2 0 1 9 г № 2 4
Т р у д ы Ф О Р А

СТАТИСТИЧЕСКИЙ ПРОФИЛЬ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ ПО ЭНЕРГИИ

И.Н. Жукова, М.В. Ершова

Адыгейский государственный университет, г. Майкоп

На основе распределения молекул по модулю скорости для трехмерного газа рассмотрены распределения молекул по кинетической энергии и по относительной кинетической энергии. Для этих указанных распределений вычислены основные статистические характеристики и проведен подробный их анализ.

В работе [1] обсуждались статистические характеристики распределения Максвелла молекул по модулю скорости

$$f(v)=\frac{dP(v)}{dv}=4\pi\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}}v^2e^{-\frac{mv^2}{2kT}}, \tag{1}$$

которое можно записать иначе с помощью параметра $\sigma_0=\sqrt{\frac{\mathrm{kT}}{\mathrm{m}}}$ следующим образом:

$$f(v)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\cdot\frac{v^2}{\sigma_0^3}\cdot e^{-\frac{v^2}{2\sigma_0^2}}. \tag{1a}$$

Получим с помощью функции распределения молекул по модулю скорости $f(v)=\frac{dn}{ndv}$ (формула (1)) функцию распределения молекул классического идеального газа по энергиям $\mathrm{f}(\varepsilon)=\frac{d\mathrm{n}}{nd\varepsilon}$:

$$\mathrm{f}(\varepsilon)d\varepsilon=\mathrm{f}(v)dv \Rightarrow \mathrm{f}(\varepsilon)=\mathrm{f}(v)\cdot\frac{dv}{d\varepsilon}.$$

$$\varepsilon=\frac{\mathrm{mv}^2}{2} \Rightarrow v=\sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}} \Rightarrow \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\varepsilon}=\sqrt{\frac{2}{m}}\cdot\left(\frac{1}{2}\right)\varepsilon^{-\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{1}{2\mathrm{m}\varepsilon}}.$$

Тогда $\mathrm{f}(\varepsilon)=\mathrm{f}(v)\cdot\frac{dv}{d\varepsilon}=\mathrm{f}(v)\cdot\frac{1}{\sqrt{2m\varepsilon}}$. Подставляя в полученное выражение функцию распределения по скоростям (1) и, заменяя скорость на энергию, с помощью их функциональной связи $v=\sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}$, получаем распределение молекул трехмерного газа по их кинетическим энергиям:

$$f(\varepsilon)=\frac{dn}{\mathrm{n}d\varepsilon}=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(kT)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\varepsilon}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}. \tag{2}$$

Найдем для полученного распределения (2) основные характеристики: наиболее вероятное значение кинетической энергии $\varepsilon_в$, среднюю энергию $\langle\varepsilon\rangle$, дисперсию энергии $\mathrm{D}[\varepsilon]$, коэффициенты асимметрии A и эксцесса E.

1. Наиболее вероятное значение энергии найдем из условия экстремума:
$\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}=0 \Rightarrow \frac{2}{\sqrt{\pi}}(kT)^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}\left(\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}}-\sqrt{\varepsilon}\frac{1}{kT}\right)=0$, отсюда получаем:

$$\varepsilon_{в}=\frac{kT}{2}. \tag{3}$$

2. Среднее значение кинетической энергии находим по формуле:

$$\langle\varepsilon\rangle=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(kT)^{\frac{3}{2}}}\int_0^{+\infty}\varepsilon\sqrt{\varepsilon}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}\mathrm{d}\varepsilon=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(kT)^{\frac{3}{2}}}\cdot(-kT)\int_0^{+\infty}\varepsilon^{\frac{3}{2}}\mathrm{d}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}=$$

$$=-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(kT)^{\frac{1}{2}}}\cdot\left\{\varepsilon^{\frac{3}{2}}\cdot e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{+\infty}\frac{3}{2}\varepsilon^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}d\varepsilon\right\}=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{3(kT)^{\frac{3}{2}}}{(kT)^{\frac{1}{2}}}\int_0^{+\infty}\varepsilon^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}d\varepsilon=([2])=\frac{3}{2}\mathrm{kT}.$$

Таким образом,

$$\langle\varepsilon\rangle=\frac{3}{2}\mathrm{kT}. \tag{4}$$

3. Среднеквадратичное значение скорости найдем по формуле:

$$\left\langle\varepsilon^2\right\rangle=\int_0^{+\infty}\varepsilon^2\mathrm{f}(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(kT)^{\frac{3}{2}}}\cdot\int_0^{+\infty}\varepsilon^2\sqrt{\varepsilon}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}dv=([2])=\frac{15}{4}(kT)^2,$$

$$\varepsilon_{кв}=\sqrt{\left\langle\varepsilon^2\right\rangle}=kT\sqrt{\frac{15}{4}}=kT\frac{\sqrt{15}}{2}. \tag{5}$$

4. Дисперсию кинетической энергии найдем по формуле [3]:

$$\mathrm{D}[\varepsilon]=\left\langle\varepsilon^2\right\rangle-\langle\varepsilon\rangle^2=\frac{15}{4}(\mathrm{kT})^2-\left(\frac{3}{2}\cdot kT\right)^2=\frac{3}{2}(\mathrm{kT})^2. \tag{6}$$

5. Стандартное отклонение найдем по связи с дисперсией [3]:

$$\sigma=\sqrt{\mathrm{D}[\varepsilon]}=\sqrt{\frac{3}{2}(\mathrm{kT})^2}=\sqrt{\frac{3}{2}}\cdot(\mathrm{kT}). \tag{7}$$

Оценим значение стандартного отклонения для кинетической энергии молекул идеального газа при T=300K: $\sigma=5{,}1\cdot10^{-21}\,Дж=32\,мэВ$.

6. Вычислим коэффициент асимметрии для распределения молекул по кинетическим энергиям:

$$A=\frac{\mu_3}{\sigma^3}, \tag{8}$$

третий момент распределения равен $\mu_3=\int_0^{\infty}(\varepsilon-\langle\varepsilon\rangle)^3 f(\varepsilon)d\varepsilon$.

Вычислим значения встречающихся в этом выражении интегралов:

$$\int_0^{\infty}\varepsilon^4 f(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{945}{16}(\mathrm{kT})^4,$$

$$\int_0^{\infty}\varepsilon^3 f(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{105}{8}(kT)^3,$$

$$\int_0^{\infty}\varepsilon^2 f(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{15}{4}(kT)^2,$$

$$\int_0^\infty \varepsilon f(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{3}{2}(kT).$$

Подставляя перечисленные интегралы в выражение для третьего момента распределения μ_3, находим его значение:

$$\mu_3 = 3(\mathrm{kT})^3. \tag{9}$$

Тогда коэффициент асимметрии с учетом выражения для стандартного отклонения (7) принимает вид:

$$A = \frac{\mu_3}{\sigma^3} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1{,}63\ . \tag{10}$$

7. Вычислим коэффициент эксцесса для распределения молекул по кинетической энергии:

$$E = \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3. \tag{11}$$

Четвертый момент распределения μ_4 вычислим по формуле [1, 3]:

$$\mu_4 = \int_0^\infty (\varepsilon - \langle\varepsilon\rangle)^4 f(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^\infty \left(\varepsilon^4 - 4\varepsilon^3\langle\varepsilon\rangle + 6\varepsilon^2\langle\varepsilon\rangle^2 - 4\varepsilon\langle\varepsilon\rangle^3 + \langle\varepsilon\rangle^4\right) f(\varepsilon)d\varepsilon =$$

$$= \int_0^\infty \varepsilon^4 f(\varepsilon)d\varepsilon - 4\langle\varepsilon\rangle\int_0^\infty \varepsilon^3 f(\varepsilon)d\varepsilon + 6\langle\varepsilon\rangle^2\int_0^\infty \varepsilon^2 f(\varepsilon)d\varepsilon - 4\langle\varepsilon\rangle^3\int_0^\infty \varepsilon f(\varepsilon)d\varepsilon + \langle\varepsilon\rangle^4\int_0^\infty f(\varepsilon)d\varepsilon.$$

Окончательно четвертый момент распределения μ_4 имеет вид:

$$\mu_4 = \frac{63}{4}(\mathrm{kT})^4, \tag{12}$$

тогда коэффициент эксцесса с учетом выражения для стандартного отклонения σ (7) принимает вид:

$$E = \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3 = 4\ . \tag{13}$$

Распределение молекул по энергиям зависит только от произведения kT и характеризуется одним параметром - стандартным отклонением σ (формула (7)).

Перепишем распределение молекул по кинетической энергии (2) через σ (7):

$$f(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(kT)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\varepsilon}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(\sigma)^{\frac{3}{2}}}\cdot\left(\frac{3}{2}\right)^{3/4}\sqrt{\varepsilon}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}. \tag{14}$$

При переходе к относительной энергии $\mathrm{U} = \dfrac{\varepsilon}{\varepsilon_в}$ получим универсальную функцию, не зависящую от температуры $f(\mathrm{U})$:

$$f(\mathrm{U}) = \frac{dn}{ndU} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot\sqrt{U}\cdot e^{-\frac{U}{2}}. \tag{15}$$

Найдем для полученного распределения (15) среднее значение относительной энергии $\langle\mathrm{U}\rangle$, дисперсию $\mathrm{D}[\mathrm{U}]$ и стандартное отклонение σ.

$$\langle\mathrm{U}\rangle = \int_0^\infty Uf(U)dU = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\cdot\int_0^\infty U^{\frac{3}{2}}de^{-\frac{U}{2}} =$$

$$= -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left\{U^{\frac{3}{2}}\cdot e^{-\frac{U}{2}}\Big|_0^\infty - \int_0^{+\infty}\frac{3}{2}U^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{U}{2}}dU\right\} = ([2]) = 3, \quad \langle\mathrm{U}\rangle = 3\ . \tag{16}$$

Аналогично находим среднее значение квадрата относительной энергии:

$$\langle\mathrm{U}^2\rangle = \int_0^\infty U^2 f(U)dU = 15\ .$$

Дисперсия распределения (15) равна:

$$D[U] = \langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 = 15 - 3^2 = 6\,. \qquad (17)$$

Вычисленные статистические характеристики функций $f(\varepsilon)$ и $f(U)$ приведем в таблице 1:

Таблица 1

Вид распределения	$x_в$	$\langle x \rangle$	$D[x]$	σ	A	E
$f(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(kT)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}$	$\frac{kT}{2}$	$\frac{3}{2}kT$	$\frac{3}{2}(kT)^2$	$\sqrt{\frac{3}{2}} \cdot (kT)$	$\sqrt{\frac{8}{3}} = 1{,}63$	4
$f(U) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{U} e^{-\frac{U}{2}}$	1	3	6	2,4	1,63	4

Приведем основные характеристики распределения молекул по относительным скоростям $f(u)$, полученные в [1]:

Таблица 2

Вид распределения	$x_в$	$\langle x \rangle$	$D[x]$	σ	A	E
$f(u) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} u^2 e^{-u^2}$	1	$\frac{2}{\sqrt{\pi}} = 1{,}1$	$\frac{3\pi - 8}{2\pi} = 0{,}23$	0,48	0,49	0,11

На рисунке 15 представлены графики функций $f(u) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} u^2 e^{-u^2}$ и $f(U)$ (15).

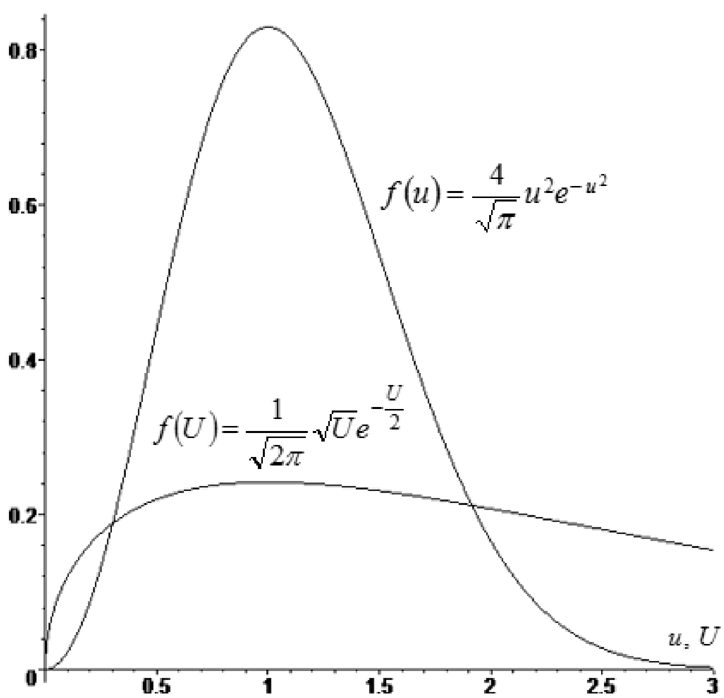

Рис.1. Графики функций распределений молекул по относительной скорости $f(u)$ и по относительной энергии $f(U)$.

Как видно из таблиц 1 и 2 и графиков, приведенных на рисунке 1, функции $f(\mathrm{u})$ и $f(\mathrm{U})$ имеют максимум в точке с числовым значением 1. Хорошо видно, что распределение по энергии $\mathrm{f}(\mathrm{U})$ самое асимметричное. Для распределения $\mathrm{f}(\mathrm{U})$ коэффициент эксцесса равен 4, но его «островершинность» на рисунке 1 не проявилась, так как дисперсия распределения $f(\mathrm{U})$ значительно превышает дисперсию распределения $f(\mathrm{u})$.

Литература

1. *Жукова И.Н., Ершова М.В.* Статистический анализ распределений молекул газа по скоростям// Труды физического общества республики Адыгея. – 2017, № 22, С.18-22 (http://fora.adygnet.ru)
2. *Иродов И.Е.* Задачи по общей физике. – М.: Наука, гл.ред.физ.-мат.лит., 1979. – 369 с.
3. *Кобзарь А.И.* Прикладная математическая статистика: для инженеров и научных работников. – М.: Физматлит, 2006. – 816 с.

Statistical shape of the energy distribution of molecules

I.N. Zhukova, M.V. Yershova

Based on the distribution of molecules by the velocity modulus for a three-dimensional gas, the distributions of molecules by kinetic energy and relative kinetic energy are considered. For these specified distributions, the main statistical characteristics are calculated and their detailed analysis is carried out.

