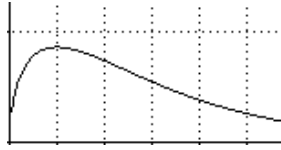


Boltzmann - Maxwell - Verteilung : Computersimulation

Problemstellung: Betrachtet man die Energieverteilung der Teilchen eines Gases, so stellt man fest, daß nicht alle Teilchen die gleiche Energie haben (z.B. verdunstet Wasser schon bei 20°C, woraus man schließen kann, daß bestimmte Teilchen eine höhere Energie als die Durchschnittsenergie haben). Vielmehr bildet sich eine Energieverteilung, die sich auch mathematisch beschreiben läßt:

Die Boltzmann-Maxwell-Verteilung:

$$f(E) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} * \left(\frac{1}{k_B * T}\right)^{\frac{3}{2}} * \sqrt{E} * e^{-\frac{E}{k_B * T}}$$



Mit Hilfe eines Programms

wollten wir nun zeigen, daß sich die aus theoretischen Überlegungen zur kinetischen Gastheorie herleitbare Verteilung von Teilchen eines Gases tatsächlich einstellt, wenn man die Flugbahnen einzelner Teilchen möglichst exakt berechnet.

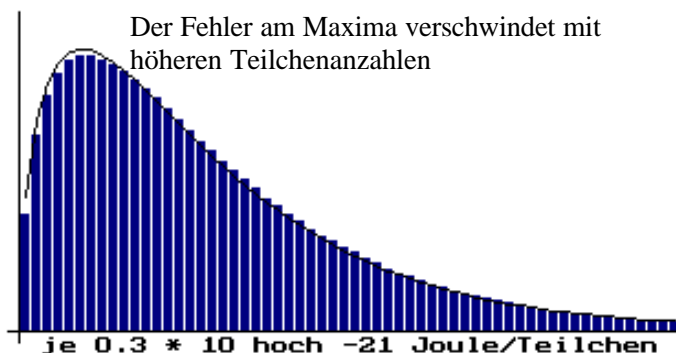
Die erhaltene Verteilung sollte sodann mit der theoretischen Kurve vergleichbar sein.

Die Randbedingungen waren:

1. Die Teilchen sind Kugeln, deren Durchmesser gegeben sind.
2. Die Teilchen führen nur elastische Stöße aus.
3. Die Teilchen befinden sich in einem genau definierten Raum, der dem Raum entspricht, den die gegebene Teilchenanzahl im Mittel einnehmen würde.
4. Die Wand wird als ideal elastisch angesehen; die Masse der Wand geht gegen unendlich.

Das Programm geht folgendermaßen vor: Zuerst werden die Teilchen zufällig im Raum verteilt, wobei jedes Teilchen die gleiche, der vorgegebenen Temperatur entsprechende Geschwindigkeit erhält. Nun beginnt die Simulation. Dazu wird berechnet, wann die nächste Kollision stattfindet. Hierzu werden alle möglichen Stöße in allen möglichen Stoßarten [Wand- und Teilchenzustammenstöße (jedes mit jedem)] durchprobiert und verglichen. Der Zusammenstoß, der nach dem kürzesten Zeitintervall¹ zustandekommt, gibt das Zeitintervall vor, für das die Ortsvektoren aller Teilchen anhand deren Geschwindigkeitsvektoren neu berechnet werden. Daraufhin werden die neuen Geschwindigkeitsvektoren des bzw. der kollidierenden Teilchen(s) berechnet. Diese Berechnung wird nun über längere Zeiträume² wiederholt. Da sich eine Gleichgewichtsverteilung erst nach vielen Stößen einstellt, und da die Rechenleistung eines normalen PCs für Teilchenanzahlen, die wesentlich größer als 1000 sind, nicht ausreicht, mußten wir eine Mittelwertbildung durchführen, denn z.B. 20 Teilchen können keine richtige Gleichgewichtsverteilung ausbilden, da ja ein Teilchen schon 5% der Gesamtverteilung ausmacht und das Gleichgewicht, das sich hier einstellt, kein statisches sondern ein dynamisches ist. Deswegen haben wir die einzelnen Verteilungen über einen gewissen Zeitraum gemittelt.

Ein Gas unter Standardbedingungen (mit 20 Teilchen über 7.5*10⁻⁶ Sekunden gemittelt):



Die durchgezogene Linie ist die Vorhersage der Theorie, die Balken entsprechen der gemittelten Energieverteilung der simulierten Teilchen.

Wie man sieht, gibt es an der Theorie von Maxwell und Boltzmann nichts auszusetzen!

Des weiteren haben wir untersucht, ob sich immer noch die selbe Verteilung bei Gasgemischen und unter Einfluß eines Kraftfeldes bildet.

¹ Berechnet, indem für den Teilchen-Teilchen-Zusammenstoß der Abstand der zwei Teilchen in Abhängigkeit von der Zeit gleich dem Durchmesser eines Teilchens gesetzt wird, und nach der Zeit umgestellt wird; für einen Zusammenstoß mit der Wand wird die Bewegungsgleichung des speziellen Teilchens gleich den Koordinaten der Raumwänden gesetzt

² Der simulierte Zeitraum beträgt trotzdem maximal nur ca. 10⁻⁶ s. Da aber in Gasen bei normalen Bedingungen sehr hohe Stoßfrequenzen (Größenordnung ca. 10¹⁰ Hz) herrschen, reicht dies vollkommen aus.