

Fizica moleculara cu soft specializat (curs si aplicatii pentru seminar si laborator)

- Lectii prezentate de Eugen Scarlat la Facultatea de Stiinte Aplicate, an I –

In paralel: "Termodinamica".

Urmeaza: "Fizica statistica".

Introducere (~1/2 ora)

- Sistem de notare: (minimum 50 de puncte pentru promovare)

EXAMEN FINAL DE SEMESTRU		50 puncte
ACTIVITATE LA LABORATOR		20 puncte
VERIFICARE PE PARCURS	EXAMEN PARTIAL (sapt. 6)	15 puncte
	ALTE ACTIVITATI (seminar, teme de casa ⁸)	15 puncte
T O T A L		100 puncte

* se poate acorda bonus de 10 puncte pentru tema de casa

- Informatie si cunostinte. Memorarea, intelegerea si creatia pentru invatare, cercetare si inovare.
- Fizica, stiinta a naturii. Sistemul fizic. Nivelul de caracterizare a sistemului (exemple).
Sisteme echivalente ("egale", "identice").
- Cauzalitatea fenomenelor. Conceptia atomista si conceptia holistica.
- Observatia, experimentul, modelul teoretic (simplificat) al realitatii.
- Masuratoarea, element fundamental al cunoasterii realitatii. Procesul de masurare si caracteristicile acestuia (precizia si reproductibilitatea). Timpul de masurare.
- Informatia ca expresie a incertitudinii producerii unui eveniment. Masuratoarea si informatia.

Tema: Sistemul international de unitati.

- Evolutia fizicii; tendinte viitoare.

Tema: Marea teorie unificata.

1/ Structura materiei (1 + 1/2 ore)

- Energie si materie. Masa de repaus. Unificarea conceptelor "energie" si "materie".
- Obiectul fizicii moleculare. Sisteme cu multe elemente. Scara macroscopica si scara microscopica. Explicatia microscopica a fenomenelor macroscopice. Caracterizarea macro- si microscopica.
- Molecula. Unitatea atomica de masa. Mol. Legea lui Avogadro.
- Sisteme fizice finite; frontiera; complementara sistemului.

Tema: Diametrul Universului, ca sistem finit.

- Tipuri de contacte (mecanic, termic, electromagnetic, chimic). Fluxuri. Ecuatia fundamentala a termodinamicii (revizie).

Aplicatii 1: Scara moleculara (dimensiune, masa, impuls). Electron-voltul, ca unitate de masura adecvata la scara moleculara. Amestecuri si compozitii masice, volumice, molare.

2/ Agitatie termica si temperatura (4 ore)

<http://www.colorado.edu/physics/2000/bec/temperature.html>

- O molecula: energia cinetica si impulsul moleculei (model mental). Traectoria. Valoarea medie temporala <http://www.phy.ntnu.edu.tw/ntnujava/viewtopic.php?t=41>
- "Haosul" in sens brownian.
- Mai multe molecule: valoarea medie statistica.
http://www.colorado.edu/physics/2000/bec/evap_cool.html
- Ipoteza ergodica (v. si aplicatia 2).
- Fluctuatii (abateri de la valoarea medie).

Tema: Caracteristicile zgomotului brownian.

- Echilibrul termic. Principiul "zero" si temperatura "empirica".
Masurarea temperaturii: punctele fixe, etalonarea. Scale liniare, gradul.

Tema: Tipuri de termometre si domeniile de masura.

- Temperatura in interpretare microscopica. Constanta de etalonare a lui Boltzmann.

Tema: Scale de temperatura si relatii de conversie.

- Sisteme de particule: microstari compatibile cu o macrostare.
- Fluxuri constante. Stationaritate.
- Evolutia spre echilibru.
- Relaxarea si timpul de relaxare.
- Distributia dupa energie. Factorul Boltzmann.
http://www.colorado.edu/physics/2000/bec/what_is_it.html
- Echipartitia energiei.
- Gaze ideale. Energia internă; ecuatia calorica de stare. Gaze moleculare.

Tema: Gaze electronice si fotonice.

Aplicatia 2 (frecvente de aparitie, probabilitate, distributie, ipoteza ergodica): Masuram experimental lungimea degetelor aratatoare cu precizie de a/ 1cm, b/ 5mm si c/ 1mm. Notam frecventele de aparitie. Reprezentam masuratorile in timp (pp ca fiecare masuratoare dureaza acelasi timp), apoi reprezentam histogramele obtinute. Pentru multe masuratori, distributia tinde catre una gaussiana. Accent pe concluziile a/ media temporala este egala cu media statistica si b/ fluctuatiile mai mari sunt mai improbabile.

3/ Interactia inter-moleculara (4 ore)

- Interactia la distanta mica: ciocniri. Sectiunea de ciocnire, drumul liber mijlociu, rata ciocnirilor.
Modelul ciocnirilor perfect elastice; "raza clasica" a particulei r ; densitatea volumica de particule n .
Sectiunea geometrica, frecventa ciocnirilor, drumul liber mijlociu:

Tema: Plasma.

- Interactia la distanta mare: campuri. Tipuri de potentiale; distanta de echilibru. Consecinte asupra starii de agregare.
- Rotatia si vibratia moleculelor. Masuratori spectroscopice ale nivelelor rotationale si vibrationale.

Aplicatia 3: Gaze ideale la presiuni joase. Valori numerice ale a/ "razei clasice a moleculei, b/ sectiunii geometrice de ciocnire. Evenimente si probabilitati de realizare; evenimente compuse de tip "si", respectiv "sau" (exemple cu un zar, doua zaruri).

Aplicatia 4: Lumina ca radiatie electromagnetica; dispersia. Recunoasterea nivelelor electronice, vibrationale si rotationale prin masurari spectroscopice. Efectul Raman, efectul Doppler.

4/ Teoria cinetico-moleculara simplificata (4 ore)

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/kinetic/ktcon.html#c1>

- Presiunea. Formula fundamentala a teoriei cinetico-moleculara. Ecuatia termica de stare (I).
- Distributia in camp gravitational (Boltzmann). Distributia in campuri externe.

Tema: Atmosfera Pamantului (structura dupa altitudine).

- Distributia dupa viteze, la echilibru termic, in absenta campului extern (Maxwell). Experimentul lui Stern. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/kinetic/kintem.html#c3>
- Distributii mixte Maxwell-Boltzmann.
- Echipartitia energiei (III).

Tema: Pompe de vid.

Aplicatia 5: Formula barometrica. Influenta variatiilor de temperatura asupra distributiei Boltzmann (calcul iterativ cu ecuatii cuplate). Fractiunea de molecule dintr-un anumit domeniu spatial. Determinarea numarului lui Avogadro din experimentul lui Perrin. Fluctuatia numarului de particule din interiorul unei fractiuni din volumul total ocupat de gaz, in absenta campului exterior (distributie spatiala uniforma).

Aplicatia 6: Simularea unor rezultate numerice obtinute din experimentul lui Stern. Histograma rezultatelor. Calculul vitezei medii su determinarea vitezei celei mai probabile
<http://www.chm.davidson.edu/ChemistryApplets/KineticMolecularTheory/Maxwell.html> aici distributia Maxwell este "incompleta" pentru ca sunt **putine** molecule!

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/kinetic/kintem.html#c4>.

Determinarea expresiei analitice a distributiei Maxwell corespunzatoare distributiei experimentale. Energia cinetica cea mai probabila. Fractiunea de molecule dintr-un anumit interval energetic. Viteza sunetului in atmosfera si refractia undelor sonore. Efuzia moleculara.

Examen partial (2 ore)

- Elemente de teorie, fara material bibliografic auxiliar (30 min):
- Aplicatii, cu material bibliografic auxiliar (70 min).

5/ Sisteme reale (2 ore)

- Izotermele Andrews.
Starea critica. Temperatura critica.
Temperaturile critice ale unor substante
- Gaze reale. Ecuatii termice de stare pentru gaze reale (II).
Ecuatia Van der Waals.

- Fenomene superficiale. Capilaritate.
Stratul superficial.
Energia potentiala superficiala.
Legea lui Jurin.

Aplicatia 7: Studii comparative de compresibilitate gaz ideal – gaz Van der Waals. Formarea picaturilor; inaltimea ascensionala, unghiul de racordare.

6/ Ordine si dezordine (4 ore)

- Energia “ordonata” si energia “dezordonata” – problema fundamentala a energeticii in societate.
- Lucrul mecanic si caldura.

Tema: Metode de conversie si utilizare a energiei solare.

- Entropia termodinamica (revizie). Interpretarea statistica a entropiei.

Tema: Entropia ca masura a informatiei.

Aplicatia 8: Exemple simple cu cateva particule repartizate pe nivele energetice; calculul probabilitatilor de realizare a microstarilor entropiei. Adresa de internet pentru multe particule (radacina: quantum.edu). Variatia entropiei in procese ireversibile cunoscute. Variatia entropiei sistemului compus.

- Sisteme biologice vii
- Doua legi contradictorii: a/ legea cresterii entropiei; b/ legea evolutiei spre complexitate (totusi, locala).
- Sisteme in dezechilibru stationar. Fluxuri “input” si fluxuri “output”: adaptarea.
- Variatia entropiei in interiorul sistemelor vii si in restul lumii
- “Legea” incetarii cresterii entropiei.

Tema: Evolutia Universului.

7/ Fenomene de transport (4 ore)

- Legi de conservare si teoreme de continuitate.
- Legile generale ale fenomenelor de transport.
- Difuzia masica si difuzia particulelor.
- Difuzia caldurii.
- Ecuatia caldurii. Solutia ecuatiei caldurii. Unde termice: atenuarea si difuzia. Adancimea de patrundere si viteza de difuzie.

Tema: Comparatie intre difuzia termica si propagarea undelor elastice.

Tema: Metode de masura bazate pe efectul termic.

- Elemente de dinamica fluidelor. Curgerea fluidelor.
Frecarea interna. Coeficientul de viscozitate. Transportul impulsului.
- Distributia vitezelor in curgerea cu viscozitate.
- Legea lui Poisseuille.

Aplicatia 9: Dimensionarea radiatoarelor termice. Rezistenta termica. Dimensionarea adancimii de ingropare a conductelor; calculul adancimii pivnitelor. “Circuite” termice. Temperatura de contact.

Aplicatia 10: Calculul coeficientului de viscozitatii la fluide. Calcul de debite. Rezistenta hidrodinamica. Scheme simple de "circuite" de instalatii.

9) Clustere moleculare (2 ore)

- Molecula de apa.
Structura si proprietatile speciale ale apei.
- Clustere de tip "fulerene" (<http://www.chem.sunysb.edu/msl/fullerene.html>).
- Carbonul si structurile sale moleculare.

Tema: Nano-tuburi de carbon.

Aplicatia 11: Anomaliile apei (<http://www.lsbu.ac.uk/water/anmlies.html>).

Aplicatia 12: Fulerene (<http://www.seed.slb.com/en/scictr/watch/fullerenes/prize.htm>)

10) Moleculele in solide (2 ore)

- Cristale. Tipuri de simetrii.
- Defecte in cristale.
- Cristale lichide.

Tema: Structuri fractale.

Tema: Aplicatii ale cristalelor lichide.

Aplicatia 13: Fenomene simple in cristale semiconductoare.

Sustinerea temelor de casa (prezentare orală, cu suport electronic).

Examen final (3 ore)

- Elemente de teorie, fara material bibliografic auxiliar (40 min):
- Aplicatii, cu material bibliografic auxiliar (140 min):

Bibliografie recomandata

1. J. H. Perez, A. M. Romulus, *Termodinamique*, Ed. Masson, Paris, 1993.
2. R. Resnik, D Halliday, *Fizica*, vol.1, Ed. Didactica si Pedagogica, 1976.
3. E. Kitaigorodsky, *Introduction to Physics*, Mir, Moscow, 1981.
4. F. Reif, *Fizica statistica*, Cursul de Fizica Berkeley, Ed. Didactica si Pedagogica, Bucuresti, 1983.
5. N. N. Puscas, *Fizica I*, Editura MAN-DELY, Bucuresti, 2003.
6. C. P. Cristescu, E. Scarlat, *Sisteme de particule si sisteme termodinamice*, Ed. Conphys, Rm. Vâlcea, 1999. G.
7. S. Titeica, *Termodinamica*, Ed, Academiei, 1984.
8. G. Moisil, *Termodinamica*, Ed. Academiei, 1980.

Obs. In afara de ceea ce este prezentat aici, mai dispunem de soft specializat de simulare si aplicatii, care sunt operationale la laborator si la seminar.