - een cylinder van 10 cm hoog en 2 cm diameter - lanceert de kurk met gewicht 10 gram, hoogte 2.5 cm en diameter 2 cm, nadat de sluiting is losgemaakt. We proberen de maximale hoogte te berekenen die de kurk in de lucht kan vliegen.

Neem bij de berekening aan dat het gas in de hals van de fles zich gedraagt als een ideaal gas.



Figure 3

- 2.2.1 Bereken de kracht op de kurk vlak voordat deze lost komt van de fles. Weet je nu genoeg om, gegeven het gewicht van de kurk, de maximale te bereiken hoogte af te schatten ?

Antwoord

- 2.2.2 Indien alle energie van het gas voordat de sluiting wordt los gemaakt effectief wordt gebruikt bij het lanceren van de kurk, wat is dan de maximale energie die de kurk kan krijgen en hoe hoog zal de kurk dan kunnen komen?

Antwoord

- 2.2.3 Waarom komt de kurk nooit zo hoog ?

Antwoord

2.3 Barometrische hoogte formule [4 pu]

De atmosferische luchtdruk is afhankelijk van de hoogte boven zeeniveau. Het verschil tussen de luchtdruk P_0 op hoogte h_0 en de luchtdruk P_1 op hoogte h_1 is het gewicht van de kolom lucht tussen h_0 en h_1 die drukt op een oppervlak van 1 m^2 . De massa dichtheid van lucht is ρ .

- 2.3.1 Bereken het drukverschil, $\Delta P = P_1 - P_0$ in termen van $\Delta h = h_1 - h_0$.

Antwoord

- 2.3.2 Als we de hoogte meten langs de z -as, laat zien dat dat het drukverschil verkregen kan worden uit de differentiaal vergelijking

$$\frac{dP}{dz} = -\rho g$$

met g de valversnelling.

Antwoord

- 2.3.3 Gebruik de ideale gaswet en los deze vergelijking op onder de voorwaarde dat T constant is. Neem aan dat $z = 0$ op zeeniveau.

Antwoord

- 2.3.4 Bereken de luchtdruk op de Mount Everest waar $z = 8848 \text{ m}$. Gebruik dat de druk P_0 op zeeniveau gelijk is aan 1 atm .

Antwoord

- 2.3.5 Als de luchtdruk lager wordt dan ongeveer $0.65 \times 10^5 \text{ Pa}$, kan het menselijk lichaam vrijwel geen zuurstof meer absorberen uit de lucht. Op welke hoogte wordt deze kritische grens volgens de berekening onder 2.4.4 overschreden?

Antwoord

3. Maxwell distributiefunctie [5 pu]

Gegeven is de Maxwell-Boltzmann distributie als een functie van de snelheid v voor een gas van deeltjes met massa m in thermisch evenwicht bij temperatuur T

$$f(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{m}{kT} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}$$

- 3.1 Plot deze distributiefunctie voor een aantal waarden van m en kT .

Antwoord

- 3.2 Laat zien dat het maximum van $f(v)$ optreedt als de kinetische energie gelijk is aan kT . Geef een schatting voor de gemiddelde snelheid van de deeltjes bij temperatuur T . Geef een schatting voor de meest waarschijnlijke snelheid v_{mw} in een gas.

Antwoord

- 3.3 Laat zien dat de Maxwell-Boltzmann distributiefunctie $f(v)$ genormeerd is op één:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(v) dv = 1$$

Leg uit waarom deze normering wordt gekozen; geef de fysische betekenis van $f(v)$.

Antwoord

- 3.4 Bereken de gemiddelde snelheid

$$v_{\text{gem}} = \int_0^{\infty} v f(v) dv$$

en de middelbare snelheid

$$(v^2)_{\text{gem}} = \int_0^{\infty} v^2 f(v) dv$$

en vergelijk met de meest waarschijnlijke snelheid.

Antwoord

- 3.5 Bereken de gemiddelde kinetische energie in een ideaal gas bij temperatuur T .

Antwoord**4. Maxwell-Boltzmann distributiefunctie [5 pu]**

We hebben in de vorige opgave de Maxwell distributiefunctie bestudeerd, deze gaf de kansdichtheid voor een deeltje met snelheid v , of equivalent, een kinetische energie $\epsilon = \frac{1}{2} m v^2$. In deze opgave zullen we proberen te begrijpen wat er gebeurt als er een extern veld is aangelegd, waardoor deeltjes een kracht ondervinden. De snelheidsverdeling wordt dan gegeven door de Maxwell-Boltzmann distributiefunctie.

$$f_{\text{MB}} = v^2 e^{-\frac{(\epsilon + V)}{kT}}$$

met V de potentiële energie.

We gaan de invloed van de potentiële energie bepalen. Beschouw een doos met deeltjes in thermisch evenwicht. Eén van de deeltjes is een elektron, en heeft een lading; de rest van de deeltjes is neutraal (denk bv. aan een gas van Heliumatomen). Er is een sterk homogeen elektrisch veld aangelegd in de x -richting. Dit betekent dat het elektron een constante kracht in de richting van de positieve x -as, laten we zeggen naar rechts, ondervindt.

- 4.1** Beredeneer wat de meest waarschijnlijke plaats is om het deeltje tegen te komen in de doos.

Antwoord

- 4.2** Neemt de kans dat het deeltje in de linkerhelft van de doos zit toe of af als we de temperatuur verhogen?

Antwoord

- 4.3** Wat is de potentiële energie behorende bij de boven beschreven kracht?

Antwoord

- 4.4** Beantwoord de vragen **4.1** en **4.2** opnieuw, nu met behulp van de Maxwell-Boltzmann distributiefunctie. Het is niet de bedoeling om hier integralen te gaan uitrekenen, maar om op grond van de eigenschappen van de Maxwell-Boltzmann distributiefunctie de antwoorden te vinden. Komen deze antwoorden overeen met je antwoorden bij **4.1** en **4.2**?

Antwoord

Nu beschouwen we een systeem waarin alle deeltjes een kracht ondervinden, namelijk de atmosferische wrijving. Op elk luchtdeeltje werkt de zwaartekracht. In de opgave Barometrische hoogte formule hebben we de druk als functie van de hoogte afgeleid. Dit kan ook met de Maxwell-Boltzmann distributiefunctie gedaan worden. Neem aan dat op hoogte $z = 0$ de deeltjesdichtheid gelijk is aan n_0 en de druk P_0 .

- 4.5 Wat is de deeltjesdichtheid als functie van de hoogte z ? En de druk?

Antwoord

5. Harmonisch kristal [5 pu]

We beschouwen eerst een harmonische oscillator in 1-dimensie. De energie is

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

- 5.1 Geef de Maxwell-Boltzmann verdeling om de oscillator te vinden in een toestand met impuls p en positie x . Normeer deze zodanig dat de totale kans gelijk is aan 1.

Antwoord

- 5.2 Bereken nu de gemiddelde kinetisch energie.

Antwoord

- 5.3 Idem voor de potentiële energie, en dan totale energie van de oscillator bij temperatuur T .

Antwoord

Stel een kristal is opgebouwd uit N atomen. Als model voor roostertrillingen in dit kristal beschouwen we nu de trillingen van ieder van de atomen als onafhankelijke drie dimensionale harmonische oscillatoren.

- 5.4 Welke uitdrukking kun je geven voor de interne energie als functie van de temperatuur?

Antwoord

- 5.5 Bepaal hieruit de soortelijke warmte C . Dit heet de wet van Dulong-Petit. Deze geeft de klassieke waarde van de soortelijke warmte. (De quantum effecten hierop zullen later aan de orde komen.)

Antwoord

Eenheden en constanten

eenheden

druk	pascal	$\text{Pa} = \text{Nm}^{-2}$
	bar	$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$
	millibar	$1 \text{ mbar} = 100 \text{ Pa}$
	atmosfeer	$1 \text{ atm} = 1.013 \cdot 10^5 \text{ Pa}$
temperatuur	Kelvin	$0 \text{ Celsius} = 273.15 \text{ K}$
warmte	calorie	$1 \text{ cal} = 4.190 \text{ J}$
	kilocalorie	$\text{kcal} = 1000 \text{ cal}$

fundamentele constanten

constante van Boltzmann	$k_B = 1.38054 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
absolute nulpunt :	$T_0 = -273.15 \text{ Celcius}$
getal van Avogadro	$N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ moleculen/mol}$
gasconstante	$R = 8.3144 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $= 0.082 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
De massadichtheid van	een aantal materialen is :
water :	$\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$
lucht :	1.2
beton :	2400
ijzer :	7860
lood :	11340

Literatuur

- [AF] M Alonso en E.J. Finn, *Physics*, Addison-Wesley Publishing Company, 1992.
 [H] A. Hobson, *Physics, Concept and Connections*, Prentice Hall, 1995.
 [R] F. Reif, *Statistical Physics*, Berkeley Physics course 5, McGraw-Hill 1965.