計算物理 WS　マクスウェル・ボルツマン分布

1　マクスウェル・ボルツマン分布を数値的に導く

今回は 2 次元のマクスウェル・ボルツマン分布を考えよう。

1.1　2 次元のマクスウェル・ボルツマン分布

2 次元の場合、質量 m の粒子のエネルギー e と運動量 $\vec{p} = (p_x, p_y)$ の関係は、

$$e = \frac{\left|\vec{p'}\right|^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} \tag{1}$$

と書ける。ここで、ポテンシャルエネルギーは全空間で 0 としている。全エネルギー、全粒子数が一定であるミクロカノニカル分布を考えると、座標 $q_x \sim q_x + dq_x,\ q_y \sim q_y + dq_y$、運動量 $p_x \sim p_x + dp_x,\ p_y \sim p_y + dp_y$ の領域に存在する粒子数は、

$$n(\vec{q}, \vec{p}) \propto \exp\left[-\frac{p_x^2 + p_y^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right] \tag{2}$$

となる。全系の粒子数が N の時、

$$N = \iiiint n(\vec{q}, \vec{p}) dq_x dq_y dp_x dp_y \tag{3}$$

と書け、

$$\sqrt{\frac{\pi}{a}} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \tag{4}$$

を用いて、単位面積あたりの $n(\vec{q}, \vec{p})$ を $n(\vec{p})$ と書くと、

$$n(\vec{p}) = \frac{N/S}{2\pi mk_\mathrm{B}T} \exp\left[-\frac{p_x^2 + p_y^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right] \tag{5}$$

となる。ここで $S = \iint dq_x dq_y$ である。ここで、エネルギーが $e \sim e + de$ の領域にある粒子数を $F(e)$ とすると、$p = |\vec{p}|$ を用いて、

$$F(e)de = n(\vec{p})dp_x dp_y = \frac{N/S}{2\pi mk_\mathrm{B}T} \exp\left[-\frac{p^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right] 2\pi p dp \tag{6}$$

とかける。$p = \sqrt{2me}$ に注意すると、

$$F(e)de = \frac{N/S}{k_\mathrm{B}T} \exp\left[-\frac{e}{k_\mathrm{B}T}\right] \tag{7}$$

となる。

1.2　粒子の衝突

2 次元空間において粒子が弾性衝突を行う。ここで、2 粒子間の衝突のみ考えればよいとし、衝突前の運動から衝突後の運動を求めよう。2 個の粒子 1,2 の座標、運動量をそれぞれ $\vec{q_1} = (q_{1x}, q_{1y}), \vec{p_1} = (p_{1x}, p_{1y}), \vec{q_2} = (q_{1x}, q_{1y}), \vec{p_2} = (p_{2x}, p_{2y})$ とすると、その相対座標は $\vec{q} = \vec{q_2} - \vec{q_1} = (q_x, q_y)$、相対運動の運動量を $\vec{p} = \vec{p_2} - \vec{p_1} = (p_x, p_y)$ となる。そして、相対距離が粒子のサイズ a より小さくなったとき $(|\vec{q}| < a)$ に衝突するとする。図 1 のような状況

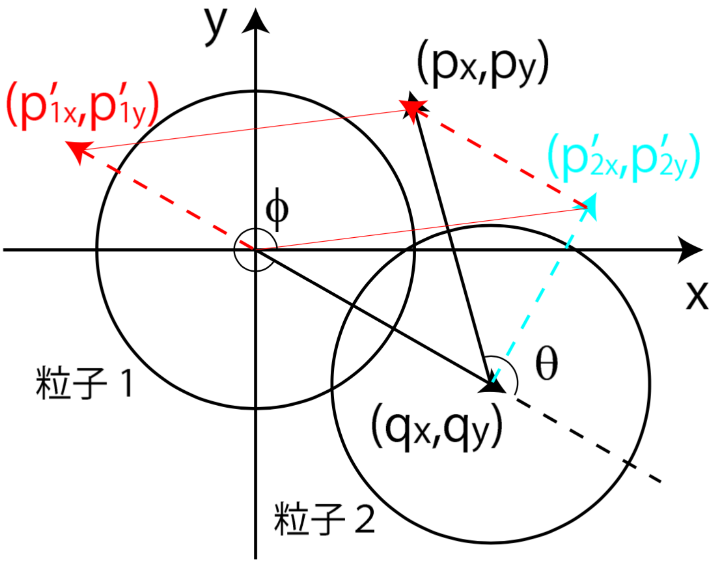

図 1: 2 粒子間の衝突

を考えよう。粒子 1 の重心を中心とする座標系を考え、粒子 2 が相対運動量 $\vec{p}$ で近づいてくる。粒子 1 と粒子 2 は弾性衝突を行い、粒子 1 は $\vec{q}$ に平行な方向の運動量 $\vec{p'}_1 = (p'_{1x}, p'_{1y})$ を得、粒子 2 には $\vec{q}$ に垂直な方向の運動量 $\vec{p'}_2 = (p'_{2x}, p'_{2y})$ が 残 る 。$\vec{p'}_1$、$\vec{p'}_2$ は

$$
\begin{aligned}
\vec{p'}_1 &= \frac{\vec{q}\cdot\vec{p}}{|\vec{q}|^2}\vec{q} \\
\vec{p'}_2 &= \vec{p} - \vec{p'}_1
\end{aligned}
$$

と書ける。よって、観測者系での衝突後の運動量 $\vec{p}_1^{\mathrm{after}}, \vec{p}_2^{\mathrm{after}}$ はそれぞれ、

$$
\begin{aligned}
\vec{p}_1^{\mathrm{after}} &= \vec{p'}_1 + \vec{p_1} \\
\vec{p}_2^{\mathrm{after}} &= \vec{p'}_2 + \vec{p_1} = \vec{p_2} - \vec{p'}_1
\end{aligned}
$$

となる。

1.3　数値計算を用いて導く

それでは、前項の条件を用いて、数値計算を行おう。ここで N 個の粒子が、一辺が 1 の正方形の中を運動しているとする。粒子は壁にぶつかると弾性衝突をし、壁と垂直方向の速

度が反転する。簡単のために、粒子の質量を1、粒子のサイズを0.001、計算時間を $t = 10$、$k_\mathrm{B} = 1$ とする。また、全ての粒子は最初、運動量 $(1, 1)$ を持ち同じ方向に運動していたとする。1 自由 度あたり $\frac{1}{2}k_\mathrm{B}T$ のエネルギーを持つことから、$k_\mathrm{B}T = 1$ を仮定していることになる。以上を元に用意した数値計算コードが web にあるので見てみよう。

コードを理解して動かせたら

- 解析的な解と比較せよ。
- 異なる初期条件で計算してみよ。
- 粒子のサイズ、粒子の数を変えたときにマクスウェル・ボルツマン分布が実現するまでにかかる時間はどのように変わるか。また、解析解とのずれを比較せよ。

1.4 提出課題

3次元の場合のマクスウェル・ボルツマン分布を数値的に実現してみよ。実現できたら、解析解を導き解析解と比較せよ。ここでも2粒子間の衝突のみを考えればよい。また、粒子のサイズ、粒子の数を変えたときにマクスウェル・ボルツマン分布が実現するまでにかかる時間、解析解とのずれはどのように変わるか。

なお、3次元空間でも衝突後の運動量 $\vec{p}_1^{\mathrm{after}}, \vec{p}_2^{\mathrm{after}}$ は、衝突前の位置 $\vec{q}_1, \vec{q}_2$, 運動量 $\vec{p}_1, \vec{p}_2$ を用いて、

$$
\begin{aligned}
\vec{p}_1^{\mathrm{after}} &= \vec{p'}_1 + \vec{p}_1 = \frac{\vec{q}\cdot\vec{p}}{|\vec{q}|^2}\vec{q} + \vec{p}_1 \\
\vec{p}_2^{\mathrm{after}} &= \vec{p'}_2 + \vec{p}_1 = \vec{p}_2 - \frac{\vec{q}\cdot\vec{p}}{|\vec{q}|^2}\vec{q}
\end{aligned}
$$

とかける。

(余裕がある人は) 質量の異なる粒子が半分ずつ存在する場合、それぞれのエネルギー分布はどのようになるか。数値的に求め、解析解と比較し議論せよ。運動量保存だけでなくエネルギー保存にも注意すること。

提出期限: 次回授業開始時