

Teoría cinética molecular

El efecto de la temperatura y la masa en algunas propiedades que se pueden modelar con la teoría cinética molecular.

Distribución de Maxwell

Definiciones

Distribución de velocidades

La función $G[v,T,M]$ describe la función de distribución de velocidades de Maxwell, mientras que $F[v,T,M]$ representa la fracción de partículas con velocidades entre 0 y v .

$$G[v,T,M] := 4 \pi v^2 \left(\frac{M}{2 \pi R T}\right)^{3/2} \exp[-M v^2 / (2 R T)];$$
$$F[v,T,M] := \operatorname{Erf}\left[\operatorname{Sqrt}\left[\frac{M v^2}{2 R T}\right]\right] - \operatorname{Sqrt}\left[\frac{2 M v^2}{\pi R T}\right] \exp[-M v^2 / (2 R T)];$$

La función Etr es la distribución de la energía cinética.

$$Etr[e,T] := 2 \pi / (\pi R T)^{3/2} \operatorname{Sqrt}[e] \exp[-e / (R T)];$$

Las funciones g y f son las distribuciones para una componente de la velocidad.

$$g[v,T,M] := \operatorname{Sqrt}\left[\frac{M}{2 \pi R T}\right] \exp[-M v^2 / (2 R T)];$$
$$f[v,T,M] := \operatorname{Erf}\left[\operatorname{Sqrt}\left[\frac{M v^2}{2 R T}\right]\right];$$

Velocidades características: promedio, más probable y rms.

$$Vav[T,M] := \operatorname{Sqrt}\left[\frac{8 R T}{\pi M}\right];$$
$$Vmp[T,M] := \operatorname{Sqrt}\left[\frac{2 R T}{M}\right];$$
$$Vrms[T,M] := \operatorname{Sqrt}\left[\frac{3 R T}{M}\right];$$

Relación entre las velocidades características

$$r1 = \operatorname{PowerExpand}\left[\frac{Vrms[T,M]}{Vav[T,M]}\right];$$
$$r2 = \operatorname{PowerExpand}\left[\frac{Vrms[T,M]}{Vmp[T,M]}\right];$$
$$\{\{"Vrms/Vav=", N[r1]\}, \{"Vrms/Vmp=", N[r2]\}\} // \operatorname{TableForm}$$
$$Vrms/Vav = 1.0854$$
$$Vrms/Vmp = 1.22474$$

Constantes

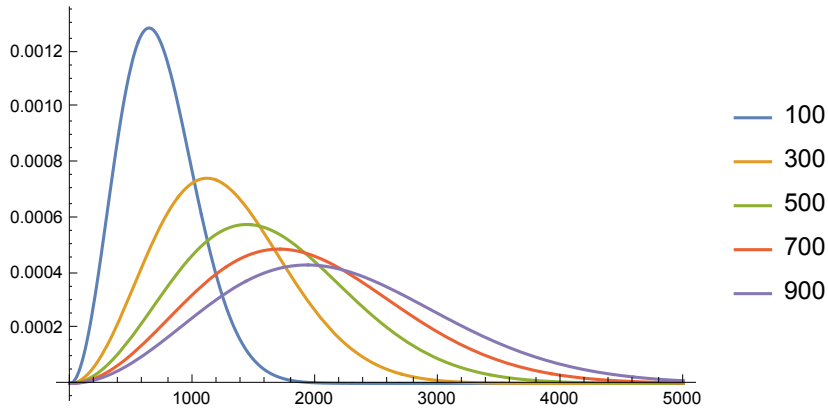
Constante de los gases y masa molar de los gases nobles y el metano en unidades MKS.

$$R = 8.314;$$
$$MHe = 4.0026 \cdot 10^{-3};$$
$$MNe = 20.1797 \cdot 10^{-3};$$
$$MAr = 39.948 \cdot 10^{-3};$$
$$MKr = 83.80 \cdot 10^{-3};$$
$$MXe = 131.29 \cdot 10^{-3};$$
$$MCH4 = 16.035 \cdot 10^{-3};$$

Efecto de la temperatura

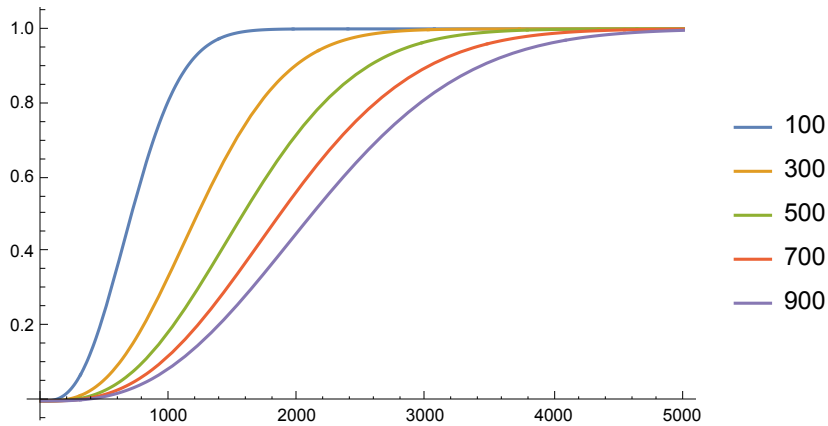
Distribución de velocidades del helio a 100, 300, 500, 700 y 900 K.
 Observe el corrimiento del máximo de la distribución y el ensanchamiento.

```
To=100;
Plot[{G[v,To,MHe],G[v,3 To,MHe],G[v,5 To,MHe],G[v,7 To,MHe],G[v,9 To,MHe]},
{v,0,5000},PlotLegends->{To,3 To, 5 To,7 To, 9 To}]
```



El cambio en el ancho de la distribución genera cambios en la distribución acumulada.

```
Plot[{F[v,To,MHe],F[v,3 To,MHe],F[v,5 To,MHe],F[v,7 To,MHe],F[v,9 To,MHe]},
{v,0,5000},PlotLegends->{To,3 To, 5 To,7 To, 9 To}]
```



Metano

Velocidades características y distribución de velocidades a 300K.

```

To=400;
{"Vmp", "Vav", "Vrms"}, {Vmp[To,MCH4], Vav[To,MCH4], Vrms[To,MCH4]}/N//TableForm

vo={0,100,300,500,700,900,1100};
TableForm[Table[{vo[[i]], G[vo[[i]],To,MCH4], F[vo[[i]],To,MCH4]-F[vo[[i-1]],To,MCH4]},
{i,2,Length[vo]}/N, TableHeadings->{{}, {"v", "G(v)", "F(v)-F(v_)"}}]

```

```

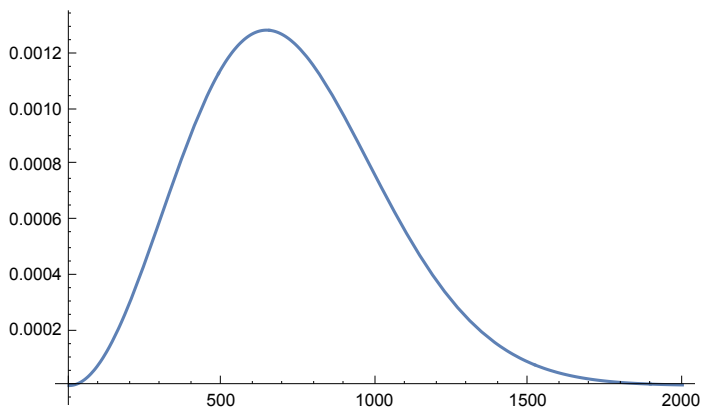
Vmp      Vav      Vrms
644.044  726.726  788.79

```

v	G(v)	F(v)-F(v_)
100.	0.0000824647	0.00277552
300.	0.000611997	0.0640816
500.	0.00115591	0.181439
700.	0.00127027	0.251075
900.	0.000970824	0.228786
1100.	0.000552885	0.151884

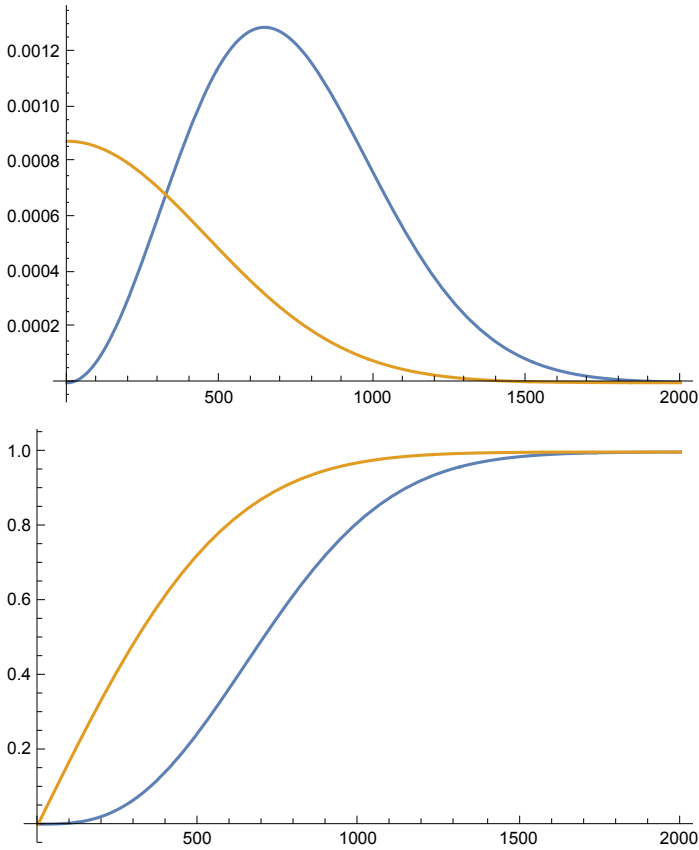
Observe que el 75% de las partículas tienen velocidades entre 300 y 900 m s⁻¹.

```
Plot[G[v,To,MCH4],{v,0,2000}]
```



Distribuciones de la velocidad y de una de sus componentes a 300K.

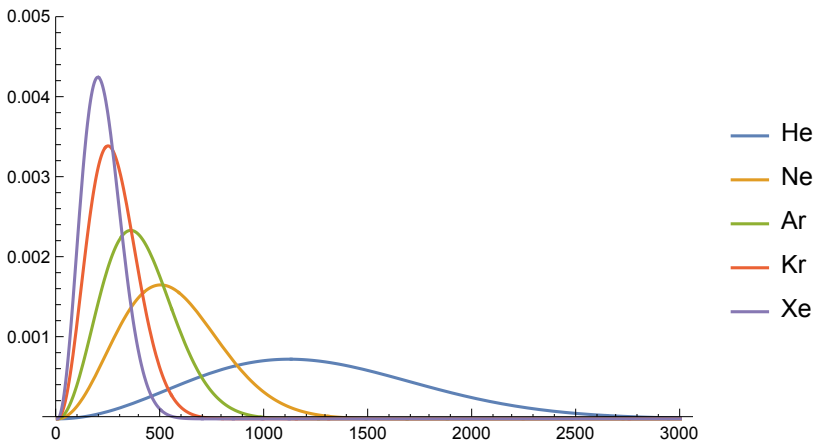
```
Plot[{G[v, To, MCH4], g[v, To, MCH4]}, {v, 0, 2000}]
Plot[{F[v, To, MCH4], f[v, To, MCH4]}, {v, 0, 2000}]
```



Efecto de la masa molar

Distribución de velocidades para los gases nobles a 300K.

```
To=300;
Plot[{G[v, To, MHe], G[v, To, MNe], G[v, To, MAr], G[v, To, MKr], G[v, To, MXe]}, {v, 0, 3000},
PlotRange->{0, 0.005}, PlotLegends->{"He", "Ne", "Ar", "Kr", "Xe"}]
```



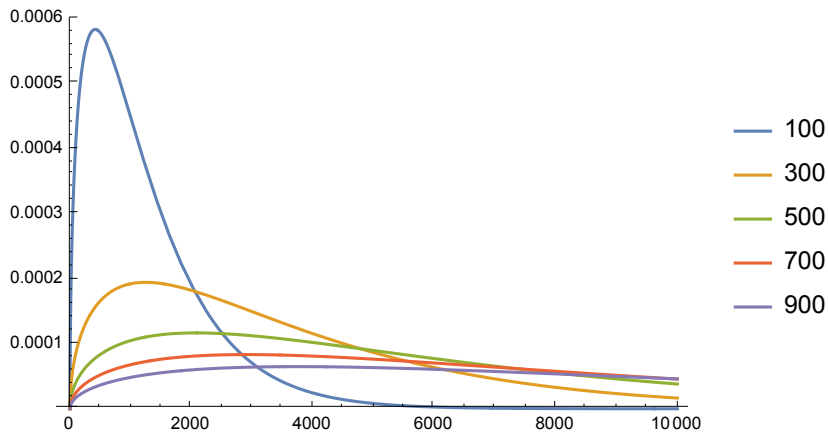
Observe que el aumento en la masa disminuye el ancho de la distribución. este efecto es contrario al de la temperatura.

```
{{" ", "Vav"}, {"He", Vav[To, MHe]}, {"Ne", Vav[To, MNe]}, {"Ar", Vav[To, MAr]},
{"Kr", Vav[To, MKr]}, {"Xe", Vav[To, MXe]}}//N//TableForm
```

	Vav
He	1259.69
Ne	561.02
Ar	398.739
Kr	275.305
Xe	219.948

Distribución de energía cinética

```
To=100;
Plot[{Etr[e,To],Etr[e,3 To],Etr[e,5 To],Etr[e,7 To],Etr[e,9 To]}, {e,0,10000},PlotRange->{0,0.0006},PlotLegends->{To,3
To, 5 To,7 To, 9 To}]
```



```
Clear[R];
Print["Emp= ", e /. Solve[D[Etr[e, T], e] == 0, e]];
Integrate[e^2 Etr[e, T], {e, 0, Infinity}, Assumptions -> {Re[R T] > 0}]
```

$$\text{Emp} = \left\{ \frac{R T}{2} \right\}$$

$$\frac{15}{4} \sqrt{\frac{1}{R T}} (R T)^{5/2}$$