

# Компьютерные методы для решения задач по молекулярной физике. Распределение Максвелла

*Цели работы:*

- изучение функции распределения Максвелла, построение графика функции распределения;
- вычисление средней, среднеквадратичной и наиболее вероятной скоростей, вычисление доли молекул, имеющих заданный интервал скоростей;
- сравнение полученных результатов с теоретическими данными;
- повторение методов вычислений на примерах решения задач, наиболее часто встречающихся в молекулярной физике

## Теоретические сведения

### Закон распределения молекул по скоростям Максвелла

Закон распределения молекул по скоростям Максвелла описывает стационарное распределение скоростей молекул однородного идеального газа в условиях термодинамического равновесия и отсутствия внешнего силового поля. Максвелловское распределение молекул по скоростям устанавливается в результате взаимных столкновений между молекулами при их хаотическом тепловом движении. Выражение функции было впервые получено Максвеллом в 1860 г. с помощью методов теории вероятности. Позднее Л. Больцман и Д. Гиббс дали более строгое обоснование полученного Максвеллом вывода.

Распределение молекул по абсолютным значениям скоростей подчиняются функции распределения:

$$f(V) = 4 \pi V^2 \left( \frac{M}{2\pi R T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{M \cdot V^2}{2RT}},$$

где  $V$  – абсолютное значение скорости молекулы;  $M$  – молярная масса;  $T$  – абсолютная температура;  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Доля молекул газа  $\Delta n$  со скоростями в интервале от  $V$  до  $V + \Delta V$  численно равна площади  $\Delta S$  под кривой функции распределения или интегралу

$$\frac{\Delta n}{n} = \int_V^{V+\Delta V} f(V) dV .$$

Средняя скорость молекул газа вычисляется по формуле

$$V_{\text{cp}} = \int_0^{\infty} V f(V) dV .$$

Средняя квадратичная скорость молекул газа вычисляется по формуле

$$V_{\text{КВ}} = \sqrt{\int_0^{\infty} V^2 f(V) dV}.$$

Наиболее вероятной называется скорость, при которой функция распределения имеет максимум.

### Вопросы для допуска

1. Опишите способы построения графиков функций.
2. Опишите численные методы вычисления определенных интегралов.
3. Приведите алгоритм нахождения экстремумов функции.
4. С какими скоростями движутся молекулы в газах (интервал скоростей)?
5. Каким образом можно вычислить среднюю, среднюю квадратичную и наиболее вероятную скорости?
6. Как вычислить долю молекул, движущихся в заданном интервале скоростей?

### Порядок выполнения работы

**Задание 1.** Составить программу и построить функции распределения Максвелла при различных температурах ( $T = 300 \text{ К}$ ,  $T = 500 \text{ К}$  и  $T = 1500 \text{ К}$ ). Проанализируйте, как изменится график при увеличении температуры.

Вариант 1.	$M = 0,002 \text{ кг/моль}$	(водород)
Вариант 2.	$M = 0,070 \text{ кг/моль}$	(хлор)
Вариант 3.	$M = 0,032 \text{ кг/моль}$	(кислород)
Вариант 4.	$M = 0,004 \text{ кг/моль}$	(гелий)
Вариант 5.	$M = 0,020 \text{ кг/моль}$	(неон)
Вариант 6.	$M = 0,040 \text{ кг/моль}$	(аргон)
Вариант 7.	$M = 0,028 \text{ кг/моль}$	(азот)
Вариант 8.	$M = 0,084 \text{ кг/моль}$	(криптон)
Вариант 9.	$M = 0,019 \text{ кг/моль}$	(фтор)
Вариант 10.	$M = 0,016 \text{ кг/моль}$	(метан)

Вариант 11.  $M = 0,222$  кг/моль (радон)

Вариант 12.  $M = 0,044$  кг/моль (углекислый газ)

**Задание 2.** С помощью компьютерных вычислений показать, чему равна общая площадь, ограниченная осью абсцисс и графиком функции распределения Максвелла.

**Задание 3.** Вычислить среднюю, среднюю квадратичную и наиболее вероятную скорости при различных температурах. Результаты вычислений занести в таблицу. Проанализировать полученные результаты и сравнить их с теоретическими формулами для вычисления указанных скоростей. Результаты занести в табл. 4.1.

Таблица 4.1

T, К	$V_{\text{ср}}, \text{ м/с}$	$\frac{V_{\text{ср}}^2 M}{RT}$	$V_{\text{кв}}, \text{ м/с}$	$\frac{V_{\text{кв}}^2 M}{RT}$	$V_{\text{вер}}, \text{ м/с}$	$\frac{V_{\text{вер}}^2 M}{RT}$
300						
500						
1500						

**Задание 4.** Вычислить, какой процент молекул обладает скоростями, отличающимися от наиболее вероятной не более чем на 10 %, 20 %, 50 %. Результаты вычислений занести в таблицу. Результаты занести в табл. 4.2.

Таблица 4.2

%	T, К	300	500	1500
10	$\frac{\Delta n}{n} \cdot 100 \%$			
	$0,2 V_{\text{вер}} \cdot f_{\text{max}} \cdot 100 \%$			
20	$\frac{\Delta n}{n} \cdot 100 \%$			
	$0,4 V_{\text{вер}} \cdot f_{\text{max}} \cdot 100 \%$			
50	$\frac{\Delta n}{n} \cdot 100 \%$			
	$V_{\text{вер}} \cdot f_{\text{max}} \cdot 100 \%$			