

氣體模型製作與探討

高中組物理科第三名

省立台南一中

作 者：梁森昌、郭青齡
李曜旭
指導教師：林水華

一、研究動機

目前對於氣體分子之處理，因其數量龐大，行爲繁雜，效應無法精確估計，故往往以臆測性的統計方法處理之。為了解決此困難，吾等乃構思利用電算機之模擬，製作出高效率模型，徹底解決氣體分子處理之困難，並廣泛地供需求者使用或研究。

二、研究目的

運用電算機高速之計算能力，配合古典力學，製作出一個理想或非理想氣體的單原子分子模型，作為吾人應用之工具。並利用其來測試壓力定律、密度分佈，配合數學分析，以求驗證此一工具之正確性及使用之實用性。

三、研究設備器材

使 用：IBM- PC XT Compatible

使用系統：MS - DOS

CPU：8088 & 8087

使用語言：TURBO PASCAL

四、研究過程

(一) 分子行爲之規定

根據古典力學，理想氣體分子之行徑即為直線前進，至於碰撞器壁後之下一點位置，可由參考資料(一)所示之修正項求得。

至於非理想分子之行徑，吾人考慮其引力所造成之效應。爲了增進微處理機計算之速率，吾等將 6 ~ 12 位能式化簡爲較簡單之函數組合；至於此引力修正項之大概內容，請參考參考資料（二）。

(二) 程式語言及轉移性 (Portable)

爲了軟體之高度轉移性，吾等利用目前微處理機中性能優越的 TURBO PASCAL 為主幹，外加三份可以改寫的計算用機器語言副程式，以及一份背景圖形檔案。

(三) 壓力定律之檢測

理想氣體之壓力定律可由下式

$$V^2 = \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 = \frac{d}{dt} \left(\vec{r} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \right) - \vec{r} \cdot \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$$

推導出 $\frac{3\bar{P}V}{m} = \overline{\sum_i V_i^2} + \overline{\frac{d}{dt} \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{V}_i}$

令 $\bar{f}' = \overline{\frac{d}{dt} \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{V}_i}$

其中：

修正項 f' 的理論恰等於 0，故此公式即成爲目前高中物理教材之理想氣體公式 $PV = nRT$ 的由來。

由於目前吾等所模擬之氣體分子即爲理想氣體，爲了檢測本模型之正確性，吾人令其繪出修正項 f' 在任意時刻下的表現的行爲，看其是否趨近於零，並經由此基本的檢測來驗證此模型之高度準確性。

五、實驗結果

(一) 壓力定律檢測之結果

經模擬結果，我們發現隨著紀錄時間之增長，在正常狀況下，修正項 f' 果然趨近於零，但是却仍有特例情形發生，所以 $PV = nRT$ 並不是真的管用。至於其原因，量子統計中有所討

論，此處不再贅述。

- (二)由電腦多次的統計中，可發現分子速度和分子數之關係有點類似馬克斯威爾的曲線，亦可知其分子在容器內的速度和分子數多少的關係。
- (三)在一般的預測中，總認為氣體分子出現在容器中心之機率大於其在容器邊緣機率，故推論在中心密度大於同圍密度。但經電腦的數據分析結果，竟然發現在中央之密度為略小，而在邊緣區密度反大，這是所發現的另一有趣現象。
- (四)碰撞頻率與分子密度、速度的關係，執行結果，果然碰撞頻率(f)與分子密度的關係為：(1) f 正比於分子密度。(2) f 正比於分子速度。但(2)項分子速度之平方即正比於溫度，故： f 經推導，亦可證明。(3) f 正比於溫度之平方根。

六、討 論

(一) $f : \sum_i r_i \cdot V_i$ 圖形之研究

當粒子數為 1 時，我們可以發現 f 即是該分子所在的位置 A 與 B 的距離 AB 乘以該粒子本身速度的值。由於粒子速率恒定，故 f 會呈線性增加或減少。直到其撞到另一邊器壁，此時 f 會突然變號，再重新呈線性效應：因此 f 圖形呈類似平行線的組合，並且相對於碰撞器壁之 f 函數坐標位置為不可微分形式。

可是當粒子增多時，即產生明顯的 f 值彼此抵消或建設性增加的效應。不幸地，由電腦模擬結果，發現和古典統計力學不同之點：因粒子密度愈高時，抵消效應並沒有完全將建設性效應抵消掉，故 f 雖對應於時間軸略成阻尼，然仍有極大之波動性，與一般所預測之：(因 $f \rightarrow 0$ ，所以 $f' \rightarrow 0$) 不相符合；故理論方面之正確性仍有待商榷。

(二) 密度分佈的理論性探討

一般認為真實氣體分子只要體積及分子力很小，就可以視為均勻分布、均向流動的理想氣體。

但是，果真如此，我們必可找到某一段時間，測量到容器中

的粒子均勻分佈；這種情形直到分子群中有粒子撞到器壁時才發生變化。此時，倘若欲維持均勻密度，那麼該粒子返回容器中部時，通過各不同半徑球型殼層的機率應該相等才對。

我們可以發現，任何限制反射角的方法，都會使部份殼層享受不到粒子通過的機會；於是我們假設該粒子反射角的隨機性。因此該粒子返回半徑爲 X 的殼層之機率即爲

$$\frac{\sin^{-1} \left(\frac{X}{R} \right)}{\frac{\pi}{2}}$$

$$\text{改變的密度便是 } \frac{\sin^{-1} \left(\frac{X}{R} \right)}{\pi^2 X}$$

這個數對任意 X 並非定值，顯然地隨著時間及機率差異的累積，終至明顯的密度分佈出現爲止。那麼，究竟無分子力、微體積的分子可否視爲理想氣體呢？吾等運用電算機模擬之結果，果然不可以！

其數學推導式，見參考資料(五)。

七、結論

(一)利用改變計算式的方式，吾人能將此模型推廣。

(二)各種應用及研究方向之建議：

1. 加上真實氣體的修正項後，能模擬開放系統的大氣現象、研究液一氣平衡相、探討布朗運動，推算亞佛加厥數、討論蒸氣壓及馬克斯威爾線、檢驗諸學者所提出之氣體方程式。
2. 利用位能曲線之常數項的改變，討論帶電粒子或星球間交互作用的情形。
3. 利用光子與理想氣體分子類似之特性，吾人可利用此模型來探討光的粒子模型之波動性。
4. 討論擴散、流體力學中的最微體積 δV 與密度的關係。
5. 改變容器的形狀，藉以研究流體力學諸定律。

6. 運用同樣的設計步驟，可以擴充此模型，使其能對難以統計的固態物理學有所帮助，或是用來研究量子力學中的低溫現象。
7. 據我們實驗的結果，發現密度分佈並不均勻，此與新近的量子統計中的 Bose - Einstein 統計或是古典的 Boltzmann - Maxwell 統計中所預測者皆不符合，顯示目前我們尚缺乏一門真正的理論式詮釋理想氣體的密度分配，這是值得大家注意的。

八、參考資料

(一) 令單位時間 Δt 內位移為 s ，粒子行進 K 時間 ($0 < k < 1$) 後，碰到器壁設

$$D = (a^2 + b^2 - k^2)$$

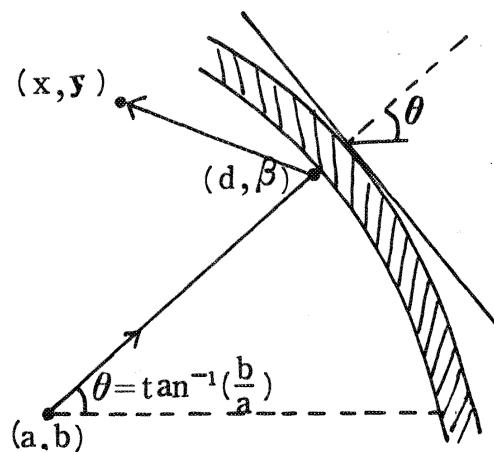
$$E = s^2$$

$$F = (a \cdot s \cdot \cos t + b \cdot s \cdot \sin t)$$

則 $\begin{cases} X = x + s \cdot \cos \theta' \cdot (1 - k) \\ Y = \beta + s \cdot \sin \theta' \cdot (1 - k) \end{cases}$

其中 θ' 為角度亂數

而 $k = \frac{-F + \sqrt{F^2 - E \cdot D}}{s^2}$



(二) 6-12位能線

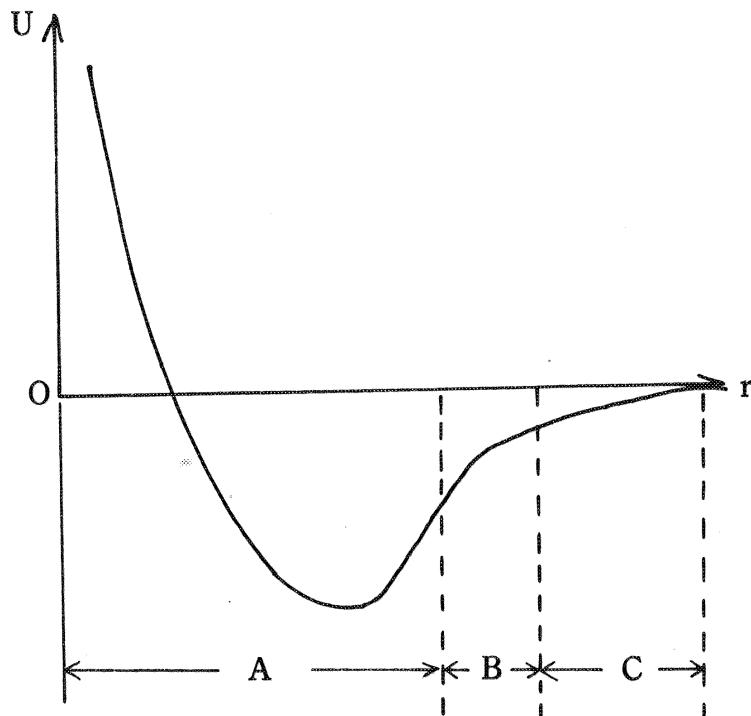
$$U = \frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}$$

利用 Least-Squares 法，各求出三個對應區間的目的函數：

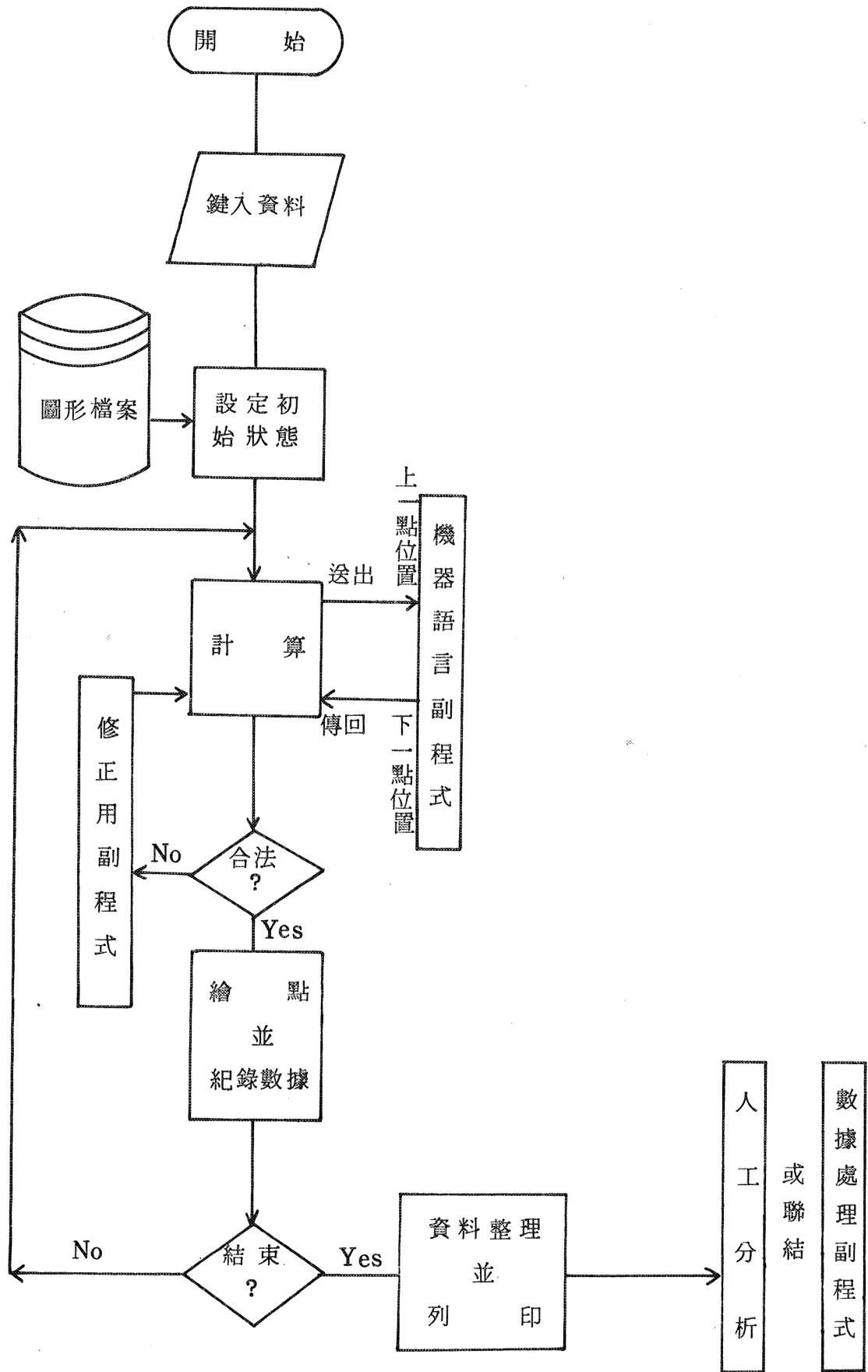
區間 A：拋物線

區間 BC：直線段

利用此三函數組合，求出任意位置之位能



(三)機器語言副程式：(請見次頁)



四參考書籍

1. 理論物理(五)，吳大猷，聯經出版社，68年5月
2. 實用電腦流程圖學，許靈翔，松崗電腦圖書資料有限公司
3. 大學物理學(二)，李恰嚴，東華書局，59年9月
4. 物理學(二) (Halliday Resnick)，王維農，71年12月
5. 物理化學實驗學，曹簡禹，黃定加，國立編譯館，正中書局
6. 物理化學，李敏達，三民書局，70年7月
7. TORBO PASCAL使用手册，陳學群譯，儒林圖書公司，73年10月
8. MICROSOFT MACRO ASSEMBLER MENUAL,
MULTITECH INDUSTRIAL CORPORATION

(五)密度分配問題的研究

A 為某一平面或定義 $n(t)$ 表 t 時內面積 A 之內的粒子總數

$$\text{定義密度 } d = \frac{1}{A} \lim_{t \rightarrow \infty} n(t) = \frac{1}{A} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_0^t n(t) \cdot dt}{t}$$

左式為電算機計算的方法，定義 $N_T(t)$ 為時間由 0 ~ T 內，在

$$A \text{ 內停留的時間為 } t \text{ 之粒子數密度 } d = \frac{1}{A} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sum N_T(t) \cdot t}{T}$$

因分子碰撞器壁之次數 f 與 n, T 成正比（已於前面證明成立）

$f \doteq n k T$ (k : 常數) 利用下法求半徑為 a 之圓盤內的密度

$D(a)$ ：時間自 0 ~ T 內，有 $n k T$ 個粒子自器壁反射，其中反

射角為 $\theta \pm \frac{d\theta}{2}$ 者，約有 $n k T \frac{d\theta}{\pi}$ 個，每個約在 A 內停留

$$\frac{2 \cdot \sqrt{a^2 - (r \cdot \sin \theta)^2}}{|V|}$$

$$D(a) = \frac{\sum N_T(t) \cdot t}{AT} = \frac{\frac{d\theta}{\pi} \cdot 2 \cdot \frac{\sqrt{a^2 - r^2 \sin^2 \theta}}{|V|}}{\pi a^2 \cdot T}$$

$$= \frac{4nk}{\pi^2 a^2} \int_0^{\sin^{-1} \frac{a}{r}} \sqrt{a^2 - r^2 \sin^2 \theta} d\theta$$

以 $r \cdot \sin \theta = at$ 代換之，得

$$\begin{aligned} D(a) &= \frac{4nk}{\pi^2 a^2} \int_0^1 \frac{\sqrt{a^2 - a^2 t^2} \cdot 2 dt}{r \sqrt{1 - (\frac{a}{r})^2 t^2}} \\ &= \frac{4\pi k}{\pi^2 r} \int_0^1 \frac{\sqrt{1 - t^2}}{1 - (\frac{a}{r})^2 t^2} dt \end{aligned}$$

半徑爲 a^2 極薄圓環上之密度

$$d(a) = \frac{D(a+da) \pi (a+da)^2 - D(a) \pi a^2}{2\pi a da}$$

$$= D(a) + \frac{a}{2} D'(a)$$

$$d(a) = \frac{2\pi k}{\pi^2 r} \int_0^1 \sqrt{\frac{1-t^2}{1 - (\frac{a}{r})^2 t^2}} \cdot \frac{2 - (\frac{a}{r})^2 t^2}{1 - (\frac{a}{r})^2 t^2}$$

此爲橢圓積分，但可算出 $d(0) = \frac{4\pi k}{\pi^2 r}$ $d(r) = \infty$

式子成立之條件：
 ① $f = nkT$ 成立
 ② 反彈角度爲 θ 者有 $nkT \cdot \frac{d\theta}{\pi} \cdot 2$ 成立

故 T 及 n 宜大

當 $|V|$ 甚大時，(附表2)之修正項將產生極大誤差

令 $\frac{\int_0^t n(t) dt}{t}$ 不準

當 $|V|$ 太小時 f 將極小， $f = nkT$ 之假設不能成立，調整適當之速度，計算模型之密度，紀錄 f 值，果然模擬結果所得的圖

線與 $d(a) = \frac{4f}{\pi^2 r} \cdot \int_0^1 \sqrt{\frac{1-t^2}{1-(\frac{a}{r})^2 t^2}} \cdot \frac{2 - (\frac{a}{r})^2 t^2}{1 - (\frac{a}{r})^2 t^2} dt$

之曲線幾乎完全重合。

評語：從原子觀點，以電腦模擬實驗研究理想氣體之狀態。以高中學生程度而言，構想相當新穎，並且從作品內容顯示，部份作者對物理及數學的瞭解已超越一般高中生之程度甚多。惟本作品涉及之間題相當深奧，致作者在分析方面，難免有疏漏不周及錯誤之處，此為本作品之一項缺失。