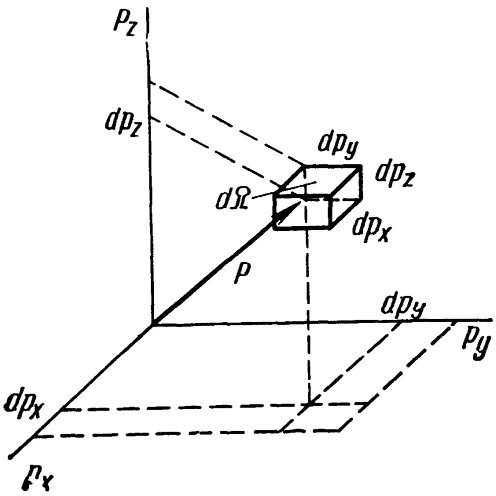
Maxwell-eloszlás (impulzus eloszlás)



Ábra 1: Impulzus tér

Impulzus-vektor $\vec{\mathbf{p}}(p_x, p_y, p_z)$:

$$\vec{\mathbf{p}} = m_0 \vec{\mathbf{v}}.$$

A megállapítandó mennyiség: az impulzus valószínűség- változó eloszlása (dW_p funkció) ill. a sűrűségfüggvénye (w_p)

$$dW_p = w_p d\Omega,$$

ahol

$$d\Omega = dp_x dp_y dp_z$$

az impulzustér elemi térfogat. dW_p a valószínűsége annak, hogy egy molekula (részecske) impulzusvektorának vége beletalál a $d\Omega$ elemi kockába.

<u>Feltételek:</u>

1) minden irány az impulzus térben egyenjogú (nincs preferált irány) – izotróp tulajdonság;
2) impulzus vektor komponensei függetlennek egy mástól

Vegyük a p_x komponenst.

$$dW_{p_x} = w_{p_x} dp_x$$

Az izotróp tulajdonság miatt (p_x és $-p_x$ egyenjogúak), w_{px} a p_x^2 függvénye:

$$w_{p_x} = \varphi\left(p_x^2\right)$$

és analóg módon

$$w_{p_y} = \varphi\left(p_y^2\right), \quad w_{p_y} = \varphi\left(p_y^2\right),$$

ahol φ egyelőre ismeretlen funkció.

Annak köszönhetően, hogy p_i ($i = x,y,z$) komponensek páronként függetlenek,

$$w_p d\Omega = w_{p_x} dp_x \cdot w_{p_y} dp_y \cdot w_{p_z} dp_z = \varphi\left(p_x^2\right) \cdot \varphi\left(p_x^2\right) \cdot \varphi\left(p_x^2\right) dp_x dp_y dp_z$$

vagy

$$w_p = \varphi\left(p_x^2\right)\cdot\varphi\left(p_x^2\right)\cdot\varphi\left(p_x^2\right).$$

Mivel a w_p sűrűségfüggvény nem függhet az impulzus irányától (izotrópia tulajdonság), hanem csak a nagyságától:

$$w_p = \psi\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right),$$

ahol ψ még egy meghatározandó funkció

$$\psi\left(p^2\right) = \varphi\left(p_x^2\right)\cdot\varphi\left(p_y^2\right)\cdot\varphi\left(p_z^2\right).$$

Logaritmáljuk a fenti képletet:

$$\ln\psi = \ln\varphi\left(p_x^2\right) + \ln\varphi\left(p_y^2\right) + \ln\varphi\left(p_z^2\right)$$

és majd deriváljuk, például, p_x szerint:

$$\frac{\psi'}{\psi}2p_x = \frac{\varphi'}{\varphi}2p_x \Rightarrow \frac{\psi'\left(p^2\right)}{\psi\left(p^2\right)} = \frac{\varphi'\left(p_x^2\right)}{\varphi\left(p_x^2\right)}$$

Abszolút analóg módon kaphatjuk, hogy

$$\frac{\psi'\left(p^2\right)}{\psi\left(p^2\right)} = \frac{\varphi'\left(p_y^2\right)}{\varphi\left(p_y^2\right)}, \qquad \frac{\psi'\left(p^2\right)}{\psi\left(p^2\right)} = \frac{\varphi'\left(p_z^2\right)}{\varphi\left(p_z^2\right)}.$$

Az előző három képletet egyesítve:

$$\frac{\varphi'\left(p_x^2\right)}{\varphi\left(p_x^2\right)} = \frac{\varphi'\left(p_y^2\right)}{\varphi\left(p_y^2\right)} = \frac{\varphi'\left(p_z^2\right)}{\varphi\left(p_z^2\right)}.$$

Abból, hogy a fenti képletben az első tört (hányados) csak a p_x függvénye, a második és a harmadik pedig csak a p_y és p_z funkciója megfelelően, a hányadosak állandóságaikra következtethetünk:

$$\frac{\varphi'}{\varphi} = -\beta, \quad \beta = \acute{a}ll.$$

Ennek a lineáris, elsőrendű differenciális egyenletnek a megoldása (pl. p_x^2 függvényében):

$$\varphi\left(p_x^2\right) = C\exp\left(-\beta p_x^2\right),$$

ahol C az integrálási konstans.
Tehát, az impulzus eloszlás – Maxwell-eloszlás –:

$$dW_{p_x} = C\exp\left(-\beta p_x^2\right)dp_x$$

$$dW_{p_y} = C\exp\left(-\beta p_y^2\right)dp_y$$

$$dW_{p_z} = C\exp\left(-\beta p_z^2\right)dp_z$$

$$dW_p = C^3\exp\left(-\beta p^2\right)d\Omega$$

Határozzuk meg a C és β konstanst.
Normalizáció:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w_{p_x}dp_x = \int_{-\infty}^{\infty} C\exp\left(-\beta p_x^2\right)dp_x = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\beta p_x^2\right)dp_x}$$

A C meghatározására tekintsük meg a következő integrált:

$$I(\beta)=\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\beta p_x^2\right)dp_x$$

Mivel hasonló integrálok gyakran akadnak a termodinamikai statisztikában, tapasztalat szerint, nem maga az integrált, hanem a négyzetét érdemes kiszámítani:

$$I^2(\beta)=\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\beta x^2\right)dx\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\beta y^2\right)dy=$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\beta\left(x^2+y^2\right)\right)dxdy$$

Poláris koordinátarendszerben ($\rho^2=x^2+y^2,\ dS=\rho d\rho d\theta$)

$$I^2(\beta)=\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\exp\left(-\beta\rho^2\right)\rho d\rho d\theta=2\pi\cdot\int_0^{\infty}\exp\left(-\beta\rho^2\right)\rho d\rho=2\pi\cdot\frac{1}{2}\cdot\int_0^{\infty}\exp\left(-\beta\rho^2\right)d\left(\rho^2\right)=$$

$$=-\frac{1}{\beta}\cdot\pi\cdot\left[\exp\left(-\beta\rho^2\right)\right]_0^{\infty}=-\frac{1}{\beta}\cdot\pi\cdot(0-1)=\frac{\pi}{\beta}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow I(\beta)=\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

Tehát,

$$C=\frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\beta p_x^2\right)dp_x}=\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}.$$

Egy ideális egyatomos gáz belsőenergiája

$$U=\frac{3}{2}\frac{M}{\mu}RT,$$

vagy

$$U=N\langle\varepsilon\rangle,$$

ahol M és μ a gáz tömege (kg) és moláris tömege (kg/mol), R gázállandó ($R=8{,}314\,\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}\cdot\mathrm{mol}}$), T a gáz abszolút hőmérséklete; N a molekulák száma, $\langle\varepsilon\rangle$ a molekulák kinetikai energiájuknak átlag értéke.

Egy m_0 tömegű molekula kinetikai energiája és átlaga

$$\varepsilon=\frac{p^2}{2m_0}$$

$$\langle\varepsilon\rangle=\frac{\left\langle p^2\right\rangle}{2m_0}=\frac{1}{2m_0}\left(\left\langle p_x^2\right\rangle+\left\langle p_y^2\right\rangle+\left\langle p_z^2\right\rangle\right)$$

Izotróp tulajdonságból következik, hogy

$$\langle\varepsilon\rangle=\frac{3}{2m_0}\left\langle p_x^2\right\rangle,\quad \langle\varepsilon\rangle=\frac{3}{2m_0}\left\langle p_y^2\right\rangle,\quad \langle\varepsilon\rangle=\frac{3}{2m_0}\left\langle p_z^2\right\rangle.$$

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p_x^2 \cdot C \exp\left(-\beta p_x^2\right) dp_x = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} p_x^2 \cdot \exp\left(-\beta p_x^2\right) dp_x .$$

$I(\beta)$ integrálból

$$\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\beta p_x^2\right) dp_x \left| \frac{d}{d\beta} \right.$$

$$-\frac{\sqrt{\pi}}{2}\beta^{-3/2} = -\int_{-\infty}^{\infty} p_x^2 \cdot \exp\left(-\beta p_x^2\right) dp_x \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} p_x^2 \cdot \exp\left(-\beta p_x^2\right) dp_x = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\beta^{-3/2}$$

Így

$$\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} p_x^2 \cdot \exp\left(-\beta p_x^2\right) dp_x = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2}\beta^{-3/2} = \frac{1}{2\beta}.$$

Most, figyelembe véve, hogy,

$$N = \frac{M}{\mu} N_A ,$$

ahol N_A az Avogadro szám $N_A = 6{,}02 \cdot 10^{23} \ \frac{1}{\text{mol}}$,

$$U = N\langle \varepsilon \rangle = N \cdot \frac{3}{2} \frac{\left\langle p_x^2 \right\rangle}{m_0} = \frac{3}{2} \frac{N}{m_0} \frac{1}{2\beta} = \frac{M}{\mu} \cdot N_A \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2m_0\beta}$$

és végül

$$\beta = \frac{N_A}{2m_0RT} = \frac{1}{2m_0kT},$$

ahol k Boltzmann állandó, $k = \frac{R}{N_A} = 1{,}381 \cdot 10^{-23} \ \frac{\text{J}}{\text{K}}$.

Tehát,

$$w_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi m_0 kT}} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2m_0kT} \right)$$

$$w_{p_y} = \frac{1}{\sqrt{2\pi m_0 kT}} \exp\left(-\frac{p_y^2}{2m_0kT} \right)$$

$$w_{p_z} = \frac{1}{\sqrt{2\pi m_0 kT}} \exp\left(-\frac{p_z^2}{2m_0kT} \right)$$

$$w_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi m_0 kT}^3} \exp\left(-\frac{p^2}{2m_0kT} \right)$$