

Inhaltsverzeichnis

1	Harte Kugeln	2
1.1	Sphärische Koordinaten	2
2	Streifwinkel	3
3	Kollisionswinkel	5
3.1	Stoßfrequenz und freie Weglänge	5
3.2	Gauß-Verteilung	6
3.3	Stoßfrequenzdichte	8
3.3.1	Zwei Dimensionen	8
3.3.2	Allgemeines D	10
4	Bahnenwinkel	14
4.1	Extreme Geschwindigkeiten	16
4.2	Vor und zurück	18
4.3	Beliebige Winkel	21
4.4	β -Stoßfrequenzdichte	22
4.5	Laborsystem	23
5	Wirkung des Stoßes	24
5.1	Impuls-/Energieerhaltung	24
5.2	Billardstoß	25
5.2.1	Extremale Billardstöße	26
5.2.2	Statistik des Energieübertrags	27
5.3	Andere Stöße	29
6	Simulation des HKGs	30
6.1	„Ortslos“	30
6.2	Exakt	32
A	Skalierungsverhalten	33
B	Relativgeschwindigkeiten	33

1 Harte Kugeln

Im Gas aus harten Kugeln kann die Statistik diverser Winkel untersucht werden: Zum einen gibt es den Streifwinkel χ , das ist der Winkel zwischen der Richtung der Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner und der Verbindungslinie ihrer Mittelpunkte bei Kollision. Damit kennzeichnet $\chi = 0$ einen Zentralstoß, während $\chi = \pi/2$ für streifenförmige Stöße steht. Die Statistik von χ wird in 2 berechnet.

Bei einem Teilchen, das sich gegenüber dem Schwerpunkt des Gases mit der Geschwindigkeit \vec{u} bewegt, kann darüberhinaus der Kollisionswinkel ϕ definiert werden, nämlich als Winkel zwischen \vec{u} und der Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner. Dabei wird die Richtung so gewählt, dass $|\phi| > \pi/2$ einen Stoß von vorne und $|\phi| < \pi/2$ einen von hinten bezeichnet. Dies wird in 3 betrachtet.

Bewegen sich beide Teilchen gegenüber dem Schwerpunkt des Gases (mit Geschwindigkeiten \vec{u} bzw. \vec{v}), so kann noch der Bahnenwinkel β zwischen \vec{u} und $-\vec{v}^1$ definiert werden. Dieser Winkel wird in Abschnitt 4 untersucht.

1.1 Sphärische Koordinaten

Da wir unsere Untersuchungen im \mathbb{R}^D mit beliebiger Dimensionalität D durchführen werden, seien hier kurz die für uns wichtigsten Eigenschaften von D -dimensionalen Kugeln zusammengefasst. Die (Hohl-)Kugel mit Radius 1 nennen wir Ω_D . Zweckmäßigerweise benutzen wir D -dimensionale sphärische Koordinaten

$$\vec{r} \cdot \vec{e}_i \equiv r \cos \theta_i \prod_{k=i+1}^D \sin \theta_k \quad , \quad (1)$$

mit $\theta_{i>1} \in [0 \dots \pi)$ und $\theta_1 \in \{0, \pi\}$, für deren Volumenelement gilt

$$d^D \vec{r} = r^{D-1} d\Omega_D dr \quad (2)$$

$$\text{wobei} \quad d\Omega_D \equiv \sin^{D-2} \theta_D d\theta_D d\Omega_{D-1} \quad , \quad (3)$$

mit der formalen Zuweisung $d\Omega_1 \equiv 1$.

Integrieren wir $d\Omega_D$ über alle Winkel, so erhalten wir S_D , die Oberfläche von Ω_D . Das Ergebnis ist

$$S_D = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} \quad (4)$$

mit der Γ -Funktion

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty t^{z-1} \exp(-t) dt \quad . \quad (5)$$

Um U_D , das von Ω_D eingeschlossene Volumen, zu erhalten, müssen wir das aus (2) verbleibende r lediglich noch von 0 bis 1 integrieren und finden somit

$$U_D = \frac{S_D}{D} \quad . \quad (6)$$

¹Das negative Vorzeichen ist lediglich Konvention.

Die ersten sechs Werte sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

D	1	2	3	4	5	6
S_D	2	2π	4π	$2\pi^2$	$\frac{8\pi^2}{3}$	π^3
U_D	2	π	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{\pi^2}{2}$	$\frac{8\pi^2}{15}$	$\frac{\pi^3}{6}$

(7)

2 Streifwinkel

Ein Probeteilchen befinde sich im Ursprung, und den Verbindungsvektor der Kugelmittelpunkte beim Stoß bezeichnen wir mit

$$\vec{s} = 2R\vec{e}_r \quad , \quad (8)$$

wobei R der Kugelradius und \vec{e}_r der Ortsvektor eines Punktes auf der D -dimensionalen Einheitskugel ist. Die Bahnen der Stoßpartner mögen gleichverteilt entlang einer vorgegebenen Richtung liegen, wir bezeichnen diese Richtung der Relativgeschwindigkeit mit dem Einheitsvektor $-\vec{e}$. Der Winkel zwischen \vec{s} und \vec{e} ist also direkt unser gesuchter Streifwinkel χ .

Projizieren wir nun den Vektor \vec{s} in die $D-1$ -dimensionale Ebene, die senkrecht zu \vec{e} liegt, betrachten also

$$\vec{s}_\perp \equiv \vec{s} - (\vec{s} \cdot \vec{e})\vec{e} \quad , \quad (9)$$

so ist dessen Länge der Stoßparameter b . Sie ergibt sich unmittelbar aus (9) zu

$$\begin{aligned} b^2 &= \vec{s}_\perp \cdot \vec{s}_\perp = \vec{s}^2 - (\vec{s} \cdot \vec{e})^2 \\ &= 4R^2 - 4R^2 \cos^2 \chi \\ &= 4R^2 \sin^2 \chi \quad , \end{aligned} \quad (10)$$

die Beziehung zwischen Stoßparameter b und Streifwinkel $\chi \in [0 \dots \pi/2)$,

$$b = 2R \sin \chi \quad , \quad (11)$$

gilt also für jede Dimensionalität.

Wegen der Gleichverteilung der Bahnen liegen auch die durch \vec{s}_\perp bezeichneten Punkte gleichverteilt in der $D-1$ -dimensionalen Kugel mit Radius $2R$ und Volumen $(2R)^{D-1}U_{D-1}$, d.h. ihre Dichte ist gerade der Kehrwert dieses Volumens. Mit dem Volumenelement (vgl. Gleichung (2))

$$d^{D-1}\vec{s}_\perp = b^{D-2} d\Omega_{D-1} db \quad (12)$$

lautet die Normierungsbedingung also

$$\begin{aligned}
1 &\stackrel{!}{=} \int_0^{2R} \int_{\Omega_{D-1}} \frac{b^{D-2}}{(2R)^{D-1} U_{D-1}} d\Omega_{D-1} db \\
&= \int_0^{2R} \frac{b^{D-2} S_{D-1}}{(2R)^{D-1} U_{D-1}} db \\
&= \int_0^{2R} \frac{D-1}{2R} \left(\frac{b}{2R}\right)^{D-2} db \quad .
\end{aligned} \tag{13}$$

Daraus lesen wir ab, dass der Stoßparameter für $D > 2$ *nicht* gleichverteilt ist, sondern einem Potenzgesetz folgt:

$$p_b(b) = \frac{D-1}{2R} \left(\frac{b}{2R}\right)^{D-2} \tag{14}$$

Dies überträgt sich gemäß

$$\begin{aligned}
p(\chi) &= p_b(b(\chi)) \left| \frac{db}{d\chi} \right| \\
&= \frac{D-1}{2R} \sin^{D-2} \chi |2R \cos \chi| \\
&= (D-1) \sin^{D-2} \chi \cos \chi
\end{aligned} \tag{15}$$

auch auf den Streifwinkel. Während es sich hier für $D = 2$ anschaulicherweise um einen einfachen Cosinus-Bogen handelt, liegt allgemein das Maximum bei einem Winkel von

$$\chi^* = \arcsin \left(\sqrt{\frac{D-2}{D-1}} \right) \quad , \tag{16}$$

welcher für höhere D immer weiter in Richtung $\pi/2$ wandert und sich diesem Wert schließlich asymptotisch wie

$$\chi^* \rightarrow \frac{\pi}{2} - \frac{1}{\sqrt{D}} \tag{17}$$

nähert, wobei auch die Breite der Verteilung (15) immer geringer wird, bis es schließlich mit

$$p_\infty(\chi) = \delta(\chi - \pi/2) \tag{18}$$

nur noch Streifstöße gibt.

Randbemerkung: Der Unterschied zu $D = 2$ mag zunächst erstaunen, sagt er doch aus, dass der „vorderste Teil“ der Kugel in höheren Dimensionen immer schwieriger zu treffen ist (im Vergleich zu den Randgebieten) als beim Kreis. Dies trifft in gewisser Weise zu. Zeichnen wir einmal gedanklich ein „bull’s eye“ in das Gebiet der möglichen

\vec{s}_\perp ; es sei der innerste Bereich, der nur mit 1% Wahrscheinlichkeit zu treffen ist, sein Radius ist also durch den Wert

$$\frac{b^{D-1}U_{D-1}}{(2R)^{D-1}U_{D-1}} = \frac{1}{100} \Leftrightarrow \frac{b}{2R} = 100^{\frac{1}{1-D}} \quad (19)$$

gegeben. Einige Werte zeigt die folgende Tabelle.

D	2	3	4	10	100
$b/2R$	0.01	0.10	0.22	0.60	0.95

Während also in $D = 2$ das „bull’s eye“ auch nur 1% des Gesamtdurchmessers ausmachen würde², wäre es in $D = 100$ mit 95% Anteil am Durchmesser „riesig“ und doch würden 99% der Stöße im schmalen Rand landen. Dies ist ein wohlbekanntes Ergebnis: An einer 20 cm-Melone mit 1 cm dicker Schale hätte man in 44 Dimensionen 99% Abfall („Die Masse sitzt direkt unter der Haut.“). Entscheidend wird dieses Verhalten in der Thermodynamik, wo der *Phasenraum* Dimensionen in der Größenordnung 10^{23} hat.

3 Kollisionswinkel

3.1 Stoßfrequenz und freie Weglänge

Betrachten wir ein Gas der Dichte ρ im D -dimensionalen Ortsraum, wobei sich dessen Teilchen zunächst alle mit derselben Geschwindigkeit \vec{w} bewegen mögen. Die Stromdichte beträgt damit $\rho\vec{w}$, und so ist die Zahl der Teilchen, die pro Zeiteinheit durch eine (senkrecht zu \vec{w} orientierte) (Hyper-)Fläche A hindurchtreten (bzw. auf diese Fläche *stoßen*), gerade $v = A w \rho$, mit anderen Worten: es ist v die Stoßfrequenz auf die Fläche A .

Sei \vec{w} nun eine stochastische Größe mit einer kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsdichte p , so dass wir uns (infinitesimal kleine) Gruppen von Teilchen mit Anzahl-Dichten

$$d^D \rho = \rho p(v, \vec{e}) dw d\Omega_D \quad (20)$$

denken können, die mit einer Geschwindigkeit bei w und in eine Richtung bei \vec{e} unterwegs sind. Da mit der Stromdichte auch die Stoßfrequenz auf die Fläche A additiv ist, können wir alle Beiträge zur infinitesimalen Stoßfrequenz

$$d^{D-1} v = \int_{w=0}^{\infty} A w d^D \rho = A \rho \underbrace{\int_0^{\infty} w p(w, \vec{e}) dw}_{\equiv \bar{w}} d\Omega_D \quad (21)$$

aufintegrieren. Eine zentrale Größe ist also \bar{w} , das erste Moment der Verteilung p bezüglich des Geschwindigkeitsbetrages w .

²N.B.: Unsere Zielscheibe ist $D-1$ -dimensional.

Definieren wir nun den Stoßzylinder. Er sei entlang \vec{e} ausgerichtet, habe den Radius $2R$, und ein ruhendes Probeteilchen³ befinde sich genau auf seiner Achse. Damit ist jedes Teilchen im Zylinder, welches eine Flugrichtung bei \vec{e} hat (also parallel zum Zylinder), ein Stoßpartner (die Auswirkung des dann stattfindenden Stoßes betrachten wir momentan nicht). Aus dem Zylinderradius resultiert seine Stirnfläche $A = (2R)^{D-1}U_{D-1}$, und so erhalten wir für das Probeteilchen eine (infinitesimale) Stoßfrequenz von

$$d^{D-1}\mathbf{v} = \underbrace{(2R)^{D-1}U_{D-1}}_{\equiv \lambda^{-1}} \rho \bar{w} d\Omega_D \quad . \quad (22)$$

Bei dem Proportionalitätsfaktor zwischen Stoßfrequenz und Geschwindigkeit handelt es sich offensichtlich um eine inverse Länge λ^{-1} . Die Größe λ bezeichnet die mittlere freie Weglänge, deren anschauliche Bedeutung es ist, dass sich im Abschnitt der Länge λ des Stoßzylinders im Mittel gerade ein Teilchen befindet.

Da λ richtungsunabhängig und somit ein bloßer Parameter ist (homogene Dichte ρ und kugelförmiges Probeteilchen vorausgesetzt) können wir mit λ als Längeneinheit zu dimensionslosen Längen übergehen⁴, womit die Beziehung (22) zu

$$d^{D-1}\mathbf{v} = \bar{w} d\Omega_D \quad (23)$$

wird. Da $d\Omega_D$ das Flächenelement auf der Einheitskugel, also das Raumwinkelement ist, kommt dem ersten Moment \bar{w} offensichtlich die Bedeutung der Stoßfrequenzraumwinkeldichte⁵ zu.

3.2 Gauß-Verteilung

Im Gleichgewicht sind die Geschwindigkeiten Gauß-verteilt, d.h. die Wahrscheinlichkeit, im Schwerpunktsystem eine Geschwindigkeit bei \vec{v} zu finden beträgt

$$d^D P = (\sigma\sqrt{\pi})^{-D} \exp(-v^2/\sigma^2) d^D \vec{v} \quad , \quad (24)$$

wobei in der klassischen Thermodynamik

$$\sigma^2 = \frac{2k_B T}{m} \quad (25)$$

gilt.

Um den Zusammenhang zwischen σ und der durchschnittlichen Geschwindigkeit herzustellen, nutzen wir die Kugelsymmetrie und schreiben zunächst (vgl. Gleichung (2))

$$d^D \vec{v} = v^{D-1} d\Omega_D dv \quad , \quad (26)$$

³Ruhend in dem Bezugssystem, in dem auch \bar{w} gemessen ist.

⁴Das heißt, wir drücken *alle* Längen ℓ durch $\ell'\lambda$ aus und vergessen dann den Strich sofort wieder.

⁵In $D > 3$ würde man eigentlich „Hyper-Raumwinkel“ sagen, aber das würde zu lang und klänge zu sehr nach Science-Fiction.

Damit wird

$$\begin{aligned}
\langle v^k \rangle &= (\sigma\sqrt{\pi})^{-D} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} v^k \exp(-v^2/\sigma^2) d^D \vec{v} \\
&= (\sigma\sqrt{\pi})^{-D} \int_0^{\infty} v^k \exp(-v^2/\sigma^2) S_D v^{D-1} dv \\
&= \sigma^k \frac{\Gamma((D+k)/2)}{\Gamma(D/2)} \tag{27}
\end{aligned}$$

Zweckmäßigerweise drückt man σ also durch das zweite Moment von v aus:

$$\langle v^2 \rangle = \sigma^2 \frac{\Gamma(D/2+1)}{\Gamma(D/2)} = \sigma^2 \frac{D}{2} = D \frac{k_B T}{m} \tag{28}$$

(Dies ist ein Spezialfall des Gleichverteilungssatzes.)

Im Folgenden wählen wir $\sigma = \sqrt{2\langle v^2 \rangle / D}$ als Einheit der Geschwindigkeit⁶, so dass sich Gleichung (24) dimensionslos als

$$d^D P = \pi^{-D/2} \exp(-v^2) d^D \vec{v} \quad . \tag{29}$$

darstellt⁷, bzw. sich für den Betrag v

$$dP = \int_{\Omega_D} d^D P = \frac{S_D}{\pi^{D/2}} v^{D-1} \exp(-v^2) dv = \frac{2v^{D-1}}{\Gamma(D/2)} \exp(-v^2) dv \tag{30}$$

ergibt. Der mittlere Geschwindigkeitsbetrag, den wir in Abschnitt 3.3.2 und 4 häufig verwenden werden, ist damit einfach die Zahl

$$\langle v \rangle_D = \frac{\Gamma((D+1)/2)}{\Gamma(D/2)} = \frac{\sqrt{2D-1}}{2} + O(D^{-3/2}) \quad , \tag{31}$$

d.h. $\langle v \rangle_1 = 1/\sqrt{\pi}$, $\langle v \rangle_2 = \sqrt{\pi}/2$, $\langle v \rangle_3 = 2/\sqrt{\pi}$, etc. Für große D strebt (30) gegen die Gaußkurve

$$dP_{\infty} \equiv \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-2\left(v - \frac{\sqrt{2D-1}}{2}\right)^2\right) dv \quad , \tag{32}$$

an deren endlicher absoluter Breite $1/2$ man abliest, dass für große D wegen der Divergenz von (31) eine asymptotisch verschwindende relative Breite der Verteilung der Geschwindigkeitsbeträge vorliegt, ein Resultat, das in Abschnitt 4.2 noch einmal relevant werden wird.

Die bisherigen Ergebnisse galten für das Schwerpunktsystem. Für ein Teilchen, das sich mit der Geschwindigkeit \vec{u} gegenüber dem Schwerpunkt bewegt, tritt an Stelle von (29) eine entsprechend verschobene Verteilung der Relativgeschwindigkeiten $\vec{w} \equiv \vec{v} - \vec{u}$

$$d^D P = \pi^{-D/2} \exp(-(\vec{w} + \vec{u})^2) d^D \vec{w} \quad , \tag{33}$$

die für $\vec{u} \neq 0$ natürlich nicht mehr isotrop ist.

⁶Damit ist dann die Zeiteinheit als λ/σ festgelegt, siehe Abschnitt 3.1.

⁷Klüber wäre eigentlich $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$ als Einheit, womit $\sigma^2 = 2/D$, d.h. $d^D p = (2\pi/D)^{-D/2} \exp(-2v^2/D)$ und damit u.a. $\langle v \rangle_D = 1 - 1/(4D) + O(D^{-2})$ folgte.

3.3 Stoßfrequenzdichte

Mit dem etwas verkürzten Begriff „Stoßfrequenzdichte“ bezeichnen wir die Dichte der Stoßfrequenz bezüglich des Winkels ϕ zwischen \vec{u} und \vec{w} , wir definieren sie also als

$$\Psi \equiv \frac{d\nu}{d\phi} \quad . \quad (34)$$

3.3.1 Zwei Dimensionen

In zwei Dimensionen (wo wir o.B.d.A. $\vec{u} = u\vec{e}_x$ wählen, so dass unser Kollisionswinkel ϕ mit dem üblicherweise auch als ϕ bezeichneten Polarwinkel übereinstimmt) vereinfacht sich (23) zu

$$d\nu = \bar{w} d\phi \quad , \quad (35)$$

so dass offensichtlich \bar{w} identisch zur Stoßfrequenzdichte ist. Diese Identität entspricht auch der Anschauung, da in $D = 2$ der Raumwinkel zum ebenen Winkel entartet. Um \bar{w} konkret zu bestimmen, benötigen wir zunächst die infinitesimale Wahrscheinlichkeit

$$d^2P = \frac{1}{\pi} \exp(-(w^2 + 2\vec{w} \cdot \vec{u} + u^2)) dw_x dw_y \quad (36)$$

in Polarform, also

$$d^2P = \frac{w}{\pi} \exp(-(w^2 + 2wu \cos \phi + u^2)) dw d\phi \quad . \quad (37)$$

Die Integration liefert dann

$$\begin{aligned} \bar{w}(u, \phi) d\phi &= \int_{w=0}^{\infty} w d^2P \\ &= \exp(-u^2) f(u \cos \phi) d\phi \end{aligned} \quad (38)$$

$$\text{mit } f(z) \equiv \frac{2z^2 + 1}{4\sqrt{\pi}} \exp(z^2) \operatorname{erfc}(z) - \frac{z}{2\pi} \quad (39)$$

und der komplementären Fehlerfunktion

$$\operatorname{erfc}(z) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} \exp(-t^2) dt \quad . \quad (40)$$

Anschaulich gesprochen beschreibt die Stoßfrequenzraumwinkeldichte also den „Wind“, der einem Teilchen mit Geschwindigkeit u „entgegenweht“⁸. Abbildung 1 zeigt deutlich dessen mit wachsender Geschwindigkeit zunehmende Asymmetrie. Um

⁸Obacht: ϕ gibt die Richtung an, in die die anderen Teilchen fliegen; nicht die, aus der sie kommen.

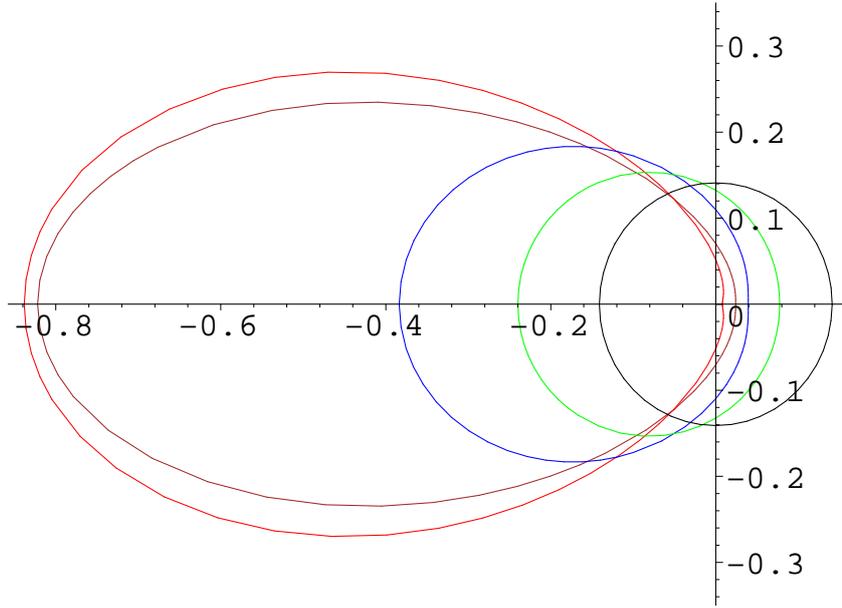


Abbildung 1: In zwei Dimensionen: Polardarstellung der winkelabhängigen Stoßfrequenzdichte ($\psi = \bar{w}$ in $D = 2$) entsprechend Gleichung (38) für ein Teilchen, das sich mit der Geschwindigkeit u nach rechts bewegt, der Winkel gibt dabei die Richtung der Relativgeschwindigkeit an. Dargestellt sind die Fälle $u = 0$ (schwarz), $u = 1/4$ (grün), $u = 1/2$ (blau) und $u = 1$ (rot), sowie (braun) der Mittelwert entsprechend der Gaußverteilung (41).

die mittlere Asymmetrie zu erhalten, müssen wir $\psi = \bar{w}$ noch mitteln über alle Geschwindigkeiten u entsprechend einer Verteilung nach Gleichung (30), also

$$\begin{aligned}
 \langle \bar{w} \rangle &\equiv \int_0^\infty \bar{w}(u, \phi) 2u \exp(-u^2) du \\
 &= 2 \int_0^\infty u \exp(-2u^2) f(u \cos \phi) du \\
 &= \frac{1}{4\sqrt{\pi}} (\sqrt{2} + \cos \phi)^{-2}
 \end{aligned} \tag{41}$$

berechnen, was ebenfalls in Abbildung 1 dargestellt ist.

Mit Hilfe dieses Mittelwerts⁹ $\langle \bar{w} \rangle$ können wir das Verhältnis der Stoßfrequenz von vorne und hinten ermitteln:

$$\frac{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \langle \bar{w} \rangle d\phi + \int_{\pi/2}^{\pi} \langle \bar{w} \rangle d\phi}{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \langle \bar{w} \rangle d\phi} = \frac{3\pi + 2}{\pi - 2} \approx 10.007754 \tag{42}$$

⁹Der Überstrich verweist auf die Mittelung gemäß Gleichung (38), die spitzen Klammern dagegen auf die in (41) durchgeführte.

In zwei Dimensionen erfährt ein Teilchen also im Mittel 10 mal mehr Frontalstöße als „Auffahrunfälle“ und zwar unabhängig von Anzahldichte und Durchmesser der Teilchen. Es sei nochmal erwähnt, dass die Begriffe „vorne“ und „hinten“ sich allein auf die Richtung von \vec{u} beziehen (können).

3.3.2 Allgemeines D

Für den mehrdimensionalen Fall ist es günstig, die Achse D entlang u zu orientieren, d.h. $\vec{u} = u\vec{e}_D$, denn dann ist θ_D identisch mit unserem Kollisionswinkel ϕ und die Rotationssymmetrie um \vec{e}_D in (23) ist durch das Ausintegrieren der $\theta_{i<D}$ leicht zu berücksichtigen:

$$d\mathbf{v} = \int_{\Omega_{D-1}} d^{D-1}\mathbf{v} = \bar{w} S_{D-1} \sin^{D-2} \phi d\phi \quad (43)$$

Dabei ist Ω_{D-1} die zu \vec{e}_D senkrechte Einheitskugel (bzw. der Einheitskreis in $D = 3$). Hieraus lesen wir die Beziehung zwischen Stoßfrequenzraumwinkeldichte \bar{w} und Stoßfrequenzdichte ψ ab, nämlich

$$\psi = \underbrace{S_{D-1} \sin^{D-2} \phi}_{\equiv a_D(\phi)} \bar{w} \quad , \quad (44)$$

was in $D > 2$ erwartungsgemäß keine Gleichheit mehr ist, sondern einen Faktor a_D aufweist, der eine Funktion von ϕ allein ist.

Wir bestimmen zunächst das (anschaulichere) \bar{w} . Die Verteilung (33) in sphärischen Koordinaten lautet nun

$$d^D P = \frac{w^{D-1}}{\pi^{D/2}} \exp(-(w^2 + 2wu \cos \phi + u^2)) dw d\Omega_D \quad ,$$

und das Ausintegrieren der $\theta_{i<D}$ liefert natürlich wieder den Faktor $a_D(\phi)$ aus (44):

$$d^2 P = \frac{w^{D-1}}{\pi^{D/2}} \exp(-(w^2 + 2wu \cos \phi + u^2)) a_D(\phi) dw d\phi \quad , \quad (45)$$

Ein Vergleich mit dem zweidimensionalen Ergebnis (37) zeigt die Verallgemeinerungen

$$w \rightarrow w^{D-1} \quad (46)$$

$$\pi \rightarrow \pi^{D/2} \quad (47)$$

$$1 \rightarrow a_D(\phi) \quad , \quad (48)$$

von denen die Letzte die Diskrepanz $1 \neq a_2 = S_1 = 2$ aufweist. Der Grund für diesen Faktor 2 liegt jedoch lediglich in der Normierung, denn das Intervall für ϕ ist hier nicht länger $[-\pi \dots \pi]$ ¹⁰ sondern $[0 \dots \pi]$.

¹⁰In $D = 2$ hatten wir beim Übergang von (36) zu (37) die Symmetrie bezüglich $\phi \leftrightarrow -\phi$ nicht ausgenutzt.

Wie in (38) ist nun das erste Moment bezüglich w zu berechnen:

$$\begin{aligned}\bar{w}(u, \phi) a_D(\phi) d\phi &= \int_{w=0}^{\infty} w d^2p \\ &\equiv \frac{\langle v \rangle_D}{S_D} \exp(-u^2) g_D(u \cos \phi) a_D(\phi) d\phi\end{aligned}\quad (49)$$

Die Winkelabhängigkeit von \bar{w} können wir also allein durch die etwas kompliziertere Funktion g_D ausdrücken, in Gestalt von

$$g_D(z) \equiv \frac{(-1)^D}{\Gamma\left(\frac{D+1}{2}\right)} \left(\mathcal{P}_D(z) \varepsilon(z) - \mathcal{Q}_D(z) \right) \quad (50)$$

$$\text{mit} \quad \varepsilon(z) \equiv \sqrt{\pi} \exp(z^2) \operatorname{erfc}(z) \quad (51)$$

und den Polynomen $\mathcal{P}_D(z)$ und $\mathcal{Q}_D(z)$ vom Grad D bzw. $D-1$ mit jeweils gegensätzlicher Parität. Die ersten fünf Paare lauten

D	$\mathcal{P}_D(z)$	$\mathcal{Q}_D(z)$
2	$z^2 + \frac{1}{2}$	z
3	$z^3 + \frac{3}{2}z$	$z^2 + 1$
4	$z^4 + 3z^2 + \frac{3}{4}$	$z^3 + \frac{5}{2}z$
5	$z^5 + 5z^3 + \frac{15}{4}z$	$z^4 + \frac{9}{2}z^2 + 2$
6	$z^6 + \frac{15}{2}z^4 + \frac{45}{4}z^2 + \frac{15}{8}$	$z^5 + 7z^3 + \frac{33}{4}z$

(52)

Wir finden hier $f(z) = g_2(z)/(4\sqrt{\pi})$ aus Gleichung (38) wieder.

Eine geschlossene Darstellung für beliebige D erlaubt die Kummer'sche M-Funktion $M_{\mu, \nu}$ ¹¹ in Form von

$$g_D(z) = M_{\frac{D+1}{2}, \frac{1}{2}}(z^2) - \frac{2z}{\langle v \rangle_D} M_{\frac{D+2}{2}, \frac{3}{2}}(z^2) \quad (53)$$

Mit $M_{\mu, \nu}(0) = 1$ nimmt auch sie im Schwerpunktsystem den Wert $g_D(u=0) = 1$ an, so dass nach (49) gilt

$$\bar{w}(0, \phi) = \frac{\langle v \rangle_D}{S_D} \exp(0) g_D(0) = \frac{\langle v \rangle_D}{S_D} \quad , \quad (54)$$

wie es erwartet werden musste.

¹¹Sie ist eine Lösung der Differentialgleichung $xM''(x) + (\nu - x)M'(x) = \mu M(x)$.

Wie in $D = 2$ ist auch hier $\bar{w}(u, \phi)$ schließlich über das gemäß (30) Gauß-verteilte u zu mitteln, was

$$\begin{aligned}
\langle \bar{w} \rangle &= \int_0^\infty \bar{w}(u, \phi) \frac{S_D}{\pi^{D/2}} u^{D-1} \exp(-u^2) du \\
&= \frac{\langle v \rangle_D}{\pi^{D/2}} \int_0^\infty g_D(u \cos \phi) u^{D-1} \exp(-2u^2) du \\
&= \frac{\langle v \rangle_D}{S_D} (\sqrt{2} + \cos \phi)^{-D}
\end{aligned} \tag{55}$$

liefert. Zur Probe integrieren wir dieses Ergebnis noch einmal über die Einheitskugel und finden

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_D} \langle \bar{w} \rangle d\Omega_D &= \int_0^\pi \langle \bar{w} \rangle a_D(\phi) d\phi \\
&= \underbrace{\langle v \rangle_D \frac{S_{D-1}}{S_D}}_{\frac{D-1}{2\sqrt{\pi}}} \underbrace{\int_0^\pi \frac{\sin^{D-2} \phi}{(\sqrt{2} + \cos \phi)^D} d\phi}_{\sqrt{2\pi} \Gamma(\frac{D-1}{2}) / \Gamma(\frac{D}{2})} \\
&= \sqrt{2} \langle v \rangle_D \quad ,
\end{aligned} \tag{56}$$

also das wohlbekannte Ergebnis der „doppelten Temperatur“ der Relativgeschwindigkeiten (siehe Abschnitt B).

Abbildung 2 zeigt deutlich, wie mit steigender Dimensionalität die Asymmetrie in der mittleren Stoßfrequenzraumwinkeldichte (55) zunimmt. Für eine Statistik des Kollisionswinkels ϕ sind wir allerdings nicht an dieser interessiert, sondern an der mittleren Stoßfrequenzdichte $\langle \psi \rangle$. Da \bar{w} und ψ sich nur durch den Faktor $a_D(\phi)$ unterscheiden, dieser aber nicht von u abhängt, gilt (44) auch für die gemittelten Größen:

$$\langle \psi \rangle = a_D(\phi) \langle \bar{w} \rangle = \frac{D-1}{2\sqrt{\pi}} \frac{\sin^{D-2} \phi}{(\sqrt{2} + \cos \phi)^D} \tag{57}$$

Die mittlere Stoßfrequenzdichte $\langle \psi \rangle$ ist in Abbildung 3 dargestellt, in der sich schon andeutet, dass der starke Anstieg der Asymmetrie in $\langle \bar{w} \rangle$ in höheren Dimensionen nicht völlig überkompensiert wird durch den dominanten „Bauch“ der Einheitskugel. Das lässt sich auch mathematisch zeigen, denn für den Bruch in (57) wird die Gleichheit in

$$\sin \phi \leq \sqrt{2} + \cos \phi \tag{58}$$

nur an der singulären Stelle

$$\phi = \frac{3}{4}\pi \tag{59}$$

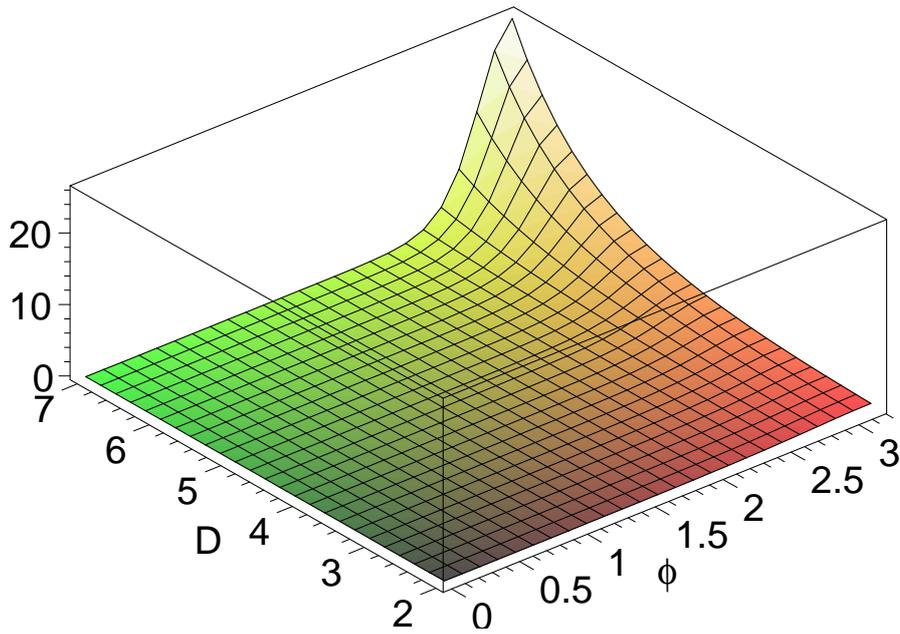


Abbildung 2: Die ϕ -abhängige, mittlere Stoßfrequenzraumwinkeldichte (55) als Funktion der Dimensionalität. Die Asymmetrie nimmt sehr stark mit D zu.

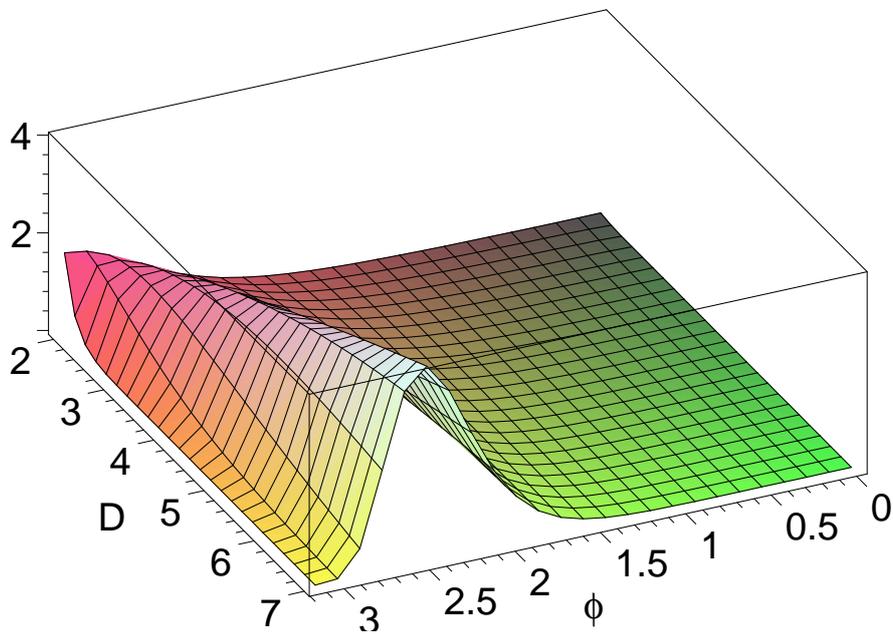


Abbildung 3: Die mittlere Stoßfrequenzdichte $\langle \psi \rangle$ aus Gleichung (57). Der Faktor $a_D(\phi)$ und der divergenzartige Anstieg von $\langle \bar{w} \rangle$ kompensieren sich für hohe Dimensionen zu einer schmalen Verteilung um $\phi = 3\pi/4$.

erreicht, und so ergibt sich für hohe D eine beliebig schmale Verteilung. Zusammen mit den Vorfaktoren wird (57) also asymptotisch zu

$$\langle \psi \rangle \longrightarrow \sqrt{2} \langle v \rangle_D \delta(\phi - 3\pi/4) \quad .^{12} \quad (60)$$

Mit anderen Worten: Hochdimensionale Kugeln werden nur genau von „schräg vorne“ getroffen, und zwar immer streifend, wie wir aus 2 wissen.

Insbesondere bedeutet (60), dass der Anteil der „Auffahrunfälle“, also die Größe

$$\eta \equiv \frac{1}{\sqrt{2} \langle v \rangle_D} \int_0^{\pi/2} \langle \psi \rangle d\phi \quad (61)$$

für hohe Dimensionen verschwindet. Die folgende Tabelle zeigt die ersten 7 Werte.

D	η	\approx
2	$\frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi}$	9.1%
3	$\frac{1}{16} \frac{4+\sqrt{2}}{3+2\sqrt{2}}$	5.8%
4	$\frac{1}{4} - \frac{2}{3\pi}$	3.8%
5	$\frac{1}{128} \frac{130+93\sqrt{2}}{41+29\sqrt{2}}$	2.5%
6	$\frac{1}{4} - \frac{11}{15\pi}$	1.7%
7	$\frac{1}{512} \frac{7918+5599\sqrt{2}}{1393+985\sqrt{2}}$	1.1%
8	$\frac{1}{4} - \frac{16}{21\pi}$	0.7%

4 Bahnenwinkel

Die Geschwindigkeiten der Teilchen (im Schwerpunktsystem) sind isotrop verteilt. Sei \vec{u} entlang $-\vec{e}_D$ orientiert, so ist die Richtung eines beliebigen anderen Teilchens gleichverteilt (mit Dichte $1/S_D$) auf der Einheitskugel. Für den Bahnenwinkel β erhalten wir dann, indem wir in gewohnter Weise die zu \vec{e}_D rotationssymmetrischen Anteile ausintegrieren (vgl. Gleichungen (43), (45) und (56)), die Dichte $a_D(\beta)/S_D$. Diese „freie“ Dichte macht aber noch keine Aussage über die Statistik der vorkommenden β bei Kollisionen.

Im Abschnitt 3.1 hatten wir die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Stoßpartner nach Geschwindigkeitsbetrag und Richtung parametrisiert um die Beiträge aller Geschwindigkeiten zur Stoßfrequenz für eine feste Richtung in (22) aufzusummieren. Da λ aber von der Richtung gar nicht abhängt (was wir ja bereits zu seiner Verwendung

¹²Der Limes existiert allerdings nicht einmal im distributiven Sinne, da $\langle v \rangle_D$ wie $\sqrt{D/2}$ divergiert.

als Längeneinheit benutzt haben), ist es gar nicht zwingend, dass das Merkmal, für welches wir die Stoßfrequenz (durch Summation der Beiträge aller Geschwindigkeiten) bestimmen, das Merkmal *Richtung* ist. Nehmen wir beispielsweise an, die Kugeln hätten verschiedene Farben f , so könnten wir bei Kenntnis der entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichte $p(w, f)$ die Stoßfrequenz¹³ für eine feste Farbe vollkommen analog zu (22) bzw. (23) bestimmen.

Das uns hier interessierende Merkmal ist der Bahnenwinkel β , wir benötigen also die kombinierte Wahrscheinlichkeitsdichte $p(w, \beta)$. Für ein festes \vec{u} ist sie nach obigen Überlegungen durch die Verteilung von \vec{v} gegeben über

$$p(w, \beta) = \left| \frac{dw}{dv} \right|^{-1} p(v) \frac{a_D(\beta)}{S_D} , \quad (63)$$

wobei wir bereits ausgenutzt haben, dass die kombinierte Wahrscheinlichkeitsdichte für v und β faktorisiert. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(v)$ des Geschwindigkeitsbetrags v schließlich kennen wir bereits aus Gleichung (30).

Den Faktor

$$\frac{dw}{dv} = \frac{d}{dv} |\vec{v} - \vec{u}| = \frac{v + u \cos \beta}{\sqrt{v^2 + 2uv \cos \beta + u^2}} \quad (64)$$

benötigen wir eigentlich nicht (da wir sofort wieder über v integrieren werden), doch mit seiner Nullstelle bei $v^* \equiv -u \cos \beta$ weist er auf eine Subtilität für den Bereich $\beta > \pi/2$ hin. Dann nämlich steht bei $v = v^*$ die Relativgeschwindigkeit \vec{w} senkrecht auf \vec{u} und die Funktion $w(v)$ nimmt ein Minimum an. Tatsächlich ist v^* sogar Symmetriepunkt, wie man an

$$w^2 = (v - v^*)^2 + u^2 \sin^2 \beta \quad (65)$$

sieht. Das heißt, wenn beim Integrieren v von 0 bis $2v^*$ läuft (was eben nur für $\beta > \pi/2$ möglich ist), so wird jeder entsprechende Wert $w \in [u \sin \beta \dots u]$ *zweimal* angenommen. Das ist auch korrekt, denn jede Relativgeschwindigkeit in diesem Intervall kann realisiert werden, indem das Probeteilchen den Stoßpartner einholt oder auch umgekehrt, für $v > 2v^*$ dagegen ist immer nur letzteres der Fall (und für $\beta < \pi/2$ schließlich entfällt diese Unterscheidung ganz).

Bei der Berechnung der Stoßfrequenz

$$d\nu = \int_{v=0}^{\infty} w p(v) \frac{a_D(\beta)}{S_D} dv d\beta \quad (66)$$

kann der Faktor $a_D(\beta)$ vor das Integral gezogen werden, und so können wir, in völliger Analogie zum Kollisionswinkel, die β -Stoßfrequenzraumwinkeldichte

$$\varpi \equiv \int_0^{\infty} w \frac{p(v)}{S_D} dv \quad (67)$$

¹³Bzw. Stoßfrequenzdichte, falls f eine kontinuierliche Variable ist.

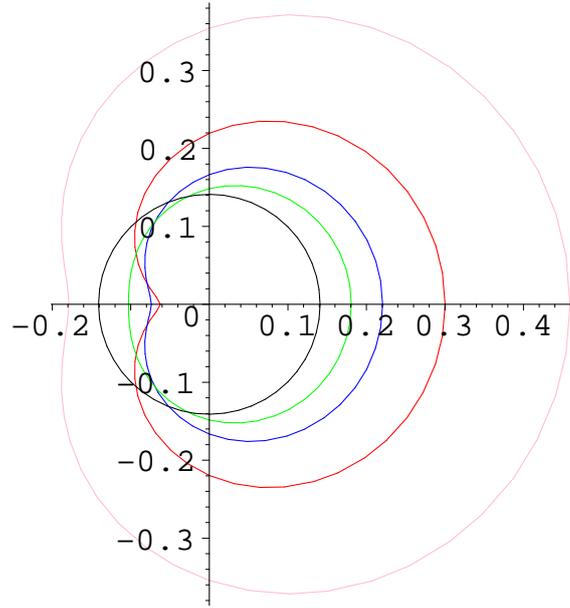


Abbildung 4: In zwei Dimensionen: Polardarstellung der winkelabhängigen β -Stoßfrequenzdichte ($\psi_\beta = \varpi$ in $D = 2$) entsprechend Gleichung (69) für ein Teilchen, das sich mit der Geschwindigkeit u nach rechts bewegt; der Winkel gibt dabei die Richtung an, aus der der Stoßpartner kommt (im Schwerpunktsystem!). Dargestellt sind die Fälle $u = 0$ (schwarz), $u = 1/4$ (grün), $u = 1/2$ (blau), $u = 1$ (rot) und $u = 2$ (pink).

und die β -Stoßfrequenzdichte

$$\Psi_\beta \equiv \frac{d\nu}{d\beta} = a_D(\beta)\varpi \quad (68)$$

definieren.

4.1 Extreme Geschwindigkeiten

Nun erlaubt das Integral

$$\varpi(u, \beta) = \pi^{-D/2} \int_0^\infty \sqrt{v^2 + 2vu \cos \beta + u^2} v^{D-1} \exp(-v^2) dv \quad , \quad (69)$$

welches für $D = 2$ in Abbildung 4 für einige u dargestellt ist, wegen der Wurzelfunktion nicht mehr für alle β und u eine geschlossene, analytische Darstellung. Ist jedoch $u \ll \langle v \rangle_D$ oder $u \gg \langle v \rangle_D$, so gelten diese Relationen auch im relevanten Bereich von $p(v)$ für v und wir können dort die Linearisierungen

$$w \approx v + u \cos \beta \quad (70)$$

bzw. $w \approx u + v \cos \beta \quad (71)$

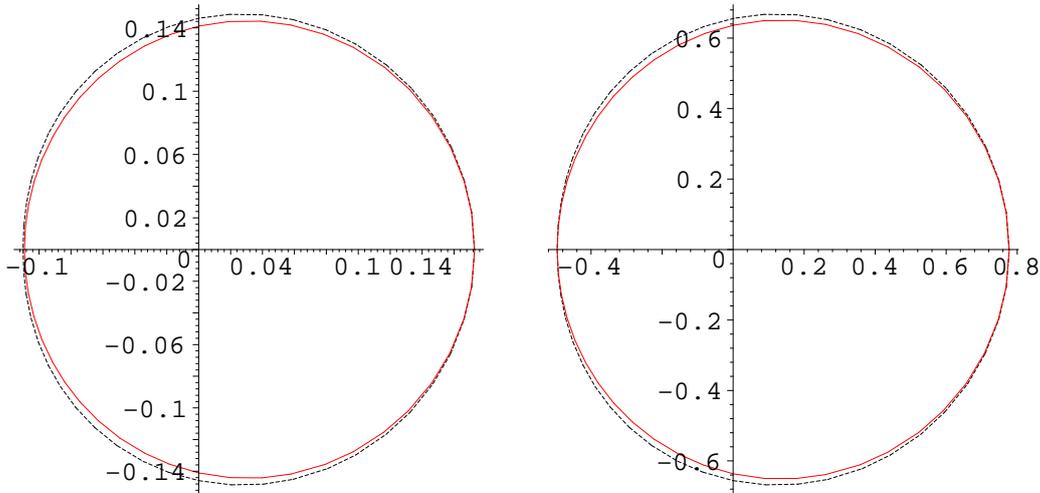


Abbildung 5: In zwei Dimensionen: Polardarstellung der β -Stoßfrequenzraumwinkel-dichte ϖ für kleine (links, $u = 1/5$) und große (rechts, $u = 4$) Geschwindigkeiten des nach rechts fliegenden Probeteilchens. Rot sind die Näherungen (72) und (73) eingezeichnet, schwarz gestrichelt dagegen die exakten (numerisch gewonnenen) Lösungen (69). Im Sinne der Näherungen sind es um u/S_D bzw. $\langle v \rangle_D/S_D$ nach rechts verschobene Kreise mit den Radien $\langle v \rangle_D/S_D$ bzw. u/S_D . Damit ist der Grad der Anisotropie das Verhältnis von Verschiebung zu Radius, also $u/\langle v \rangle_D$ bzw. $\langle v \rangle_D/u$.

verwenden, die sofort auf die in Abbildung 5 dargestellten Lösungen

$$\varpi \approx \frac{\langle v \rangle_D}{S_D} (1 + u/\langle v \rangle_D \cos \beta) \quad (72)$$

$$\text{bzw.} \quad \varpi \approx \frac{u}{S_D} (1 + \langle v \rangle_D/u \cos \beta) \quad (73)$$

führen. Im Gegensatz zum Verschwinden der Anisotropie für $u \rightarrow 0$ widerspricht selbiges für große u der Intuition, schließlich ist die Situation, die das Probeteilchen „sieht“, alles andere als isotrop. Deshalb gilt es sich nochmal darauf zu besinnen, was diese isotrope β -Stoßfrequenzraumwinkel-dichte bedeutet: Der nächste Stoßpartner des schnellen Probeteilchens kann praktisch eine beliebige Richtung haben; dass manche ihm (dem Probeteilchen) mit einer vergleichsweise winzigen, eigenen Geschwindigkeit entgegenkommen (oder sich von ihm entfernen), hat einen verschwindenden Einfluss.

Für ein Probeteilchen aus dem Gas ist diese Isotropie für große u nicht relevant (da es kaum Teilchen mit so einer großen Geschwindigkeit gibt), sie kann aber sehr wohl interessant sein bei Teilchen, die mit hoher Geschwindigkeit in das Gas hineingeschossen werden.

4.2 Vor und zurück

Für allgemeine u begnügen wir uns zur Charakterisierung der Anisotropie zunächst mit den beiden Winkeln $\beta = 0$ und $\beta = \pi$, da dort erwartungsgemäß (und bestätigt in Abbildung 4) die Anisotropie am größten ist, und sich für diese das Integral (69) noch leicht auswerten lässt.

Der Winkel $\beta = 0$ ist am einfachsten zu behandeln, denn für ihn entfällt mit $w = v + u$ die Betragsfunktion und so erhalten wir

$$\mathfrak{w}_0 \equiv \int_0^\infty w \frac{p(v)}{S_D} dv = \int_0^\infty (v+u) \frac{p(v)}{S_D} dv = \frac{\langle v \rangle_D + u}{S_D} , \quad (74)$$

ein höchst anschauliches Ergebnis.

Für $\beta = \pi$ verbleibt sie dagegen mit $w = |v - u|$ und wir erhalten

$$\begin{aligned} \mathfrak{w}_\pi &\equiv \int_0^\infty |v - u| \frac{p(v)}{S_D} dv \\ &= \int_u^\infty (v - u) \frac{p(v)}{S_D} dv + \int_0^u (u - v) \frac{p(v)}{S_D} dv \\ &= \frac{\langle v \rangle_D \gamma_{D+1}(u) - u \gamma_D(u)}{S_D} , \end{aligned} \quad (75)$$

mit

$$\gamma_D(u) \equiv 2 \frac{\Gamma(D/2, u^2)}{\Gamma(D/2)} - 1 \quad (76)$$

und der *unvollständigen* Γ -Funktion

$$\Gamma(z, T) \equiv \int_T^\infty t^{z-1} \exp(-t) dt , \quad (77)$$

welche also mit $\Gamma(z, 0) = \Gamma(z)$ eine Verallgemeinerung von (5) ist, womit gilt

$$\gamma_D(0) = 1 , \quad \gamma_D(\infty) = -1 . \quad (78)$$

Damit sorgt im Zähler von (75) die Funktion γ_D , die sich auch durch elementare Funktionen als beispielsweise

$$\gamma_1 = 2 \operatorname{erfc}(u) - 1 \quad (79)$$

$$\gamma_2 = 2 \exp(-u^2) - 1 \quad (80)$$

$$\gamma_3 = \frac{4u}{\sqrt{\pi}} \exp(-u^2) + \gamma_1 \quad (81)$$

ausdrücken lässt, für ein „weiches Umschalten“ von $\langle v \rangle_D - u$ für $u \ll \langle v \rangle_D$ auf $u - \langle v \rangle_D$ für $u \gg \langle v \rangle_D$, da diese beiden Grenzfälle natürlich mit $\beta = \pi$ in (72) und (73) übereinstimmen. Das dazwischen liegende Minimum (vgl. Abbildung 6) hat folgende physikalische Bedeutung: Da der Winkel $\beta = \pi$ für Kollisionen von Teilchen steht, die

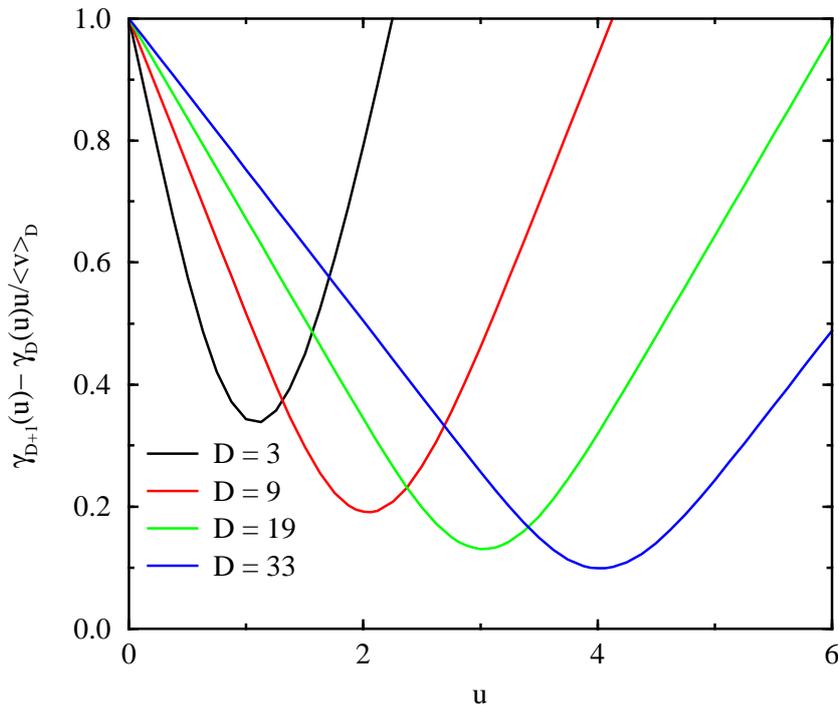


Abbildung 6: Die Funktion $\varpi_{\pi} S_D / \langle v \rangle_D$ für verschiedene D , vgl. (75).

in die selbe Richtung fliegen, minimiert das Probesteilchen seine zugehörige Stoßfrequenz, wenn es „mit dem Strom schwimmt“, also für $u \approx \langle v \rangle_D$. Für große D wird diese „Strategie“ immer effizienter (wegen der verschwindenden relativen Breite der Verteilung der Geschwindigkeitsbeträge, siehe (32)), es konvergiert ϖ_{π} dann gegen

$$\varpi_{\pi, \infty} \equiv \frac{|u - \langle v \rangle_D|}{S_D}, \quad (82)$$

siehe auch Abbildung 6.

Nun können wir für die beiden Richtungen $\beta = 0$ und $\beta = \pi$ noch über u entsprechend einer Gaußverteilung mitteln, wie wir es schon in (41) und (55) getan hatten. Der Fall $\beta = 0$ ergibt sich aus (74) trivial zu

$$\langle \varpi_0 \rangle = \frac{2 \langle v \rangle_D}{S_D}, \quad (83)$$

während für $\beta = \pi$ die Funktionen γ_D in die Mittelung einfließen:

$$\begin{aligned}\langle \mathfrak{O}_\pi \rangle &= \langle v \rangle_D \pi^{-D/2} \int_0^\infty \gamma_{D+1}(u) u^{D-1} \exp(-u^2) du \\ &\quad - \pi^{-D/2} \int_0^\infty \gamma_D(u) u^D \exp(-u^2) du \\ &= \frac{\langle v \rangle_D}{S_D} (2 - 4H_D \Gamma(D + 1/2))\end{aligned}\quad (84)$$

Dabei ist die Funktion H_D etwas umständlich auszuwerten, für gerade D als

$$H_D \equiv \frac{\sqrt{2}^{D/2-1}}{2^D} \sum_{k=0}^{D/2-1} \bar{\Gamma}(D-2k) \bar{\Gamma}(D+3+2k) \quad (85)$$

mit der Abkürzung

$$\bar{\Gamma}(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(z/2)} \quad , \quad (86)$$

und als

$$H_D \equiv \bar{\Gamma}(2D+1) - \frac{\sqrt{2}^{(D-1)/2}}{2^D} \sum_{k=0}^{(D-1)/2} \bar{\Gamma}(D+2+2k) \bar{\Gamma}(D+1-2k) \quad (87)$$

für ungerade D . Die ersten 6 Faktoren sehen folgendermaßen aus:

D	$2 - 4H_D \Gamma(D + 1/2)$	\approx
1	$2\sqrt{2} - 2$	0.828
2	$2 - \sqrt{2}$	0.586
3	$\frac{7}{4}\sqrt{2} - 2$	0.475
4	$2 - \frac{9}{8}\sqrt{2}$	0.409
5	$\frac{107}{64}\sqrt{2} - 2$	0.364
6	$2 - \frac{151}{128}\sqrt{2}$	0.332

(88)

Tatsächlich verschwindet dieser Faktor für große D wie $\sqrt{2/(\pi D)}$; das heißt aber nicht, dass in Richtung $\beta = \pi$ keine Stöße mehr stattfinden, denn der Vorfaktor $\langle v \rangle_D / S_D$ wächst noch stärker als \sqrt{D} .

4.3 Beliebige Winkel

Wie bereits erwähnt, ist (67), ausgeschrieben also (69), nicht mehr einfach analytisch auszudrücken. Noch schwieriger ist dann die Bestimmung von

$$\begin{aligned} \langle \varpi \rangle &= \int_0^\infty \varpi(u, \beta) \frac{S_D}{\pi^{D/2}} u^{D-1} \exp(-u^2) du \\ &= \frac{S_D}{\pi^D} \int_0^\infty \int_0^\infty \sqrt{v^2 + 2vu \cos \beta + u^2} (vu)^{D-1} \exp(-(v^2 + u^2)) dv du \quad , \quad (89) \end{aligned}$$

und wir müssen uns mit numerischer Integration begnügen. Abbildung 7 zeigt $\langle \varpi \rangle$ für unterschiedliche D .

Würden wir dies noch einmal über die Einheitskugel integrieren, so käme wie in (56) wieder $\sqrt{2} \langle v \rangle_D$ heraus, jedoch haben wir keinen analytischen Ausdruck für $\langle \varpi \rangle$. Nur für $D = 1$ können wir es leicht überprüfen, dort entartet die Integration zur Sum-

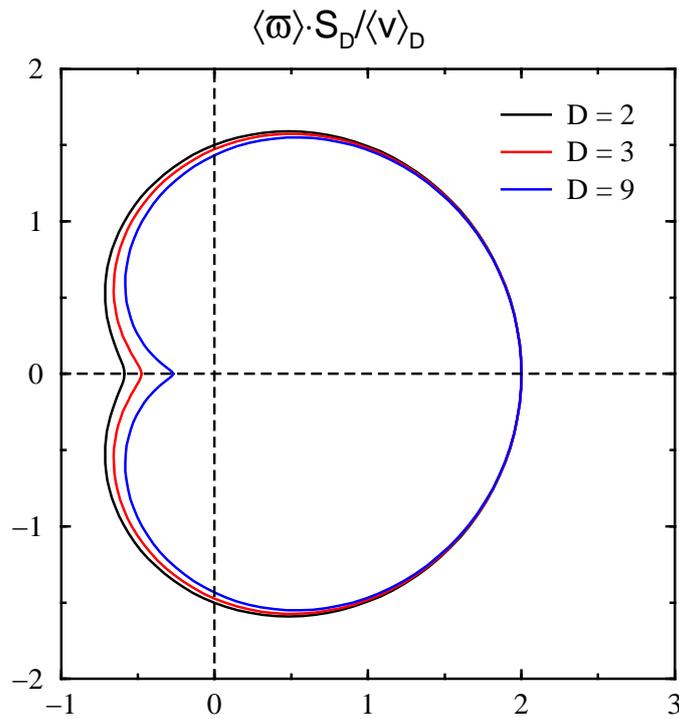


Abbildung 7: Die (mit $\langle v \rangle_D / S_D$ renormierte) mittlere β -Stoßfrequenzraumwinkeldichte $\langle \varpi \rangle$ für verschiedene D in Polardarstellung. Das Probeteilchen fliegt dabei nach rechts ($\beta = 0$). Deutlich erkennt man die für große D stärker werdende „Einschnürung“ bei $\beta = \pi$. Bei $\beta = 0$ dagegen liegt stets das Maximum. Der Teil unterhalb der Symmetrieachse dient allein der besseren visuellen Beurteilung der Anisotropie, tatsächlich wird nur $\beta \in [0 \dots \pi]$ betrachtet.

mation

$$\langle \varpi_0 \rangle + \langle \varpi_\pi \rangle = \frac{\langle v \rangle_1}{S_1} (2 + 2\sqrt{2} - 2) = \sqrt{2} \langle v \rangle_1 \quad . \quad (90)$$

4.4 β -Stoßfrequenzdichte

Die Betrachtung von

$$\langle \psi_\beta \rangle = a_D(\beta) \langle \varpi \rangle \quad (91)$$

ist für die im Abschnitt 4.2 untersuchten Winkel $\beta = 0$ und $\beta = \pi$ wenig sinnvoll, da (für $D > 2$) gerade dort der Faktor $a_D(\beta)$ verschwindet. Hier müssen wir uns also wiederum auf die numerische Integration von (89) beschränken, mit deren Hilfe aus (91) Abbildung 8 gewonnen wurde. Da die Winkelabhängigkeit von $\langle \varpi \rangle$ sich nur schwach mit D ändert, dominiert bei $\langle \psi_\beta \rangle$ schließlich der Faktor $a_D(\beta)$, also die Geometrie der Einheitskugel.

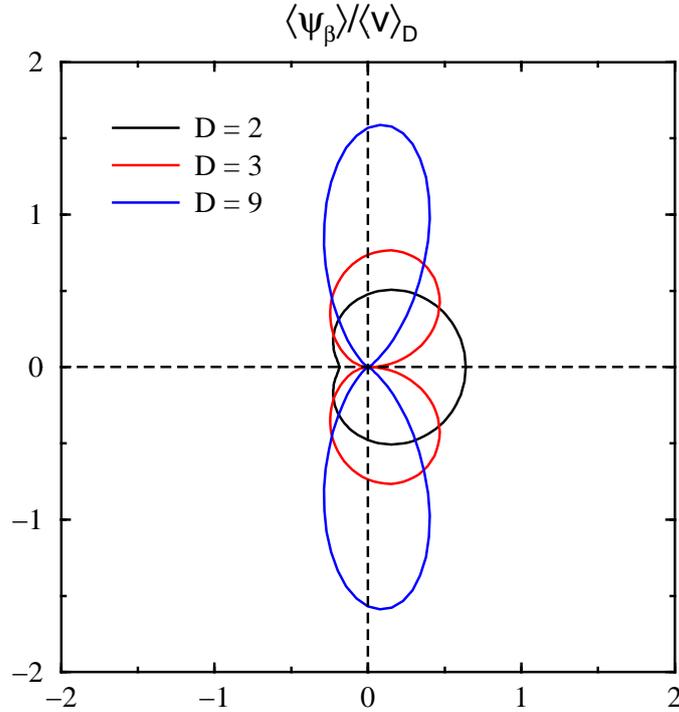


Abbildung 8: Die (mit $\langle v \rangle_D$ renormierte) mittlere β -Stoßfrequenzdichte $\langle \psi_\beta \rangle$ für verschiedene D in Polardarstellung. Das Probeteilchen fliegt dabei nach rechts ($\beta = 0$). In zwei Dimensionen treten am häufigsten Stöße mit $\beta = 0$ auf, während in $D = 3$ der Faktor $a_3(\beta)$ bewirkt, dass der wahrscheinlichste Wert $\beta \approx 1.26 \approx 72^\circ$ ist. Bezüglich des unteren Teils des Graphen gilt das Selbe wie für Abbildung 7.

4.5 Laborsystem

Anstatt uns auf ein Probeteilchen mit Geschwindigkeit u zu setzen, können wir natürlich auch im Laborsystem die Frage stellen, mit welcher Wahrscheinlichkeit(sdichte) die nächste Kollision zwischen zwei Teilchen mit vorgegebenen u und v einen Bahnenwinkel β aufweist. Da diese proportional zur Stoßfrequenz (und damit proportional zur Relativgeschwindigkeit) und proportional zu $a_D(\beta)$ ist, müssen wir in

$$p(\beta) = \frac{1}{\mathcal{N}_D} \sin^{D-2}(\beta) \sqrt{1 + \kappa \cos \beta} \quad (92)$$

mit

$$\kappa = \frac{2}{u/v + v/u} \quad , \quad (93)$$

wo wir alle β -unabhängigen Faktoren (als da wären: $\sqrt{u^2 + v^2}$, der Faktor S_{D-1} aus a_D , sowie die Größen des Stoßzylinders) bereits gekürzt haben, nur den Normierungsfaktor

$$\mathcal{N}_D(\kappa) = \int_0^\pi \sin^{D-2}(\beta) \sqrt{1 + \kappa \cos \beta} d\beta \quad (94)$$

als Funktion von κ , dem Parameter der Geschwindigkeitsähnlichkeit ($\kappa = 1 \Leftrightarrow u = v$, $\kappa = 0 \Leftrightarrow u$ und v maximal verschieden), bestimmen. Für ungerade D können wir das Ergebnis elementar ausdrücken als

$$\mathcal{N}_D(\kappa) = C_{D-2}^+(\kappa) - C_{D-2}^-(\kappa) \quad (95)$$

mit

$$C_n^\pm(\kappa) \equiv 2 \frac{(1 \pm \kappa)^{3/2}}{3\kappa} \sum_{j=0}^{\frac{n-1}{2}} \binom{\frac{n-1}{2}}{j} \frac{(-1)^j}{\kappa^{2j}} {}_2F_1(-2j, 3/2; 5/2; 1 \pm \kappa) \quad (96)$$

wobei „elementar“ nur deshalb gerechtfertigt ist, weil die hypergeometrische Funktion ${}_2F_1$ hier wegen $-2j \in \mathbb{Z}_0^-$ stets zu Polynomen vom Grad $2j$ entartet:

$${}_2F_1(0, 3/2; 5/2; x) = 1 \quad (97)$$

$${}_2F_1(-2, 3/2; 5/2; x) = 1 - \frac{6}{5}x + \frac{3}{7}x^2 \quad (98)$$

$${}_2F_1(-4, 3/2; 5/2; x) = 1 - \frac{12}{5}x + \frac{18}{7}x^2 - \frac{4}{3}x^3 + \frac{3}{11}x^4 \quad (99)$$

⋮

Für gerade D dagegen kann \mathcal{N}_D nur durch die Vollständigen Elliptischen Integrale $K(k)$ und $E(k)$ ausgedrückt werden.

Konkret ist

$$\mathcal{N}_2(\kappa) = 2\sqrt{1+\kappa}E\left(\sqrt{\frac{2\kappa}{1+\kappa}}\right) \quad (100)$$

$$C_1^+(\kappa) - C_1^-(\kappa) = \mathcal{N}_3(\kappa) = 2\frac{(1+\kappa)^{3/2} - (1-\kappa)^{3/2}}{3\kappa} \quad (101)$$

Den Fall $D = 3$ können wir als

$$p(\beta) = \frac{3\kappa \sin \beta \sqrt{1+\kappa \cos \beta}}{2(1+\kappa)^{3/2} - 2(1-\kappa)^{3/2}} \quad , \quad (102)$$

leicht integrieren und erhalten

$$\begin{aligned} P(\beta) &= \int_0^\beta p(\beta') d\beta' \\ &= \frac{(1+\kappa)^{3/2} - (1+\kappa \cos \beta)^{3/2}}{(1+\kappa)^{3/2} - (1-\kappa)^{3/2}} \\ (q \equiv 1/\kappa) \quad &= \frac{(q+1)^{3/2} - (q + \cos \beta)^{3/2}}{(q+1)^{3/2} - (q-1)^{3/2}} \quad , \end{aligned} \quad (103)$$

was sich sogar nach β auflösen lässt:

$$\beta = \arccos \left(\left[(q-1)^{3/2}P + (q+1)^{3/2}(1-P) \right]^{2/3} - q \right) \quad (104)$$

5 Wirkung des Stoßes

Bis jetzt wurde immer nur die Stoßfrequenz (im Gleichgewicht) betrachtet, nicht aber, welche Auswirkungen ein Stoß haben soll. Das holen wir jetzt nach.

5.1 Impuls-/Energieerhaltung

Die zwei Teilchen mit Einheitsmasse mögen die Geschwindigkeiten \vec{u} und \vec{v} besitzen, im Schwerpunktsystem mit Geschwindigkeit $\vec{c} = (\vec{u} + \vec{v})/2$ also

$$\vec{u}_{\text{com}} = \vec{u} - \vec{c} = (\vec{u} - \vec{v})/2 = -\frac{\vec{w}}{2} \quad (105)$$

$$\vec{v}_{\text{com}} = \vec{v} - \vec{c} = (\vec{v} - \vec{u})/2 = \frac{\vec{w}}{2} = -\vec{u}_{\text{com}} \quad , \quad (106)$$

und damit natürlich $\vec{u}_{\text{com}} + \vec{v}_{\text{com}} = 0$ als Impuls und $u_{\text{com}}^2 = v_{\text{com}}^2 = w^2/4$ als (doppelte kinetische) Energie.

Durch einen Stoß werden $\vec{u}_{\text{com}} \rightarrow \vec{U}_{\text{com}}, \vec{v}_{\text{com}} \rightarrow \vec{V}_{\text{com}}$, mit $-\vec{U}_{\text{com}} = \vec{V}_{\text{com}}$ bei Impuls- und $U_{\text{com}}^2 = V_{\text{com}}^2 = w^2/4$ bei Energieerhaltung (d.h. im Schwerpunktsystem findet dann nur eine Drehung statt). Im Laborsystem verteilen sich die kinetischen Energien somit von vorher

$$u^2 - v^2 = 4\vec{u}_{\text{com}} \cdot \vec{c} \quad (107)$$

auf nachher

$$U^2 - V^2 = 4\vec{U}_{\text{com}} \cdot \vec{c} \quad (108)$$

5.2 Billardstoß

Jeder Stoß des Typs

$$\vec{u}_{\text{com}} = \vec{u}' + \vec{u}'' \quad (109)$$

$$\rightarrow \vec{U}_{\text{com}} = -\vec{u}' + \vec{u}'' \quad (110)$$

$$\Rightarrow \vec{u}_{\text{com}} - \vec{U}_{\text{com}} = 2\vec{u}' \quad (111)$$

mit

$$\vec{u}' \cdot \vec{u}'' = 0 \quad (112)$$

und daher

$$\begin{aligned} \Delta &\equiv U^2 - u^2 \\ &= 2[(U^2 - V^2) - (u^2 - v^2)] \end{aligned} \quad (113)$$

$$= 2(\vec{U}_{\text{com}} - \vec{u}_{\text{com}}) \cdot \vec{c} = -4\vec{u}' \cdot \vec{c} \quad (114)$$

erfüllt Impuls- und Energieerhaltung. Ein Spezialfall hiervon ist der „Billardstoß“ mit

$$\vec{u}' = (\vec{n} \cdot \vec{u}_{\text{com}})\vec{n} \quad (115)$$

wobei

$$\vec{n} \equiv \vec{s}/2R \quad (116)$$

mit \vec{s} aus (8) die Kontaktnormale ist. Damit haben wir

$$\begin{aligned} \Delta &= U^2 - u^2 \\ &= -\vec{n} \cdot (\vec{u} - \vec{v}) \vec{n} \cdot (\vec{u} + \vec{v}) \\ &= (\vec{v} \cdot \vec{n})^2 - (\vec{u} \cdot \vec{n})^2 \end{aligned} \quad (117)$$

Für den Spezialfall des Stoßes in $D = 3$ wählen wir ein kartesisches KS mit

$$\vec{c} \cdot \vec{e}_x > 0 \quad (118)$$

$$\vec{u} \cdot \vec{e}_y = \vec{v} \cdot \vec{e}_y = 0 \quad (119)$$

$$\vec{w} = w\vec{e}_z \quad (120)$$

was

$$u_x = v_x = \frac{uv \sin \beta}{w} \quad (121)$$

$$u_y = v_y = 0 \quad (122)$$

$$u_z = -u \frac{u + v \cos \beta}{w} \quad (123)$$

$$v_z = v \frac{u \cos \beta + v}{w} \quad (124)$$

impliziert. Während wir gemäß (119) die von den beiden Geschwindigkeiten aufgespannte Ebene als xz -Ebene gewählt haben, wird der Normalenvektor \vec{n} i.A. nicht in dieser Ebene liegen. Formulieren wir ihn in Kugelkoordinaten, so ist der Polarwinkel gerade der Streifwinkel χ , den Azimutwinkel $\in [0 \dots 2\pi)$ nennen wir α :

$$n_x = \cos \alpha \sin \chi \quad (125)$$

$$n_y = \sin \alpha \sin \chi \quad (126)$$

$$n_z = \cos \chi \quad (127)$$

Wie bereits in Kapitel 2 diskutiert, ist wegen der gleichwahrscheinlichen parallelen Bahnen die Situation rotationssymmetrisch bezüglich \vec{e}_z , d.h. α ist isotrop verteilt mit

$$p(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \quad (128)$$

Setzen wir nun (121) bis (127) in (117) ein, so liefert das

$$\Delta = uv \sin \beta \cos \alpha \sin 2\chi + (v^2 - u^2) \cos^2 \chi \quad (129)$$

Bemerkung: Die augenscheinlich fehlende Antimetrie bezüglich u/v -Vertauschung rührt daher, dass für diese Vertauschung \vec{n} in $-\vec{n}$ übergehen muss, was nur partiell „automatisch“ geschieht, da \vec{e}_x im Gegensatz zu $\vec{e}_z \rightarrow -\vec{e}_z$ erhalten bleibt. D.h. für die Vertauschung muss noch $n_x \rightarrow -n_x$ also $\cos \alpha \rightarrow -\cos \alpha$ durchgeführt werden, womit die Antimetrie erfüllt ist. M.a.W.: Vertauscht man nur die Werte von u und v , so handelt es sich i.A. tatsächlich um eine andere physikalische Situation.

5.2.1 Extremale Billardstöße

Die gemeinsamen Nullstellen von

$$\partial_\beta \Delta = uv \cos \beta \cos \alpha \sin 2\chi \quad (130)$$

$$\partial_\alpha \Delta = -uv \sin \beta \sin \alpha \sin 2\chi \quad (131)$$

$$\partial_\chi \Delta = 2uv \sin \beta \cos \alpha \cos 2\chi - (v^2 - u^2) \sin 2\chi \quad (132)$$

geben Auskunft über Spezialfälle. Es dominiert die Bedingung $\sin 2\chi = 0$, was bedeutet, dass $\chi = 0$ stets einen Zentralstoß mit $\Delta = v^2 - u^2$ (d.h. $U^2 = v^2$, $V^2 = u^2$, also einen Rollentausch) und $\chi = \pi/2$ stets einen Streifstoß mit $\Delta = 0$ impliziert. Letzterer wird ebenfalls erreicht bei $u = v$ zusammen mit $\alpha \in \{\pi/2, 3\pi/2\}$.

Am interessantesten sind jedoch die beiden Fälle $\beta = \pi/2$, $\alpha \in \{0, \pi\}$, die auf die Bedingung

$$\cot 2\chi = \pm \frac{v/u - u/v}{2} \quad 14 \quad (133)$$

$$\Rightarrow \sin 2\chi = \frac{2}{v/u + u/v} \quad (134)$$

$$\wedge \cos 2\chi = \pm \frac{v/u - u/v}{v/u + u/v} \quad , \quad (135)$$

führen, was bedeutet

$$\begin{aligned} \Delta &= \pm uv \frac{2}{v/u + u/v} + \frac{v^2 - u^2}{2} \left(1 \pm \frac{v/u - u/v}{v/u + u/v} \right) \\ &= \frac{(1 \pm 1)v^4 \pm 2u^2v^2 - (1 \mp 1)u^4}{2(v^2 + u^2)} \end{aligned} \quad (136)$$

d.h.

$$\alpha = 0: \quad \Delta = v^2 \quad \Leftrightarrow \quad V^2 = 0 \quad (137)$$

$$\alpha = \pi: \quad \Delta = -u^2 \quad \Leftrightarrow \quad U^2 = 0 \quad . \quad (138)$$

Für jede Kombination von u und v ist es also im Prinzip möglich, dass die maximale Energiedifferenz, d.h. $UV = 0$ erreicht wird. Dazu müssen allerdings die beiden Trajektorien in einer Ebene liegen ($\alpha \in \{0, \pi\}$), und es muss sich um einen „Senkrechtstoß“ ($\beta = \pi/2$) handeln. Bei stark unterschiedlichen u, v ist dann noch ein beinahe-Streifstoß ($\chi \lesssim \pi/2$, Fall ohne Rollentausch) oder ein beinahe-Zentralstoß ($\chi \gtrsim 0$, Fall mit Rollentausch) notwendig. Hieraus lässt sich schon schließen, dass solche Fälle extrem selten sind. Der Statistik solcher Energieumverteilungen gehen wir jetzt nach.

5.2.2 Statistik des Energieübertrags

Die Rotationssymmetrie (128) bedingt sofort, dass beim Mitteln von Δ über α der erste Term in (129) verschwindet und mit ihm die β -Abhängigkeit von Δ . Einen Beitrag liefert also nur die χ -Mittelung über den zweiten Term, die gemäß (15) zu

$$\langle \Delta \rangle_{\alpha, \beta, \chi} = \frac{v^2 - u^2}{2} \quad (139)$$

¹⁴Das obere Vorzeichen steht für $\alpha = 0$, das untere für $\alpha = \pi$.

führt. Daraus folgt mit (113), dass im Mittel $U^2 - V^2$ Null wird, die kinetischen Energien im Mittel also genau angeglichen werden.

Vereinbaren wir nun o.b.d.A. dass $v > u$, so können wir die interessantere Frage nach $V^2 - U^2 > v^2 - u^2 \Leftrightarrow \Delta < 0$ oder $U^2 - V^2 > v^2 - u^2 \Leftrightarrow \Delta > v^2 - u^2$, also der Vergrößerung dieses Geschwindigkeitsunterschieds, stellen.

Gemäß (129) bedeutet das

$$\Delta < 0 \Leftrightarrow \cos \alpha < 0 \quad \wedge \quad \tan \chi > \frac{v/u - u/v}{-2 \cos \alpha \sin \beta} \quad (140)$$

bzw.

$$\Delta > v^2 - u^2 \Leftrightarrow \cos \alpha > 0 \quad \wedge \quad \cot \chi > \frac{v/u - u/v}{2 \cos \alpha \sin \beta} \quad (141)$$

Da wir aus (15) wissen, dass (in $D = 3$)

$$P(<\chi) = \sin^2 \chi \quad (142)$$

und damit

$$P(>\chi) = \cos^2 \chi \quad (143)$$

gilt, können wir die entsprechenden (bedingten) Wahrscheinlichkeiten angeben:

$$P(\Delta < 0 | \alpha, \beta, u, v) = \Theta(-\cos \alpha) \left(1 + \frac{(v/u - u/v)^2}{4 \cos^2 \alpha \sin^2 \beta} \right)^{-1} \quad (144)$$

$$P(\Delta > v^2 - u^2 | \alpha, \beta, u, v) = \Theta(\cos \alpha) \left(1 + \frac{(v/u - u/v)^2}{4 \cos^2 \alpha \sin^2 \beta} \right)^{-1} \quad (145)$$

Zusammengefasst beträgt die Wahrscheinlichkeit P für eine Vergrößerung des Geschwindigkeitsunterschieds (unter der Bedingung der Werte für α, β, u und v) also

$$P(\alpha, \beta, u, v) = \left(1 + \frac{(v/u - u/v)^2}{4 \cos^2 \alpha \sin^2 \beta} \right)^{-1}, \quad (146)$$

was wir mit (128) zu

$$P(\beta, u, v) = 1 - \left(1 + \frac{4 \sin^2 \beta}{(v/u - u/v)^2} \right)^{-1/2} \quad (147)$$

mitteln können und dies wiederum mit (102) zu

$$P(u, v) = \frac{4}{3v^2/u^2 + 1} \quad (148)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein vorhandener Geschwindigkeitsunterschied noch größer wird, nimmt also *quadratisch schnell* ab. Für den Gleichgewichtswert¹⁵

$$\left\langle \frac{v^2}{u^2} \right\rangle_{D=3} = 3 \quad (149)$$

beträgt sie bereits $P = 2/5$.

5.3 Andere Stöße

Allgemeiner betrachtet sind wir nicht gezwungen, impuls- und energieerhaltende Stöße allein entsprechend (109)+(110) formulieren, sondern können z.B., wenn auch ohne einen physikalischen Mechanismus zu nennen, \vec{U}_{com} so konstruieren, dass die Differenz der kinetischen Energien gemäß (108) extremal wird:

$$\vec{U}_{\text{com}} = \pm u_{\text{com}} \frac{\vec{c}}{c} \quad , \quad (150)$$

d.h. \vec{U}, \vec{V} und \vec{c} sind damit parallel. Von den beiden Lösungen erfüllt nur eine die Reflektionsbedingung

$$(\vec{u}_{\text{com}} \cdot \vec{n})(\vec{U}_{\text{com}} \cdot \vec{n}) \leq 0 \quad , \quad (151)$$

in der \vec{n} wieder die Kontaktnormale ist. Wenn für diese

$$(\vec{U}_{\text{com}} \cdot \vec{c})(\vec{u}_{\text{com}} \cdot \vec{c}) < 0 \quad (152)$$

gilt, dann ist zwar

$$|U^2 - V^2| \geq |u^2 - v^2| \quad \text{aber} \quad (U^2 - V^2)(u^2 - v^2) \leq 0 \quad , \quad (153)$$

die kinetischen Energien wurden also „getauscht“.

Mit derartig konstruierten Stößen ist natürlich die für die Thermalisierung nötige Voraussetzung des „molekularen Chaos“ nicht gegeben. Stattdessen überträgt sich die komplette Energie des Systems im Laufe der Zeitentwicklung auf nur ein Teilchen (dessen Identität aber wechselt).

Will man das Tauschen in (152) verhindern, so kann (151) bestenfalls durch

$$\vec{U}_{\text{com}} \perp \vec{n} \quad (154)$$

erfüllt werden, es ist dann von diesen Lösungen (zwei für $D = 2$) die Richtung zu wählen, die $\vec{U}_{\text{com}} \cdot \vec{c}$ maximiert. Dies ist die Richtung von

$$\vec{c}_t \equiv \vec{c} - (\vec{n} \cdot \vec{c})\vec{n} \quad , \quad (155)$$

also die Projektion der Schwerpunktsgeschwindigkeit in die Kontaktebene.

¹⁵Obacht: Wir haben hier *nicht* (102) gemittelt.

6 Simulation des HKGs

6.1 „Ortslos“

Eine wenig aufwändig zu simulierende Vereinfachung des Gases aus harten Kugeln besteht darin, nur deren Geschwindigkeiten zu betrachten. Anschließend macht man die „mean field“-Annahme, dass der nächste Stoß im Prinzip zwischen jedem Paar stattfinden könnte, dass also für jede Kugel sämtliche Stoßpartner im Abstand λ im Stoßzylinder vorlägen. Dann ist es nur eine Frage der Relativgeschwindigkeit, der Stoß mit *welchem* Partner nun tatsächlich stattfindet. Im Sinne einer *Monte-Carlo*-Simulation wählt man also das nächste kollidierende Paar zufällig, und zwar mit einer Wahrscheinlichkeit proportional zum Betrag seiner Relativgeschwindigkeit.

Wegen des Fehlens jeder räumlichen Information muss die Stoßgeometrie ebenfalls zufällig konstruiert werden. Unter der Annahme der Homogenität sind die Bahnen wieder gleichverteilt (siehe Abschnitt 2) und der Streifwinkel kann entsprechend Gleichung (15) zufällig gewählt werden. Ist dieser dann gegeben, hat man alle benötigten Informationen um die Kugeln eine elastische Kollision erleiden zu lassen.

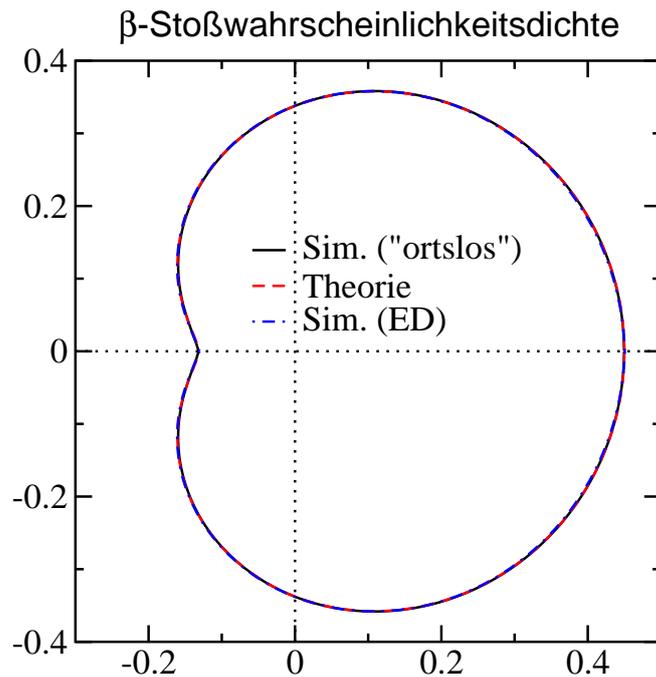


Abbildung 9: Polardarstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte für einen Stoß mit Bahnenwinkel β . Theorie (mit $\sqrt{2}\langle v \rangle_D$ renormiertes $\langle \psi_\beta \rangle$) und Simulation von 10^6 Kollisionen unter 10^4 Kugeln in $D = 2$ – einmal „ortslos“, einmal exakt (siehe Abschnitt 6.2) – stimmen perfekt überein. Bezüglich des unteren Teils des Graphen gilt das Selbe wie für die Abbildungen 7 und 8.

Abbildung 9 zeigt ein Ergebnis einer solchen Simulation mit 10^4 „Kugeln“ in $D = 2$. Die Richtungen der Geschwindigkeiten der Kugeln zu Beginn wurden isotrop zufällig ausgewählt, der Betrag war für alle gleich ($v = 1$). Danach wurden 10^6 Kollisionen durchgeführt um das System zu thermalisieren, anschließend wurde während weiterer 10^6 Kollisionen die Statistik des Bahnenwinkels β gemessen¹⁶. Die in Abbildung 9 zu sehende Übereinstimmung mit der Theorie erstaunt nicht, zeigt aber, dass richtig gerechnet wurde.

Am Ende der Simulation wurde außerdem ein Histogramm der Geschwindigkeiten aufgenommen. In $D = 2$ ist gemäß (30) die Verteilungsfunktion

$$\int_0^v dP = 1 - \exp(-v^2) \quad (156)$$

zu erwarten. Abbildung 10 zeigt die perfekte Übereinstimmung zwischen (156) und der Simulation: Das „ortslose“ Gas harter Kugeln befand sich also im Gleichgewicht.

¹⁶Die aus der Simulation stammende Wahrscheinlichkeitsdichte wurde dadurch ermittelt, dass zunächst ihr Integral durch ein Polynom 7. Grades approximiert und dieses anschließend differenziert wurde.

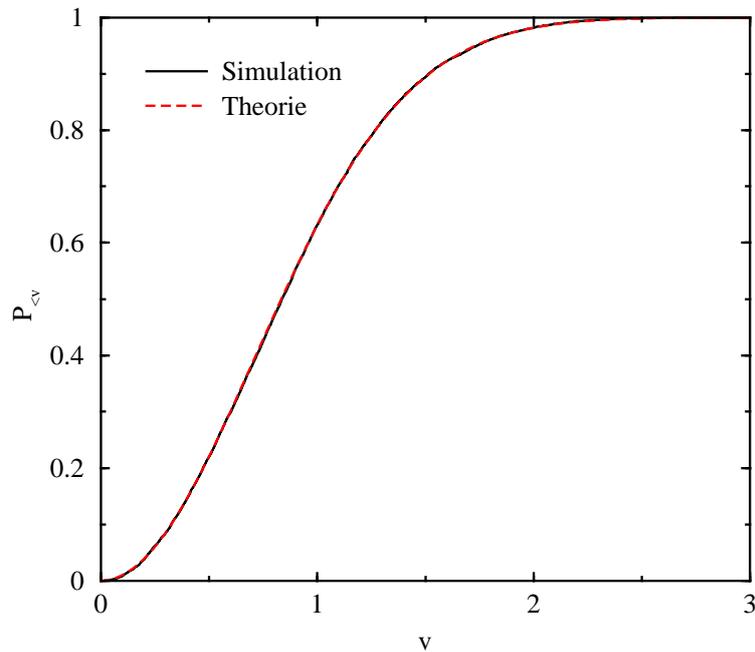


Abbildung 10: Die Wahrscheinlichkeit, in zwei Dimensionen ein Teilchen mit einer Geschwindigkeit $< v$ anzutreffen. Im Gleichgewicht (Maxwellverteilung) gilt $P = 1 - \exp(-v^2)$, womit die Simulation perfekt übereinstimmt (10^4 Teilchen nach $2 \cdot 10^6$ Kollisionen).

6.2 Exakt

Um sich zu vergewissern, dass die „ortslose“ Simulation eine angemessene Beschreibung des (homogenen!) HKGs ist, ist ein Vergleich mit dessen exakter Dynamik die naheliegendste Vorgehensweise. Die beste Simulationsmethode, um das HKG exakt abzubilden, ist die ereignisgesteuerte (*event driven*, ED) Dynamik. Hier wird die Zeitentwicklung des Systems in der Zeitspanne zwischen zwei Stößen, die da ja nur aus geradlinigen Trajektorien besteht, analytisch gehandhabt und anschließend die nächste Kollision entsprechend eines vorgegebenen Stoßgesetzes in physikalischer Nullzeit durchgeführt. Methodisch anspruchsvoll ist dabei allein die Vorhersage des nächsten Kollisionspaars, wofür bereits 1991 ein effizienter Algorithmus vorgestellt wurde (siehe B.D. Lubachevsky: *How to Simulate Billiards and Similar Systems* in Band 94 des *Journal of Computational Physics*, Jahrgang 1991). ED-Simulationen gehören heutzutage zum Standardwerkzeug der statistischen Physik und entsprechende Codes sind z.T. frei verfügbar, wie z.B. `dynca` von Renaud Lambiotte¹⁷. Mit eben diesem Code wurde eine Simulation in $D = 2$ mit 10^4 Teilchen in einem quadratischen System der Kantenlänge $L = 1000R$ mit periodischen Randbedingungen durchgeführt. Nach Initialisierung und Thermalisierung wurde eine Statistik von β aus 10^6 Stößen erstellt. Das Ergebnis ist in Abb. 9 (blau) dargestellt; es bestätigt die Theorie und die „ortslose“ Simulation aufs Beste.

¹⁷<http://www.lambiotte.be/java.html>

A Skalierungsverhalten

Ersetzen wir den Teilchenradius R durch cR , wobei c ein Zahlenfaktor ist, und gleichermaßen die Anzahldichte ρ durch $c^{-D}\rho$, so ändert sich bei Variation des Parameters c nur die Skala, nicht aber die Konfiguration des Systems. Es entspricht lediglich einem Blick durch ein Tele- ($c > 1$) bzw. Weitwinkelobjektiv ($c < 1$). Solange aber die mittlere Geschwindigkeit gleich bleibt, wird im System $c < 1$ alles schneller ablaufen (weil die Abstände dort kleiner sind), bzw. in dem mit $c > 1$ alles langsamer. Wenn wir jetzt also noch sämtliche Geschwindigkeiten mit c multiplizieren und damit σ durch $c\sigma$ ersetzen, können wir vermöge c das System vergrößern und verkleinern, ohne dass sich an seinem physikalischen Verhalten irgend etwas änderte.

Diese Eigenschaft muss sich in unseren Betrachtungen natürlich ebenfalls widerspiegeln. Da die dimensionslosen Größen und Gleichungen vollkommen parameterfrei sind, könnte c nur über die Einheit der Frequenz (bzw. der Zeit) Einfluss nehmen. Radius und Dichte gehen nur über λ in Gleichung (22) ein, erwartungsgemäß tritt an dessen Stelle $c\lambda$. Da die Zeiteinheit durch λ/σ gegeben ist (siehe Fußnote auf Seite 7), kürzt sich in ihr der Faktor c heraus und so ist die Stoßfrequenz tatsächlich völlig unabhängig von diesem Skalenparameter.

B Relativgeschwindigkeiten

Wir beginnen mit dem eindimensionalen Gas, dessen Geschwindigkeit (im Schwerpunktsystem) also gemäß

$$dP_v = \pi^{-1/2} \exp(-v^2) dv \quad (157)$$

verteilt ist¹⁸. Im Bezugssystem, das sich mit u gegenüber dem Schwerpunkt bewegt, ist die Verteilung der Relativgeschwindigkeit $w = v - u$ daher

$$dP_w(u) = \pi^{-1/2} \exp(-(w+u)^2) dw \quad . \quad (158)$$

Nun mitteln wir über u , das der selben Verteilung wie v gehorcht:

$$\begin{aligned} dP_w &= \int_{u=-\infty}^{\infty} \pi^{-1/2} \exp(-u^2) dP_w(u) du \\ &= \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-2(u^2 + uw + w^2/2)) dw du \\ &= \pi^{-1} \exp(-w^2/2) dw \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-2(u + w/2)^2) du}_{\sqrt{\pi/2}} \\ &= (2\pi)^{-1/2} \exp(-w^2/2) dw \end{aligned} \quad (159)$$

¹⁸Auch hier sind die Geschwindigkeiten in Einheiten von σ gegeben.

Die Relativgeschwindigkeiten sind also auch Gauß-verteilt, jedoch mit einer doppelten „Temperatur“, d.h. $\langle w^2 \rangle = 2\langle v^2 \rangle$.

In D Dimensionen schreiben wir genauso

$$\begin{aligned}
 d^D P_w(u) d^D P_u &= \pi^{-D/2} \exp\left(-\sum_{i=1}^D (w_i^2 + 2w_i u_i + u_i^2)\right) \\
 &\times \pi^{-D/2} \exp\left(-\sum_{i=1}^D u_i^2\right) d^D \vec{w} d^D \vec{u} \\
 &= \pi^{-D} \prod_{i=1}^D \exp\left(-\left(2u_i^2 + 2u_i w_i + w_i^2\right)\right) dw_i du_i \quad , \quad (160)
 \end{aligned}$$

um nach Integration über alle (unabhängigen) u_i ebenfalls

$$d^D P_w = (2\pi)^{-D/2} \exp(-w^2/2) d^D \vec{w} \quad (161)$$

zu erhalten.