

粒子与热平衡背景碰撞的能量交换平衡速率 及碰撞后速率分布的动理学研究^{*}

魏同利^{1)†} 王翠玉¹⁾ 旷明星¹⁾ 曹先胜²⁾

1) (北方民族大学电气信息工程学院, 物理与光电信息功能材料重点实验室, 银川 750021)

2) (常州大学微电子学院, 常州 213164)

(2025 年 8 月 17 日收到; 2026 年 1 月 25 日收到修改稿)

粒子在背景中的能量弛豫是非平衡动力学中的重要问题. 粒子与背景分子的单次碰撞是粒子非平衡随机和弛豫过程的基本单元, 对其能量交换的统计性质和分布进行研究是研究系统 (或子系统) 长时演化行为的基础和起点. 本研究组在前期的微观研究中, 给出了以特定速率入射的粒子在碰撞后的能量增益方程, 其正确性仍需充分验证. 基于分子动理学微观理论, 本文通过建立概率性碰撞的物理模型并编写仿真程序, 模拟粒子以平衡速率入射热平衡系统并与背景分子在单次碰撞下的碰撞过程, 统计其能量增益 (或损耗) 情况, 研究结果支持了理论平衡能量及平衡速率的结论. 还基于碰撞程序统计了不同质量比和不同入射速率的粒子在单次碰撞后的速率分布. 研究发现, 单次碰撞下, 入射粒子不能回归麦克斯韦分布, 这表明粒子与背景分子的能量弛豫是多次碰撞下的渐趋平衡过程. 本文提供了一种审视非平衡粒子在平衡系统中能量弛豫过程的微观图景, 有助于动理学极限下随机动力学的进一步研究, 并可为热化等应用场景提供理论支持.

关键词: 能量交换平衡速率, 交换平衡能量, 碰撞仿真, 能量弛豫

DOI: 10.7498/aps.75.20251112

CSTR: 32037.14.aps.75.20251112

1 引言

粒子在背景中的能量弛豫是非平衡输运和非平衡随机动力学中的重要课题^[1-5]. 粒子非平衡随机动力学的经典动力学方程为朗之万方程. 朗之万将粒子在背景中的受力分成两个部分, 其一为平均力, 其二为随机力^[6,7]. 近期有研究指出, 在短时极限和动理学极限 (克努森系数大于 10) 下, 平均力和随机力的形式与经典朗之万方程均有不同^[8-21]. 这意味着在稀薄气体和短时极限下, 布朗粒子的能量弛豫不能由经典形式的朗之万方程进行描述, 需要采用对应的平均力和随机力, 相应理论被称为稀薄气体动力学. 稀薄气体动力学是物体在稀薄气体环境 (如地球临近空间中) 运动的基本理论, 但其微观理论和微观机制仍然是不完善的. 作为粒子随

机过程和弛豫过程的基本单元, 对单次碰撞进行微观研究是非常必要的^[17,18]. 本研究组在前期研究中基于二体硬球碰撞模型, 运用微观动理学理论, 对这两种极限下平均力和随机力的形式进行研究, 给出了布朗粒子在短时极限和动理学极限下与热平衡背景分子单次碰撞下的能量涨落和能量交换的解析形式的统计结果^[18]. 该理论结果已经进行了一些数值验证, 但其正确性仍需充分证实.

本文通过数值仿真方法对理论结果的正确性进行研究. 近年来, 随着实验技术的发展, 电子碰撞以及离子与原子或分子碰撞已实现高精度测量, 例如通过交叉束装置、冷原子-离子阱体系以及高分辨能量分析技术, 能够在受控条件下直接获得碰撞截面、能量损失及角分布等信息^[22-27]. 然而, 由于实验重复率和统计样本规模的限制, 对大量碰撞事件进行统计平均仍然具有挑战性. 因此, 基于概

^{*} 宁夏回族自治区自然科学基金 (批准号: 2023AAC03297) 和国家自然科学基金 (批准号: 12465007, 11864001) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: weitl@nmu.edu.cn

率性碰撞模型的数值仿真方法仍然是该领域研究的重要方法. 粒子与背景分子碰撞发生能量交换时, 存在着一个特殊的速率 (能量), 当粒子以该特殊速率 (能量) 与背景分子发生概率性的单次碰撞时, 就统计平均而言, 其既不得到能量也不失去能量, 可称该特殊速率为能量交换平衡速率, 该特殊能量为交换平衡能量. 本文从该能量交换平衡速率入手进行研究. 建立了概率性碰撞的物理模型, 来模拟粒子与背景分子的碰撞过程, 并根据该物理模型编写了入射粒子与背景分子发生概率性碰撞并出射的子程序. 在仿真程序中, 首先通过理论公式计算出粒子的能量交换平衡速率; 再模拟粒子以该速率入射, 与热平衡背景分子发生概率性的二体硬球碰撞; 重复该仿真碰撞过程 (背景分子的速度和碰撞散射截面上的位置随机), 最后统计粒子出射的平均能量变化是否和理论的零结果一致或基本一致. 结果表明, 仿真碰撞的次数越多, 粒子能量增益的平均值越趋近于零, 在模拟次数为十亿次时, 氦气分子入射热平衡氦气 (300 K) 的平均能量增益为 $4.8669 \times 10^{-5} k_B T$, 支持了理论结果. 基于此仿真程序, 还对粒子以不同速率入射, 与背景分子碰撞后的速率分布进行了统计, 给出了粒子单次碰撞后的速率分布曲线. 本研究可对短时极限和动理学极限下布朗粒子的非平衡随机动力学、弛豫动力学和稀薄气体动力学研究提供线索和工具, 为相关应用如热化过程提供理论解释和参考.

本文第 2 节给出了粒子与背景分子概率性碰撞的物理模型及验证方案, 包括二体硬球碰撞模型、统计假设以及概率性碰撞物理模型. 第 3 节讨论了能量交换平衡速率 (平衡速率) 和交换平衡能量 (平衡能量) 的数值解, 并对碰撞模型仿真结果进行了统计和讨论. 重点展示了粒子以平衡速率和非平衡速率入射时与背景进行能量交换的仿真结果. 第 4 节给出了不同质量的粒子以平衡速率及非平衡速率入射背景氦气, 在单次碰撞后的速率分布. 第 5 节总结了本文的主要结论.

2 粒子与背景分子概率性碰撞的物理模型及验证方案

2.1 碰撞模型与统计假设

本文中碰撞采用二体碰撞模型, 入射粒子与背景分子均为硬球体且粒子的质心位于各自的几何

中心, 碰撞前后总动量和总动能均守恒. 背景分子为热平衡气体, 且分子在内部空间中均匀分布, 粒子在空间的分布完全随机, 任何位置的分子数密度相同 [28]. 该模型与假设下, 文献指出: 在碰撞的质心参考系中, 二体硬球碰撞的粒子在碰撞前后的速率保持不变, 出射方向则完全随机, 两个粒子在碰撞中的运动方向均相反 [17,21,28–30].

2.2 能量平衡速率与平衡能量

考虑入射粒子以一确定速度入射背景气体, 并与背景发生随机碰撞. 碰撞后粒子的速度具有一定随机性, 该随机性来源于两个方面: 其一为背景分子速度和能量的随机性; 其二为碰撞在散射截面不同位置的随机性. 基于系综平均, 理论上存在着一个平衡速率或能量, 以该速率或能量入射的粒子与背景分子发生碰撞的能量交换平均为零. 当粒子高于该平衡速率入射时, 粒子将失去能量; 当粒子低于该平衡速率入射时, 粒子将得到能量. 该理论速率被称为能量交换平衡速率 (后称平衡速率), 其能量被称为交换平衡能量 (后称平衡能量). 平衡速率和平衡能量可从粒子与背景分子单次碰撞的能量增益方程求得. 对于满足麦克斯韦分布的热平衡背景, 基于微观动理学理论和系综平均的解析表达式为 [18]

$$\overline{\Delta E} = \frac{2\zeta}{(1+\zeta)^2} \left[\frac{4-\mathbb{R}\zeta}{3} \overline{E}_2 - E_1 \right], \quad (1)$$

其中 $\overline{\Delta E}$ 表示粒子能量增益的系综平均; $\zeta = m_1/m_2$ 为质量比, m_1 和 m_2 分别为入射粒子和背景分子的质量; E_1 为入射粒子动能, $\overline{E}_2$ 为背景分子的平均动能. $\mathbb{R}$ 是一个由 m_1 , m_2 及粒子入射速率 v_1 等决定的中间参数, 其表达式为

$$\begin{aligned} \mathbb{R} &= \frac{\sqrt{\frac{2k_B T}{\pi m_2}} e^{-\frac{m_2 v_1^2}{2k_B T}} + \left(v_1 - \frac{1}{v_1} \frac{k_B T}{m_2} \right) \operatorname{erf} \sqrt{\frac{m_2 v_1^2}{2k_B T}}}{\sqrt{\frac{2k_B T}{\pi m_2}} e^{-\frac{m_2 v_1^2}{2k_B T}} + \left(v_1 + \frac{1}{v_1} \frac{k_B T}{m_2} \right) \operatorname{erf} \sqrt{\frac{m_2 v_1^2}{2k_B T}}} \\ &= \frac{\sqrt{\frac{\zeta}{\pi E_1^{(T)}}} e^{-\frac{E_1^{(T)}}{\zeta}} + \left(1 - \frac{\zeta}{2E_1^{(T)}} \right) \operatorname{erf} \sqrt{\frac{E_1^{(T)}}{\zeta}}}{\sqrt{\frac{\zeta}{\pi E_1^{(T)}}} e^{-\frac{E_1^{(T)}}{\zeta}} + \left(1 + \frac{\zeta}{2E_1^{(T)}} \right) \operatorname{erf} \sqrt{\frac{E_1^{(T)}}{\zeta}}}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 k_B 为玻尔兹曼常数, T 为热平衡气体温度,

$E_1^{(T)}$ 为以 $k_B T$ 为单位的粒子入射能量, erf 表示误差函数. 当 $\overline{\Delta E} = 0$ 时, 可得到粒子入射的平衡能量:

$$E_1^{(\text{bal}, T)} = 2 - \frac{\mathbb{R}}{2} \zeta, \quad (3)$$

$E_1^{(\text{bal})} = E_1^{(\text{bal}, T)} k_B T$ 为平衡能量. 入射粒子的平衡速率可由平衡能量根据下式求得:

$$v_1^{(\text{bal})} = \sqrt{2E_1^{(\text{bal})}/m_1}. \quad (4)$$

方程 (3) 是能量交换方程 (1) 的直接结果, 对其进行正确性验证, 可对 (1) 式的正确性提供有力支持. 方程 (3) 是一个积分方程, 难以解析求解, 可借助数值方法处理该问题. 方程 (3) 所给出的平衡能量 $E_1^{(\text{bal}, T)}$ 只与质量比 ζ 有关, 在确定 ζ 下利用二分法, 可求得平衡速率与平衡能量的数值解.

2.3 概率性碰撞物理图景

在求得平衡速率的理论结果后, 以该速率重复入射相同温度的背景分子, 观察记录粒子的出射能量并对其系综平均, 若该平均能量和入射能量相比, 变化趋于 0, 则可判定 (3) 式符合物理真实, 否则说明 (3) 式可能存在问题. 本研究通过数值仿真方法实现该判定, 具体为选定粒子以平衡速率入射, 基于碰撞的微观模型和数值仿真程序模拟粒子和背景分子的碰撞, 统计以平衡速率但不同方向角入射的粒子碰撞后的速率及能量, 观察其能量变化平均值是否趋于 0, 给出结论. 统计涉及到的一些公式如下. 入射粒子碰撞后的能量增益 (或损耗) 为

$$\Delta E = \frac{1}{2} m_1 v_{1a}^2 - \frac{1}{2} m_1 v_1^2, \quad (5)$$

其中 v_1 为粒子的入射速率, v_{1a} 为粒子碰撞后的速率. 在多次重复模拟单次碰撞的过程中, 将模拟次数记为 N , N 次模拟所对应的平均能量增益 (或损耗) 记为 $\overline{\Delta E}$:

$$\overline{\Delta E} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta E_i, \quad (6)$$

其中 ΔE_i 为第 i 次模拟对应的粒子能量增益或损耗, i 为序指标. 平均能量增益 (或损耗) 的均方根误差 (root mean squared error, RMSE) 为

$$\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\overline{\Delta E}_j - \overline{\Delta E})^2}, \quad (7)$$

其中 n 表示对某确定模拟次数 (如 N 次) 的仿真过程重复计算 n 回, $\overline{\Delta E}_j$ 为第 j 回 (j 为序指标) 计算对应的粒子平均能量增益, $\overline{\Delta E}$ 为平均能量增益的平均值, $\overline{\Delta E} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \overline{\Delta E}_j$. 重复的次数足够多时, 则单次碰撞中所有可能出现的情况都可按照其真实概率充分出现 (遍历所有可能). 对抽样的能量变化进行平均, 可以解释为对各种可能结果按照它们出现的概率进行平均.

为了进行数值仿真, 需要建立粒子与背景分子发生概率性碰撞的物理模型. 模型主要解决以下两个问题: 其一, 因背景分子的速度按照概率分布, 故与入射粒子碰撞的背景分子的速度也必然是概率性分布的. 鉴于背景分子速度有三个自由度, 确定背景分子速度原则上需要三个随机数. 如何正确选择随机数来确定被选中分子的速度, 以使碰撞按照真实的概率发生是需要解决的问题之一. 其二, 由于粒子处于碰撞二维散射截面上的位置是随机的, 原则上还需要两个随机数以确定粒子的出射方向. 如何选择这两个随机数并确定粒子的出射速度是模型需要解决的问题之二. 围绕这两个问题, 研究给出的概率性碰撞物理模型的具体流程如图 1 所示.

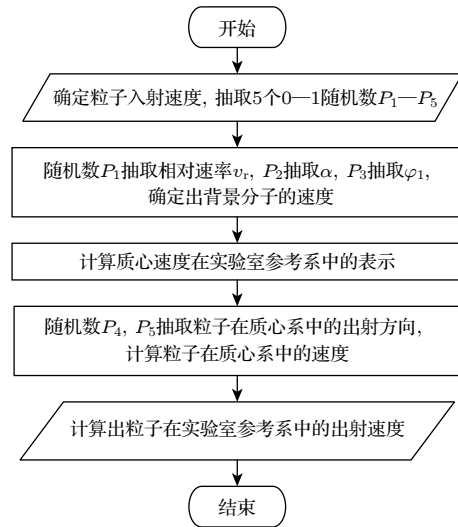


图 1 概率性碰撞物理模型流程图. $P_1 - P_5$ 为 0—1 之间的随机数, v_r 为入射粒子与气体分子之间的相对速率, α 为粒子入射速度与相对速度之间的夹角, φ_1 为入射速度和相对速度平面与标准平面 (见图 6) 之间的夹角

Fig. 1. Probabilistic collision physics model flowchart. $P_1 - P_5$ are random numbers between 0 and 1, v_r is the relative speed between the incident particle and the gas molecule, α is the angle between the incident velocity and the relative velocity, and φ_1 is the angle between the plane of the incident velocity and relative velocity and the standard plane (see Fig. 6).

以上流程可看作利用 5 个 0—1 之间的随机数 $P_1 - P_5$ 抽取与粒子碰撞的背景气体分子的速度和粒子的出射速度. 具体过程为: 1) 利用入射粒子和背景分子的碰撞可能性的相对速率分布函数 (见 (8) 式), 通过随机数 P_1 抽取入射粒子和背景分子碰撞的相对速率 v_r . 在获得相对速率后, 可在速度空间中建立以 $\mathbf{v}_1$ 终端为中心, 以 v_r 为半径的速度球面 (图 3). 根据相对速度 $\mathbf{v}_r$ 与 $\mathbf{v}_1$ 夹角 α 的分布函数 (见 (9) 式), 通过随机数 P_2 可抽取 α . 通过另一随机数 P_3 抽取出 $\mathbf{v}_1$ 和 $\mathbf{v}_r$ 平面与标准平面的夹角 φ_1 (图 4). 2) 在抽得背景分子相对于入射粒子的相对速度后, 给出它们的质心速度及其在实验室参考系中的表示. 3) 由于出射粒子均匀分布在以质心速度 $\mathbf{v}_\mu$ 为中心, 以 $|\mathbf{v}_{1a} - \mathbf{v}_\mu|$ 为半径的速度球面上^[17], 可通过两个随机数 P_4 和 P_5 抽出其在质心系中的出射方向, 进而求出其在实验室参考系中的速度.

2.3.1 抽取背景分子速度的方法

如图 2 所示, 假设入射粒子的速率为 v_1 , 入射方向角为 θ 和 φ . 背景气体设定为热平衡状态, 满足麦克斯韦分布, 温度为 T . 为了抽取出背景分子的速度, 需要给出碰撞可能性的背景分子速度分布函数. 这里需要注意的一个问题是: 与速度为 $\mathbf{v}_1$ 的入射粒子发生碰撞的分子, 其碰撞可能性的速度 (速率) 分布并不是麦克斯韦速度 (速率) 分布, 而是由背景分子相对于入射粒子的相对速度 (速率) 分布函数乘以相对速度 (速率), 再归一化求得. 该问题的研究成果可表示为 (8)—(10) 式^[17,31-33]: 速率为 v_1 的粒子和与其相对速率为 v_r 的背景分子碰撞的分布函数为

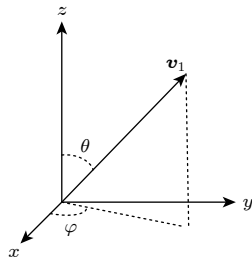


图 2 入射粒子的速度. $\mathbf{v}_1$ 为粒子的入射速度, θ 为 $\mathbf{v}_1$ 与 z 轴的夹角, φ 为 $\mathbf{v}_1$ 在 xy 平面上的投影与 x 轴的夹角

Fig. 2. Velocity of the incident particle. $\mathbf{v}_1$ is the incident velocity of the particle, θ is the angle between $\mathbf{v}_1$ and the z -axis, and φ is the angle between the projection of $\mathbf{v}_1$ on the xy plane and the x -axis.

$$\rho_{\text{coll}}(v_r) = \frac{v_r^2}{v_1} \left(\frac{m_2}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \times \left[\frac{e^{-\frac{m_2(v_1-v_r)^2}{2k_B T}} - e^{-\frac{m_2(v_1+v_r)^2}{2k_B T}}}{\sqrt{\frac{2k_B T}{\pi m_2}} e^{-\frac{m_2 v_1^2}{2k_B T}} + \left(v_1 + \frac{1}{v_1} \frac{k_B T}{m_2} \right) \text{erf} \left(\sqrt{\frac{m_2}{2k_B T}} v_1 \right)} \right]. \quad (8)$$

碰撞可能性依赖 α ($\mathbf{v}_r$ 与 $\mathbf{v}_1$ 的夹角) 的分布函数 (v_r 大小已定) 为

$$\rho_{v_1, v_r}(\alpha) = 2\pi v_r^2 \left(\frac{m_2}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m_2(v_1^2 + v_r^2 + 2v_1 v_r \cos \alpha)}{2k_B T}} \times \sin \alpha. \quad (9)$$

(8) 式和 (9) 式所涉及的相对速度 $\mathbf{v}_r$, α 等量及它们之间的关系如图 3 所示, 其中 β 为 $\mathbf{v}_1$ 与 $\mathbf{v}_2$ 之间的夹角, α 为 $\mathbf{v}_1$ 与 $\mathbf{v}_r$ 之间的夹角. 为了确定分子速度, 还要考虑 $\mathbf{v}_r$ 沿着 $\mathbf{v}_1$ 轴的旋转自由度. 由于气体分子速度在垂直于 $\mathbf{v}_1$ 平面的各方向均匀分布, 该旋转角度 φ_1 的分布函数为

$$\rho_{v_1, v_r, \alpha}(\varphi_1) = 1/(2\pi). \quad (10)$$

根据 (8)—(10) 式, 可抽取出 v_r , α 和 φ_1 . 模型采用积分法抽取相关参量. 若从零对分布函数 (8)—(10) 式积分到某一上限 (分布函数均是归一化的), 则分子在随机碰撞中对应参数小于该积分上限的可能性就等于积分结果, 令随机数与积分结果对应, 可反推积分上限并将其选定为分子对应参数. 在数值计算中, 可采用二分法确定该积分上限, 若积分结果小于此随机数, 说明需要提高积分上限, 若积分结果大于此随机数, 则说明需要降低积分上限. 如此二分可在需要精度上确定出积分上限. 模型细致阐述如下.

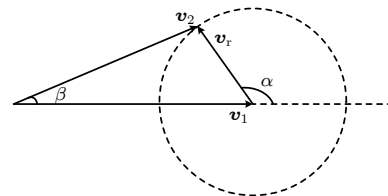


图 3 $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$ 和 $\mathbf{v}_r$ 关系. $\mathbf{v}_1$ 为粒子的入射速度, $\mathbf{v}_2$ 为气体分子的速度, $\mathbf{v}_r$ 为 $\mathbf{v}_2$ 对 $\mathbf{v}_1$ 的相对速度, α 为 $\mathbf{v}_1$ 与 $\mathbf{v}_r$ 之间的夹角, β 为 $\mathbf{v}_1$ 与 $\mathbf{v}_2$ 的夹角

Fig. 3. Relationship between $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$ and $\mathbf{v}_r$. $\mathbf{v}_1$ is the incident velocity of the particle, $\mathbf{v}_2$ is the velocity of the gas molecule, $\mathbf{v}_r$ is the relative velocity of $\mathbf{v}_2$ with respect to $\mathbf{v}_1$, α is the angle between $\mathbf{v}_1$ and $\mathbf{v}_r$, and β is the angle between $\mathbf{v}_1$ and $\mathbf{v}_2$.

1) 选取一个 0—1 之间的随机数 P_1 , 取 0 为下限, 取一很大的值 (相对速率) 为上限; 将 (8) 式从 0 积分到该上限并将积分值与 P_1 进行比较: 如积分结果大于 P_1 则二分该上限, 取其结果为新的上限. 如此循环, 直至积分到新上限的结果开始小于 P_1 , 此时取此上限为新下限以代替零, 取此新下限和上次上限之和的二分处作为新上限. 如此循环二分, 可在任意精度上抽取出与 P_1 匹配的相对速率 v_r .

2) 将 (9) 式对 α 从 0 积分到某一上限 α_u 值, 可以求得

$$P_{\alpha_u} = \frac{e^{\frac{-m_2(v_1^2 + v_r^2 + 2v_1 v_r \cos \alpha_u)}{2k_B T}} - e^{\frac{-m_2(v_1^2 + v_r^2 + 2v_1 v_r)}{2k_B T}}}{e^{\frac{-m_2(v_1 - v_r)^2}{2k_B T}} - e^{\frac{-m_2(v_1 + v_r)^2}{2k_B T}}}. \quad (11)$$

令 P_{α_u} 和随机数 P_2 相等, 即 $P_{\alpha_u} = P_2$, 可将 P_2 对应的 α 直接求出, 其解为

$$\alpha = \arccos \left\{ -1 - \frac{k_B T \ln \left[(1 - P_2) e^{\frac{-2m_2 v_1 v_r}{k_B T}} + P_2 \right]}{m_2 v_1 v_r} \right\}. \quad (12)$$

3) 根据 (10) 式, 通过随机数 P_3 可抽取出 φ_1 ,

$$\varphi_1 = 2\pi P_3. \quad (13)$$

按照概率抽出背景分子的 v_r , α 和 φ_1 后, 该背景分子的速度便随之确定, 相关位形绘制在图 4 中. φ_1 的定义方法也展示在图 4 中. 如图 4 所示, 当 α 角确定时, v_r 在与 v_1 垂直平面上的投影 v'_r 的大小都相等, 并且 v'_r 的端点位于以图中 b 点为圆心的圆周上. 设 z 轴与 v_1 构成的平面与圆周交于 a 点, 线段 ab 代表的矢量取为 V_r , v'_r 与 V_r 的夹角如图取为 φ_1 , 即选择 z - v_1 为标准平面.

2.3.2 质心速度在实验室参考系中的表示

在背景分子的速度被抽出后, 还要考虑入射粒子和分子碰撞后的出射情况, 为此, 需要在质心系中研究其碰撞的情形, 求得质心速度在实验室参考系中的表示. 如图 3 和图 4 所示, 背景分子的速率 v_2 可求为

$$v_2 = \sqrt{v_1^2 + v_r^2 + 2v_1 v_r \cos \alpha}. \quad (14)$$

由图 3 中的图形关系可知

$$v_r \cos(\pi - \alpha) + v_2 \cos \beta = v_1. \quad (15)$$

求解上述方程得到 v_1 与 v_2 的夹角 β :

$$\beta = \arccos \left(\frac{v_1 + v_r \cos \alpha}{v_2} \right). \quad (16)$$

为了求得 v_μ 的大小, 如图 5, 取入射粒子、气体分子及质心的动量分别为 $p_1 = m_1 v_1$, $p_2 = m_2 v_2$, $p_\mu = (m_1 + m_2) v_\mu$, 则质心速率为

$$v_\mu = \frac{\sqrt{p_1^2 + p_2^2 + 2p_1 p_2 \cos \beta}}{m_1 + m_2}. \quad (17)$$

v_μ (p_μ) 和 v_1 (p_1) 夹角 γ 可通过下式求得:

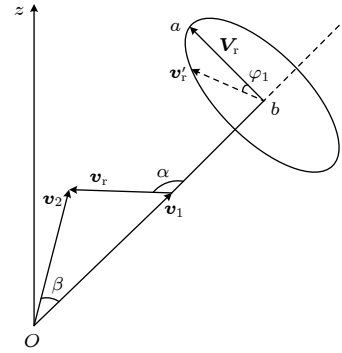


图 4 v_1 , v_2 和 φ_1 的关系. v_1 为粒子的入射速度, v_2 为气体分子的速度, v_r 为 v_2 对 v_1 的相对速度, α 为 v_1 与 v_r 之间的夹角, β 为 v_1 与 v_2 之间的夹角, v'_r 是 v_r 在与 v_1 垂直平面上的投影, b 点为 v_1 和与其垂直平面的交点, V_r 为以 b 为起始点, 以 a 为终止点的矢量, ab 处在 v_1 - z 平面与 v_1 垂直平面的交线上, φ_1 为 V_r 与 v'_r 之间的夹角

Fig. 4. Relationship between v_1 , v_2 and φ_1 . v_1 is the incident velocity of the particle, v_2 is the velocity of gas molecules, v_r is the relative velocity of v_2 with respect to v_1 , α is the angle between v_1 and v_r , and β is the angle between v_1 and v_2 . v'_r is the projection of v_r on a plane perpendicular to v_1 , point b is the intersection point of the velocity v_1 with the plane perpendicular to it, V_r is the vector starting from b and ending at a , the line segment ab is on the crossing of the v_1 - z plane and the plane perpendicular to v_1 , and φ_1 is the angle between v'_r and V_r .

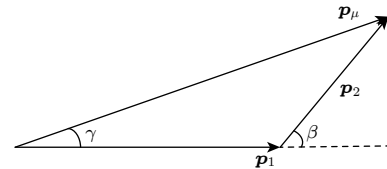


图 5 p_1 , p_2 和 p_μ 的关系. p_1 和 p_2 分别为入射粒子和气体分子的动量, p_μ 为质心的动量, γ 为 v_1 与 v_μ 的夹角, β 为 v_1 与 v_2 的夹角

Fig. 5. Relationship between p_1 , p_2 and p_μ . p_1 and p_2 are the momenta of the incident particle and the gas molecule, p_μ is the momentum of the center of mass, γ is the angle between v_1 and v_μ , and β is the angle between v_1 and v_2 .

$$\gamma = \arccos \left[\frac{p_1 + p_2 \cos \beta}{(m_1 + m_2) v_\mu} \right]. \quad (18)$$

为了求出质心速度在实验室参考系中的表示, 绘制了图 6. 图 6 中, $\mathbf{v}_\mu$ 为质心速度, $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 为 $\mathbf{v}_\mu$ 在垂直于 $\mathbf{v}_1$ 的平面上的投影、 $\mathbf{V}$ 为 $\mathbf{v}_\mu$ 在 $\mathbf{v}_1$ 轴上的投影、 $\mathbf{V}'_r$ 与 $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 大小相等, 处于 z 轴和 $\mathbf{v}_1$ 轴的平面与图 6 中实线圆面的交线上. θ 为 $\mathbf{v}_1$ 与 z 轴之间的夹角, γ 为 $\mathbf{v}_1$ 与 $\mathbf{v}_\mu$ 之间的夹角. 如图 6 所示, $v_{\mu 0} = v_\mu \sin \gamma$, $V = v_\mu \cos \gamma$. $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$, $\mathbf{v}_\mu$, $\mathbf{v}_r$ 处于同一平面, 因此 $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 与 $\mathbf{V}'_r$ 的夹角等于 $\mathbf{v}'_r$ (如图 4) 与 $\mathbf{V}_r$ 的夹角, 即为 φ_1 . 质心速度 $\mathbf{v}_\mu = \mathbf{V} + \mathbf{v}_{\mu 0}$, 故 $\mathbf{v}_\mu$ 在 z 轴方向上的分量 $v_{\mu z}$ 等于 $\mathbf{V}$ 与 $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 在 z 轴的分量之和, 有

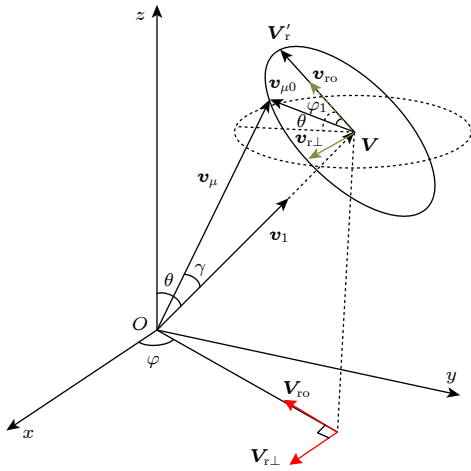


图 6 $\mathbf{v}_\mu$ 在实验室参考系中的位形. $\mathbf{v}_\mu$ 为质心速度; $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 为 $\mathbf{v}_\mu$ 在垂直于 $\mathbf{v}_1$ 的平面上的投影; $\mathbf{V}$ 为 $\mathbf{v}_\mu$ 在 $\mathbf{v}_1$ 轴上的投影; $\mathbf{V}'_r$ 处于 $\mathbf{v}_1$ - z 平面的交线上, 在如图的圆平面内设定为参考矢量方向. θ 为 $\mathbf{v}_1$ 与 z 轴之间的夹角、 γ 为 $\mathbf{v}_1$ 与 $\mathbf{v}_\mu$ 之间的夹角、 φ_1 为 $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 与 $\mathbf{V}'_r$ 的夹角, $\mathbf{v}_{ro}$ 为 $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 在 $\mathbf{V}'_r$ 方向上的分量, $\mathbf{v}_{r\perp}$ 为 $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 在垂直于 $\mathbf{V}'_r$ 方向上的分量, $\mathbf{V}_{ro}$ 为 $\mathbf{v}_{ro}$ 在 xy 平面上的投影, $\mathbf{V}_{r\perp}$ 为 $\mathbf{v}_{r\perp}$ 在 xy 平面上的投影, φ 为 $\mathbf{v}_1$ 在 xy 平面上的投影与 x 轴的夹角

Fig. 6. Configuration of $\mathbf{v}_\mu$ in the laboratory reference frame. $\mathbf{v}_\mu$ is the center-of-mass velocity, $\mathbf{v}_{\mu 0}$ is the projection of $\mathbf{v}_\mu$ onto the plane perpendicular to $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{V}$ is the projection of $\mathbf{v}_\mu$ onto the $\mathbf{v}_1$ axis, and $\mathbf{V}'_r$ lies on the intersection line of the $\mathbf{v}_1$ - z plane and is set as the reference vector direction within the circular plane shown in the figure. θ is the angle between $\mathbf{v}_1$ and the z axis, γ is the angle between $\mathbf{v}_1$ and $\mathbf{v}_\mu$, and φ_1 is the angle between $\mathbf{v}_{\mu 0}$ and $\mathbf{V}'_r$, $\mathbf{v}_{ro}$ is the component of $\mathbf{v}_{\mu 0}$ in the direction of $\mathbf{V}'_r$, $\mathbf{v}_{r\perp}$ is the component of $\mathbf{v}_{\mu 0}$ perpendicular to the direction of $\mathbf{V}'_r$, $\mathbf{V}_{ro}$ is the projection of $\mathbf{v}_{ro}$ onto the xy plane, $\mathbf{V}_{r\perp}$ is the projection of $\mathbf{v}_{r\perp}$ onto the xy plane, φ is the angle between the projection of $\mathbf{v}_1$ onto the xy plane and the x axis.

$$v_{\mu z} = V \cos \theta + v_{\mu 0} \cos \varphi_1 \sin \theta$$

$$= v_\mu \cos \gamma \cos \theta + v_\mu \sin \gamma \cos \varphi_1 \sin \theta. \quad (19)$$

$\mathbf{v}_\mu$ 与 z 轴的夹角 θ_{v_μ} , 可利用反余弦函数求得

$$\theta_{v_\mu} = \arccos(v_{\mu z}/v_\mu)$$

$$= \arccos(\cos \gamma \cos \theta + \sin \gamma \cos \varphi_1 \sin \theta). \quad (20)$$

$\mathbf{v}_\mu$ 在 x 轴方向上的分量 $v_{\mu x}$ 等于 $\mathbf{V}$ 和 $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 在 x 轴上的分量之和. $\mathbf{v}_{\mu 0}$ 可以分解为在 $\mathbf{V}'_r$ 方向上的投影 $\mathbf{v}_{ro}$ 和垂直于 $\mathbf{V}'_r$ 方向上的投影 $\mathbf{v}_{r\perp}$, $v_{ro} = v_{\mu 0} \cos \varphi_1$, $v_{r\perp} = v_{\mu 0} \sin \varphi_1$. 因此 $v_{\mu x}$ 等于 $\mathbf{V}$, $\mathbf{v}_{ro}$ 和 $\mathbf{v}_{r\perp}$ 在 x 轴方向上的分量之和. 同理, $\mathbf{v}_\mu$ 在 y 轴方向上的分量 $v_{\mu y}$ 等于 $\mathbf{V}$, $\mathbf{v}_{ro}$ 和 $\mathbf{v}_{r\perp}$ 在 y 轴的分量之和. 从图 6 可看出, $\mathbf{v}_{ro}$ 在 $x(y)$ 轴方向的分量等于 $\mathbf{v}_{ro}$ 在 xy 平面上的投影 $\mathbf{V}_{ro}$ 在 $x(y)$ 方向上的分量; $\mathbf{v}_{r\perp}$ 在 $x(y)$ 轴方向上的分量等于 $\mathbf{v}_{r\perp}$ 在 xy 平面上的投影 $\mathbf{V}_{r\perp}$ 在 $x(y)$ 轴方向上的分量, 即 $v_{rox} = V_{rox}$, $v_{roy} = V_{roy}$, $v_{r\perp x} = V_{r\perp x}$, $v_{r\perp y} = V_{r\perp y}$. $\mathbf{V}'_r$, $\mathbf{V}$ 和 z 轴共面, 因此 $\mathbf{V}_{ro}$ 与 $\mathbf{V}$ 在 xy 平面上的投影共线, $\mathbf{V}_{r\perp}$ 与 $\mathbf{V}_{ro}$ 和 $\mathbf{V}$ 都垂直. 因此, $v_{\mu x}$ 和 $v_{\mu y}$ 分别为

$$v_{\mu x} = v_\mu \cos \gamma \sin \theta \cos \varphi + v_{ro} \sin(\theta - \pi/2) \cos \varphi$$

$$+ v_{r\perp} \cos(\varphi - \pi/2),$$

$$v_{\mu y} = v_\mu \cos \gamma \sin \theta \sin \varphi + v_{ro} \sin(\theta - \pi/2) \sin \varphi$$

$$+ v_{r\perp} \sin(\varphi - \pi/2),$$

其中 φ 为 $\mathbf{v}_1$ 在 xy 平面上的投影与 x 轴的夹角. 由反正切函数可得 $\mathbf{v}_\mu$ 在 xy 平面上的投影与 x 轴的夹角 φ_{v_μ} :

$$\varphi_{v_\mu} = \arctan(v_{\mu y}/v_{\mu x}). \quad (21)$$

通过 (17) 式、(20) 式和 (21) 式可得质心速度在球坐标系中的坐标 v_μ , θ_{v_μ} , φ_{v_μ} .

2.3.3 抽取粒子的出射速度及其在实验室参考系中的表示

由于粒子处于碰撞散射截面上的位置是随机的, 在弹性碰撞时, 粒子在质心系中出射的速度大小不变且沿空间各方向的概率都相等 [17,18,28,29]. 如图 7, 取质心速度 $\mathbf{v}_\mu$ 为轴向, 则粒子可能的出射速度 $\mathbf{v}_{\mu 1a}$ 与 $\mathbf{v}_\mu$ 的夹角 α_2 满足如下分布函数:

$$\rho_{\text{exi}}(\alpha_2) = (\sin \alpha_2)/2. \quad (22)$$

取 $\mathbf{v}_\mu$ 和 z 轴作为参考平面, $\mathbf{v}_{\mu 1a}$ 绕轴向 ($\mathbf{v}_\mu$ 方向) 的旋转角度满足均匀分布, 有

$$\rho_{\text{exi}}(\varphi_2) = \frac{1}{2\pi}. \quad (23)$$

与抽取背景分子速度的方法类似, 抽取两个 0—1 的随机数 P_4 和 P_5 , 根据分布函数得到的 α_2 和 φ_2 分别为

$$\alpha_2 = \arccos(1 - 2P_4), \quad \varphi_2 = 2\pi P_5. \quad (24)$$

已知 $\mathbf{v}_{\mu 1a}$ 的大小 $v_{\mu 1a} = m_2 v_r / (m_1 + m_2)$ [17,18,28,29] 和方向角之后, 可给出粒子出射速度 $\mathbf{v}_{1a}$ 于实验室参考系中的速率:

$$v_{1a} = \sqrt{v_\mu^2 + v_{\mu 1a}^2 + 2v_\mu v_{\mu 1a} \cos \alpha_2}. \quad (25)$$

如图 7, $\mathbf{v}_\mu$ 与 $\mathbf{v}_{1a}$ 的夹角 α_3 可计算为

$$\alpha_3 = \arccos\left(\frac{v_{1a}^2 + v_\mu^2 - v_{\mu 1a}^2}{2v_{1a}v_\mu}\right).$$

已知 α_3 , 与 2.3.2 节求解质心速度类似, 可给出 $\mathbf{v}_{1a}$ 与 z 轴的夹角 $\theta_{v_{1a}}$, 以及在 xy 平面上的投影与 x 轴间的夹角 $\varphi_{v_{1a}}$:

$$\theta_{v_{1a}} = \arccos(\cos \alpha_3 \cos \theta_{v_\mu} + \sin \alpha_3 \sin \theta_{v_\mu} \cos \varphi_2), \quad (26)$$

$$\varphi_{v_{1a}} = \arctan(v_{1a_y} / v_{1a_x}), \quad (27)$$

其中 v_{1a_x} 与 v_{1a_y} 分别为 $\mathbf{v}_{1a}$ 的 x 轴和 y 轴分量,

$$\begin{aligned} v_{1a_x} &= v_{1a} \cos \alpha_3 \sin \theta_{v_\mu} \cos \varphi_{v_\mu} \\ &+ v_{1a} \sin \alpha_3 \cos \varphi_2 \sin(\theta_{v_\mu} - \pi/2) \cos \varphi_{v_\mu} \\ &+ v_{1a} \sin \alpha_3 \sin \varphi_2 \cos(\varphi_{v_\mu} - \pi/2), \\ v_{1a_y} &= v_{1a} \cos \alpha_3 \sin \theta_{v_\mu} \sin \varphi_{v_\mu} \\ &+ v_{1a} \sin \alpha_3 \cos \varphi_2 \sin(\theta_{v_\mu} - \pi/2) \sin \varphi_{v_\mu} \\ &+ v_{1a} \sin \alpha_3 \sin \varphi_2 \sin(\varphi_{v_\mu} - \pi/2). \end{aligned}$$

由 (25)—(27) 式, 得到碰撞后粒子在球坐标系中的速度 v_{1a} , $\theta_{v_{1a}}$ 和 $\varphi_{v_{1a}}$.

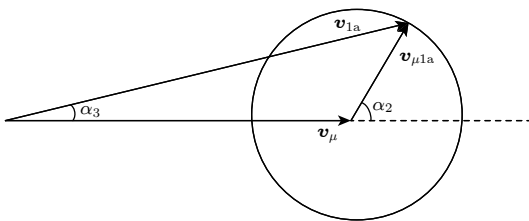


图 7 粒子出射速度在实验室参考系中的位形. $\mathbf{v}_{1a}$ 是碰撞后粒子的速度, $\mathbf{v}_\mu$ 是质心速度, $\mathbf{v}_{\mu 1a}$ 是 $\mathbf{v}_{1a}$ 对 $\mathbf{v}_\mu$ 的相对速度, α_2 是 $\mathbf{v}_\mu$ 和 $\mathbf{v}_{\mu 1a}$ 之间的夹角, α_3 是 $\mathbf{v}_{1a}$ 和 $\mathbf{v}_\mu$ 之间的夹角

Fig. 7. Configuration of particle emission velocity in the laboratory reference frame. $\mathbf{v}_{1a}$ is the velocity of the particle after the collision, $\mathbf{v}_\mu$ is the velocity of the center of mass, $\mathbf{v}_{\mu 1a}$ is the relative velocity of $\mathbf{v}_{1a}$ with respect to $\mathbf{v}_\mu$, α_2 is the angle between $\mathbf{v}_\mu$ and $\mathbf{v}_{\mu 1a}$, and α_3 is the angle between $\mathbf{v}_{1a}$ and $\mathbf{v}_\mu$.

依据粒子与背景分子发生概率性碰撞的物理模型和解决方案, 编写碰撞子程序, 在此子程序中输入入射粒子的速度参数, 经子程序抽取随机数 P_1, P_2, P_3, P_4 和 P_5 并运算后, 即可获得粒子的出射速度.

3 结果与讨论

3.1 平衡速率和平衡能量的数值解

根据 (3) 式进行数值求解, 不同质量比 ζ 下的平衡能量求解结果如图 8 所示. 为方便展示, 质量比使用了对数形式. 从图 8 可以看出:

1) 在粒子质量远大于分子质量时, 平衡能量趋近于 $1.5k_B T$, 且下限为 $1.5k_B T$; 在粒子质量远小于分子质量时, 平衡能量趋近于 $2k_B T$, 且上限为 $2k_B T$. 这是一个有趣的结论, 可按照微观动力学理论解释如下. 入射粒子在与背景分子发生随机的单次碰撞后, 其平均能量可以分成两项, 一项是平均项, 对应入射粒子碰撞后的平均速度能量项; 另一项是随机项, 对应入射粒子碰撞后对平均速度偏离的涨落能量. 平均能量可表示为 [18]

$$\bar{E}_{1a} = E_M + E_f = \frac{m_1}{2} \bar{v}_{1a}^2 + \frac{m_1}{2} \bar{v}_f^2, \quad (28)$$

其中 $\bar{E}_{1a}$ 和 $\bar{v}_{1a}$ 为入射粒子碰撞后能量和速度的系综平均; $E_M = \frac{m_1}{2} \bar{v}_{1a}^2$ 为平均速度对应的动能项, 称为平均速度动能; $E_f = \frac{m_1}{2} \bar{v}_f^2$ 为随机速度对应的

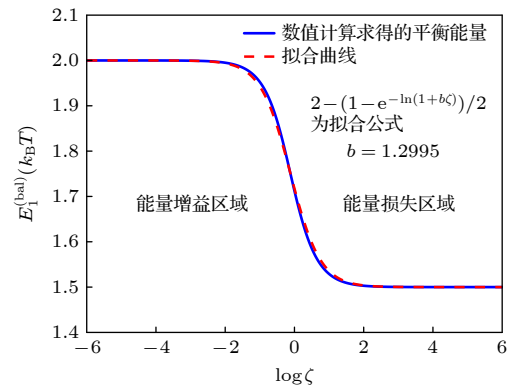


图 8 粒子的平衡能量随质量比的变化情况, 其中 ζ 为粒子与背景分子的质量比, $E_1^{(bal)}$ 为粒子的平衡能量, $2 - \frac{1 - e^{-\ln(1+b\zeta)}}{2}$ 为拟合方程

Fig. 8. Variation of equilibrium energy of particles with the mass ratio. ζ is the mass ratio of particles to background molecules, $E_1^{(bal)}$ is the equilibrium energy of particles, $2 - \frac{1 - e^{-\ln(1+b\zeta)}}{2}$ is the fitting equation.

动能项, 称为随机速度动能或涨落动能; $\mathbf{v}_f = \mathbf{v}_{1a} - \bar{\mathbf{v}}_{1a}$ 为随机速度. 我们在前期工作中已经给出了 E_M 和 E_f 的具体形式^[18]:

$$\begin{aligned} E_M &= \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} E_1 - \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \mathbb{R} k_B T \\ &\quad + \frac{(m_1 \mathbb{R} k_B T)^2}{4(m_1 + m_2)^2 E_1}, \\ E_f &= \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} E_1 + \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} k_B T \\ &\quad - \frac{(m_1 \mathbb{R} k_B T)^2}{4(m_1 + m_2)^2 E_1}. \end{aligned} \quad (29)$$

入射粒子在碰撞后的平均能量变化即为

$$\begin{aligned} \Delta \bar{E} &= E_M + E_f - E_1 = -\frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \mathbb{R} k_B T \\ &\quad - \frac{2m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E_1 + \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} k_B T, \end{aligned} \quad (30)$$

式中第二项和第三项对质量比具有相同的依赖关系, 但第一项随着质量比 ζ 的变化而变化, 第一项影响平衡能量的具体取值, 它来自于平均速度能量 E_M . 考察碰撞后的平均速度^[17]:

$$|\bar{\mathbf{v}}_{1a}| = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_1 - \frac{1}{m_1 + m_2} \frac{1}{v_1} k_B T \mathbb{R}, \quad (31)$$

式中第一项源于粒子与各向同性背景分子等概率碰撞, 而第二项是由粒子运动的方向性导致与其相向(或有分量)运动的背景分子有更大的碰撞概率而产生的. 当求粒子的平均速度动能时, 速度平方中包含(31)式两项的交叉项, 它起到关键的调节作用, 对应于(29)式中平均速度能量的第二项. 该项因子在 $\zeta \rightarrow \infty$ 时(重粒子入射), 为 $-E_1/3\zeta$ ($\mathbb{R} \approx m_2 v_1^2/3k_B T$), 是入射能量 E_1 关于 $1/\zeta$ 的一阶小量, 和热涨落能量 $[2\zeta/(1+\zeta)^2]k_B T$ 同阶, 这时平衡能量对应下限, 为 $3k_B T/2$; 在 $\zeta \rightarrow 0$ 时(轻粒子入射), 能量交叉项是 $k_B T$ 关于 ζ 的二阶小量 ($\mathbb{R} \approx 1$), 该交叉项趋近于零, 这时平衡能量对应上限, 为 $2k_B T$.

该效应机制的根源来自动量和能量对速度依赖的幂次不同, 动量与速度的一次方成正比, 而能量与速度的二次方成正比. 如为重粒子入射, 则其平均动量变化很小(对应(31)式第一项), 其速度额外变化((31)式第二项)对应的交叉能量比较可观; 如为轻粒子入射, 其动量近乎衰减至零, 其速度额外微小变化对应的能量会非常小.

2) 当粒子的质量等于热平衡气体分子的质量时(对数质量比为 0), 平衡能量为 $1.7123k_B T$. 该结果高于背景分子的平均能量. 我们认为, 与入射粒子碰撞的背景分子中, 速度越高的, 有越大的碰撞可能性, 因而碰撞的平衡能量高于平均能量.

3) 对数质量比在 -1 到 1 之间时, 平衡能量变化较为剧烈, 在其余区间内变化较为平缓. 这是由于(31)式中速度交叉项贡献的能量项(对应(29)式中的第二项), 即 $-\frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \mathbb{R} k_B T$ 决定了平衡能量在区间 $[3k_B T/2, 2k_B T]$ 内的具体取值. 可以看到, 该项在质量比 $\zeta \sim 1$ 附近的变化最为剧烈.

4) 如图 8 所示, 平衡能量曲线将粒子的入射能量划分为能量增益区和能量损失区. 粒子小于平衡能量入射时, 趋向于在碰撞中获得能量; 粒子大于平衡能量入射时, 趋向于在碰撞中损失能量. 为了方便该结果的应用, 对图 8 曲线进行拟合, 平衡能量可近似表示为

$$E_1^{(\text{bal})} = \left[2 - \frac{1 - e^{-\ln(1+1.2995\zeta)}}{2} \right] k_B T, \quad (32)$$

其中 1.2995 为拟合系数. 根据(4)式可求得平衡速率, 表 1 列出了部分质量比对应的平衡速率和平衡能量的数值, 其中 ζ 为质量比, $E_1^{(\text{bal})}$ 为平衡能量, v_{RMS} 为背景分子的方均根速率, $v_{\text{RMS}1}$ 为入射粒子和背景热平衡时的方均根速率. 可以看出: 在粒子和分子质量相等时, 平衡能量为 $1.712341k_B T$, 平衡速率为方均根速率的 1.068438 倍; 在粒子为分子质量的 0.1 倍时, 平衡能量趋近于 $2k_B T$, 平衡速率则为方均根速率的 1.140905 倍; 而在粒子为分子质量的 10 倍时, 平衡能量趋近于 $1.5k_B T$, 平衡速率为方均根速率的 1.009637 倍. 总结而言, 平衡能量大于平均能量, 平衡速率也大于方均根速率. 一个有趣的例子是同种粒子入射的情形, 见图 9. 麦克斯韦分布下, 有三个较为重要的特征速率, 即最概然速率 $v_p = \sqrt{2k_B T/m}$, 平均速率 $\bar{v} = \sqrt{8k_B T/\pi m}$ 和方均根速率 $v_{\text{RMS}} = \sqrt{3k_B T/m}$, m 表示气体分子的质量. 以氢气分子为例, 在 $T = 300 \text{ K}$ 时, 数值计算得 $v_1^{(\text{bal})} \approx \sqrt{3.4246k_B T/m} \approx 1460.5441 \text{ m/s}$, 它比熟知的三个特征速率都要大. 根据图 9 中粒子最概然速率、平均速率、方均根速率和平衡速率的所示情况可以看出: 1) 平衡速率大于最概然速率、方均根速率和平均速率. 2) 平衡速率将速率空间分成了两个区域, 在大于平衡速率

的区域, 分子在碰撞后, 平均而言将失去能量; 在小于平衡速率的区域, 分子在碰撞后, 平均而言将得到能量.

表 1 部分质量比对应的平衡能量与平衡速率数值
Table 1. Equilibrium energy and equilibrium speed values for partial mass ratios.

ζ	$E_1^{(\text{bal})}/k_B T$	$v_1^{(\text{bal})}/v_{\text{RMS}}$	$v_1^{(\text{bal})}/v_{\text{RMS1}}$
10^{-5}	1.999994	365.147911	1.514699
10^{-3}	1.999500	36.510275	1.154556
10^{-1}	1.952497	3.607859	1.140905
10^0	1.712341	1.068438	1.068438
10^1	1.529051	0.319275	1.009637
10^3	1.500300	0.031626	1.000010
10^5	1.500003	0.003162	1.000001

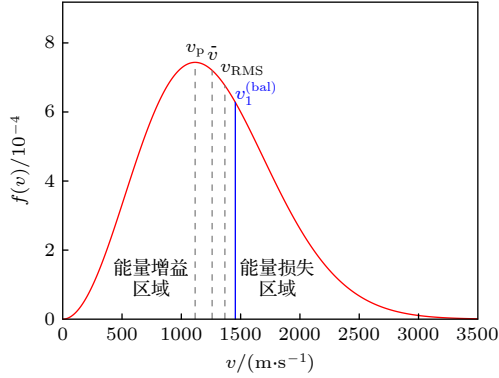


图 9 平衡速率在麦克斯韦分布中的位置. 蓝色线对应的即为平衡速率 $v_1^{(\text{bal})} = 1460.5441$ m/s, $v_p = 1164.0466$ m/s 是最概然速率, $\bar{v} = 1259.4316$ m/s 是平均速率, $v_{\text{RMS}} = 1366.9894$ m/s 是方均根速率

Fig. 9. Position of the equilibrium rate within the Maxwellian distribution. The blue line corresponds to the equilibrium speed $v_1^{(\text{bal})} = 1460.5441$ m/s, and $v_p = 1164.0466$ m/s is the most probable speed. $\bar{v} = 1259.4316$ m/s is the average speed, and $v_{\text{RMS}} = 1366.9894$ m/s is the root-mean-square speed.

3.2 平衡速率和平衡能量的正确性验证

本部分展示粒子入射温度为 300 K 的氦气的仿真统计结果, 讨论理论平衡能量和平衡速率与仿真结果的一致性. 首先选取粒子质量与氦分子质量相等, 也就是氦分子入射热平衡氦气的情况, $m_1 = m_2 = 4.0026 \times 1.6605 \times 10^{-27}$ kg, $T = 300$ K. 这种情况下根据 (3) 式和 (4) 式计算得到的 $v_1^{(\text{bal})} = 1460.5441$ m/s, 平衡能量为 $E_1^{(\text{bal})} = 1.7123k_B T$. 入射粒子在碰撞中能量变化的系综平均的绝对值及其均方根 $|\overline{\Delta E}|$ 和 $\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$ 随模拟次数的变化见

图 10(a), 部分数值列于表 2(左边部分). $\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$ 的结果是从对同一 N 值的 100 回模拟中得到的. 接着改变入射粒子质量, 以其对应的平衡速率入射至温度为 300 K 的氦气中, 仿真并统计粒子能量增益情况. $N = 10^7$ 次模拟结果如图 10(b) 所示, 具体的数值结果展示在表 2(右边部分) 中. 对以上两种情况进行总结, 可以看出: 1) $|\overline{\Delta E}|$ 和 $\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$ 均随着模拟次数的增加而减小, 在 $N = 10^7$ 次模拟下, $|\overline{\Delta E}|$ 和 $\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$ 已低至 $10^{-4}k_B T$ 量级. 10 亿次碰撞统计下, 能量的平均增益为 $|\overline{\Delta E}| = 4.8669 \times 10^{-5}k_B T$, 可以看作仿真误差. 2) 不同质量比情况

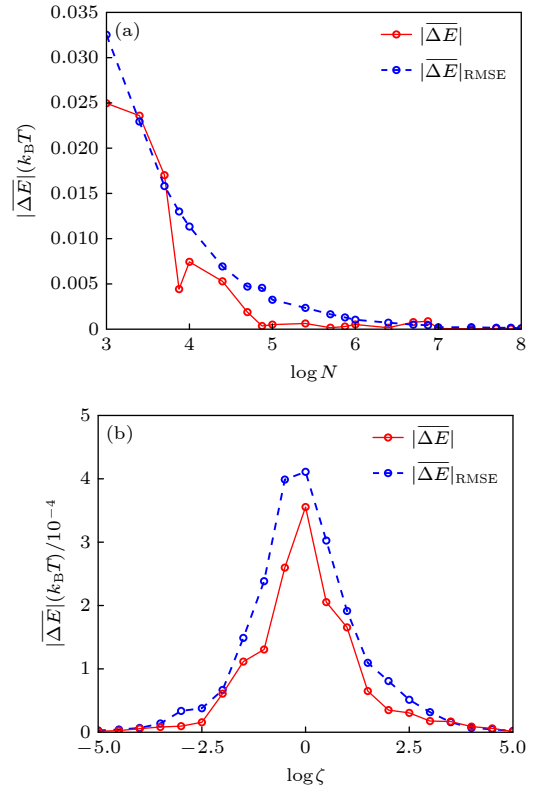


图 10 $|\overline{\Delta E}|$ 和 $\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$ 随模拟次数及质量比的变化 (入射速率为平衡速率, 背景为 300 K 氦气) (a) 质量比为 1 时 $|\overline{\Delta E}|$ 随模拟次数的变化; (b) 模拟次数为 1 千万次时 $|\overline{\Delta E}|$ 随质量比的变化. 其中 $|\overline{\Delta E}|$ 为多次模拟下粒子的平均能量增益或损耗的绝对值, N 为模拟次数, ζ 为粒子与气体分子的质量比

Fig. 10. Variation of $|\overline{\Delta E}|$ and $\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$ with the number of simulations and mass ratio: (a) The variation of $|\overline{\Delta E}|$ with the number of simulations when the mass ratio is 1; (b) the variation of $|\overline{\Delta E}|$ with mass ratio when the number of simulations is 10 million. $|\overline{\Delta E}|$ is the absolute value of the average energy gain or loss of particles under multiple simulations, N is the number of simulations, and ζ is the mass ratio between particles and gas molecules. The incident velocity is the balance speed, with a background of helium gas at 300 K.

表 2 图 10 部分数据

Table 2. A portion of the data in Figure 10.

N	$ \overline{\Delta E} /10^{-2}k_B T$	$\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}/10^{-2}k_B T$	ζ	$ \overline{\Delta E} /10^{-4}k_B T$	$\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}/10^{-4}k_B T$
5×10^3	1.7019	1.5812	10^{-5}	0.0144	0.0279
1×10^4	0.7441	1.1334	10^{-3}	0.0960	0.3363
1×10^5	0.0506	0.3252	10^{-1}	1.3059	2.3840
1×10^6	0.0518	0.1043	10^0	3.5545	4.1102
1×10^7	0.0076	0.0209	10^1	1.6551	1.9143
5×10^7	0.0069	0.0157	10^3	0.1767	0.3167
1×10^8	0.0051	0.0103	10^4	0.0106	0.0207

下, $|\overline{\Delta E}|$ 都趋近于零, 且 $\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$ 也趋近于零, 可信度高. 3) 在质量比等于 1 时, $|\overline{\Delta E}|$ 及 $\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$ 都最大, 这说明质量接近有助于在碰撞中实现充分能量交换. 以上结果支持理论 (方程 (3)) 所建议的平衡速率和平衡能量.

3.3 非平衡速率入射时能量交换方程的正确性验证

根据 (1) 式可以计算出粒子以非平衡速率入射时, 在单次碰撞后粒子的理论能量增益的系综平均. 通过程序仿真粒子以不同方向角和非平衡速率入射, 统计其能量增益并与理论结果进行对比, 可对方程 (1) 的正确性进行验证. 以氦分子入射 $T = 300 \text{ K}$ 的热平衡氦气, 入射速率分别为平衡速率的 0.1, 0.2, ..., 2 倍, 图 11 展示了 1000 万次仿真结果统计和理论能量增益的对比情况, 部分数据显示在表 3 中. 其中误差棒展示的是 $\overline{\Delta E}$ 的均方根误差, 通过 1000 万次仿真的 50 回重复得到. 为了更好地展示误差棒, 图 11 插图放大了 $1.711 k_B T$ — $1.714 k_B T$ 的数据. 由图 11 和表 3 可以看出, 仿真结果的 RMSE 很小, 1000 万次仿真下得到的能量增益非常稳定, 理论能量增益曲线与仿真能量增益曲线吻合, 支持 (1) 式的结论. 还可以看出, 入射粒子的能量变化 $\overline{\Delta E}$ 基本与入射能量 E_1 呈线性关系, 对其进行线性拟合, 可得斜率 $b_1 = -0.5391$, $R^2 = 0.9989$. 这与 (1) 式近似系数 $-2\zeta/(1+\zeta)^2 = -0.5$ 非常接近, 其中的差别是由 (1) 式括号中的 $\mathbb{R}\zeta$ 项引起. 故拟合结果支持 (1) 式的基本形式. 上述结果表明, 在 $\zeta = 1$ 时, 粒子单次碰撞平均损失约 $0.5(E_1 - E_1^{(\text{bal})})$ 的能量.

研究还以质量不同的粒子入射 $T = 300 \text{ K}$ 的热平衡氦气为例, 分别计算了不同质量 ($\zeta = 0.01$,

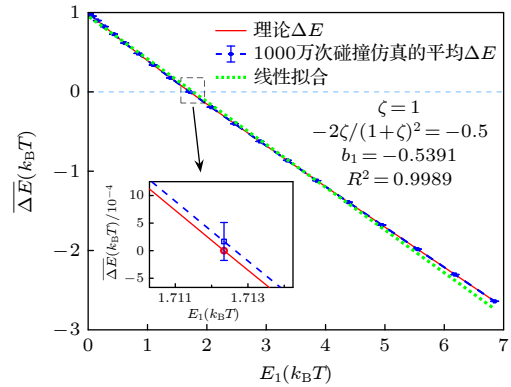


图 11 粒子平均能量增益随入射能量变化的理论与仿真对比. 入射粒子为氦分子, 背景为 300 K 氦气. E_1 为粒子的入射能量, $\overline{\Delta E}$ 为粒子的平均能量增益, 蓝色误差棒是 $\overline{\Delta E}$ 的均方根误差 $\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$, 是对 1000 万次仿真结果平均的 $\overline{\Delta E}$ 的 50 回模拟中得到. 为了更好地展示误差棒, 插图放大了 $1.711 k_B T$ — $1.714 k_B T$ 的数据

Fig. 11. Comparison of theoretical and simulated particle energy gain as a function of incident energy. The incident particles is helium molecule, and the background is 300 K helium gas, E_1 is the incident energy of the particles, $\overline{\Delta E}$ is the average energy gain of the particles, and the blue error bars represent the root mean square error ($\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}$) of $\overline{\Delta E}$, it is obtained from 50 simulations, each of which is an average of 10^7 simulation results for $\overline{\Delta E}$. To better illustrate the error bars, the small illustration magnifies the data of $1.711 k_B T - 1.714 k_B T$.

表 3 图 11 的部分数据

Table 3. Some data from Figure 11.

k	理论 $\overline{\Delta E}/k_B T$	仿真 $\overline{\Delta E}/k_B T$	$\overline{\Delta E}_{\text{RMSE}}/10^{-4}$
0.1	0.9887	0.9885	2.9940
0.5	0.7300	0.7278	1.7447
0.7	0.4886	0.4854	2.3964
1.0	0.0067	0.0002	3.4388
1.5	-1.1050	-1.1195	2.6831
1.7	-1.6603	-1.6793	6.1916
2.0	-2.6157	-2.6398	8.3565

注: k 为入射速率与平衡速率的比值, $k = v_1/v_1^{(\text{bal})}$.

0.1, 10, 100) 的情形, 结果如图 12 所示. 图 12(a)—(d) 分别是质量比为 0.01, 0.1, 10, 100 时, 粒子以不同速率入射 300 K 背景氦气, 1000 万次仿真结果统计与理论能量增益的对比情况. 蓝色误差棒表示平均能量增益的均方根误差, 该误差是 1000 万次仿真结果的 50 回模拟得到, 为了更清楚地展示误差棒, 插图放大了部分数据. 由图 12 可知, 在各种质量比的情况下, 仿真与理论结果高度吻合, 也支持 (1) 式的结论. 在图 12 所示的几种质量比的情况下, $\overline{\Delta E}$ 都近似和 E_1 呈线性关系, 线性拟合所得的斜率 $b_1 = -0.0196, -0.1663, -0.2106, -0.0260$, 拟合优度 $R^2 = 0.9999, 0.9999, 0.9997, 0.9999$, 是和 (1) 式近似系数 $-2\zeta/(1+\zeta)^2 = -0.0196, -0.1653, -0.1653, -0.0196$ 的斜率, 在轻粒子入射情况下近似一致, 在重粒子入射时有些偏差. 与图 11 比较可以发现, 在相同能量入射时, 入射粒子和背景分子的对数质量比的绝对值 $|\ln \zeta|$ 越大, 单次碰撞的

能量交换效率越低; 对数质量比等于零, 即 $\zeta = 1$ (即 $m_1 = m_2$) 时, 能量交换最多, 单次碰撞下能量交换的效率最高. 该结论和 (1) 式中因子 $2\zeta/(1+\zeta)^2$ 的趋势是一致的. 故可给出结论, 在 $\zeta < 1$ 时, 单次碰撞下 $\overline{\Delta E}$ 都近似和 E_1 呈线性关系, 斜率为 $-2\zeta/(1+\zeta)^2$, 可近似表示为

$$\overline{\Delta E} = -\frac{2\zeta}{(1+\zeta)^2}(E_1 - E_1^{(\text{bal})}). \quad (33)$$

在 $\zeta > 1$ 时与 (33) 式有些偏离, 其原因为 (1) 式中 $R\zeta$ 不可忽略, 其斜率与 $-2\zeta/(1+\zeta)^2$ 有些偏差.

4 入射粒子在碰撞后的速率分布

本文的数值方法还可用来研究粒子以任意速率入射热平衡背景单次碰撞后的速率分布曲线. 同样以氦分子入射 $T = 300$ K 的热平衡氦气为例, 对平衡速率入射的氦分子与氦气背景进行 10 亿次碰撞模拟, 存储并统计分子的速率可得到速率分布曲

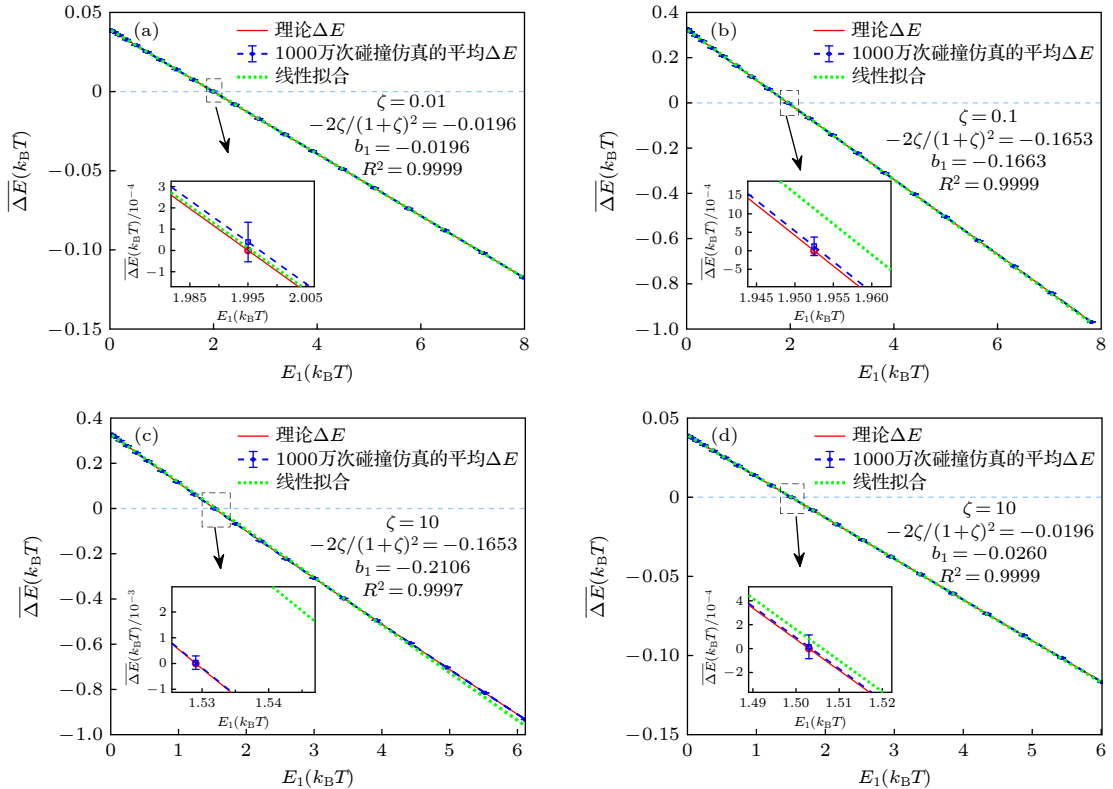


图 12 不同质量比的粒子, 以不同速率入射 300 K 背景氦气, 碰撞后粒子的理论及仿真能量增益 (a)—(d) 分别是质量比为 0.01, 0.1, 10, 100 时, 粒子的理论及仿真能量增益对比, 横轴 E_1 为粒子的入射能量, 纵轴 $\overline{\Delta E}$ 为粒子的平均能量增益, 插图中蓝色误差棒展示的是 $\overline{\Delta E}$ 的均方根误差

Fig. 12. Theoretical and simulated energy gains of particles with various mass ratios after collisions with 300 K background helium gas at different incident speeds: (a)—(d) Theoretical and simulated energy gains of particles with mass ratios of 0.01, 0.1, 10, and 100, respectively. The horizontal axis E_1 is the incident energy of the particles, and the vertical axis $\overline{\Delta E}$ is the average energy gain of the particles. The blue error bars in the inset show the root mean square error of $\overline{\Delta E}$.

线, 结果如图 13 所示. 可以看出, 尖峰分布的峰值位置, 与粒子入射速率 v_1 几乎完全相等: 统计的峰位为 1460.5442 m/s, 入射速率为 1460.5441 m/s. 这是一个非常有趣的结论, 其物理内涵仍需进一步研究. 还可以看出, 单次碰撞后, 入射粒子的速率分布不能回归麦克斯韦速率分布. 这是因为: 1) 在系综平均的意义上, 粒子在单次碰撞中速度不会完全衰减至零或立即失去方向性. 因此, 平均速度衰减为零必须是一个多步过程 [17]. 2) 随机能量在碰撞中达到热平衡的过程也是一个多步过程. 根据 (29) 式中的 E_f 表达式, 其中第一项可称动力学随机项, 它直接依赖入射能量 E_1 和质量比 ζ . 第二项为热力学 (热涨落) 随机项, 它在 $\zeta = 1$ 时最大, 能获得 $\frac{4m_1m_2}{(m_1+m_2)^2}k_B T = [4/4]k_B T = k_B T$ 的能量, 距离热平衡涨落能量仍有差距; 在 $\zeta \neq 1$ 时, 该项更小. 第三项 (混合项) 较小且为负 [18]. 故单次碰撞下随机能量也不能达至热平衡.

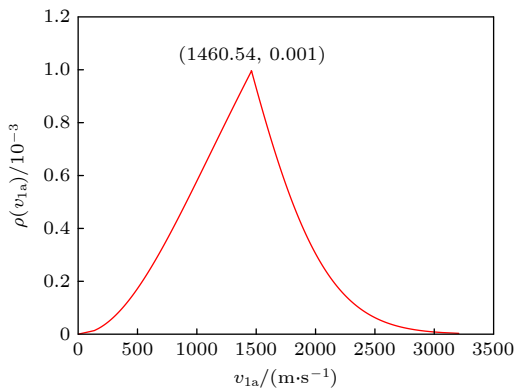


图 13 氦分子以平衡速率入射 300 K 背景氦气, 单次碰撞后的速率分布. v_{1a} 为碰撞后的速率, $\rho(v_{1a})$ 为其分布函数
Fig. 13. Speed distributions of helium molecules after single collisions, where the molecules are injected into 300 K background helium gas at equilibrium speeds. v_{1a} is the speed after the collision, and $\rho(v_{1a})$ is its distribution function.

还对不同质量比粒子以平衡速率入射的情形进行了仿真统计研究, 300 K 氦气背景, 1000 万次仿真统计下, $\zeta = 1, 2, \dots, 10$ 的速率分布曲线如图 14 所示. 可以看出: 1) 峰值位置基本和入射速率相等. 在更大范围质量比条件下对平衡速率入射的速率分布峰值问题进行了计算, 部分数据对比列于表 4. 从表 4 结果可见, 即使在不同的质量比条件下, 峰值在数值上仍与入射速率极为接近, 细微偏差应是由仿真的随机性引起. 2) 质量比越小, 粒子的速率分布越分散; 质量比越大, 粒子的速率分布越集中.

分布宽度与质量比的具体关系如图 15 所示. 可以看出, 分布宽度与质量比之间存在明显的定量关系, 随着质量比的增加, 速率分布半宽 (full width at half maximum, FWHM) 逐渐变窄. 为了定量描述这种关系, 这里选用函数 $A/(\zeta + 1)^B$ 作为拟合模型, 拟合优度 $R^2 = 0.9992$, 拟合较好, 拟合参数 $A = 1611.5495$, $B = 0.8453$.

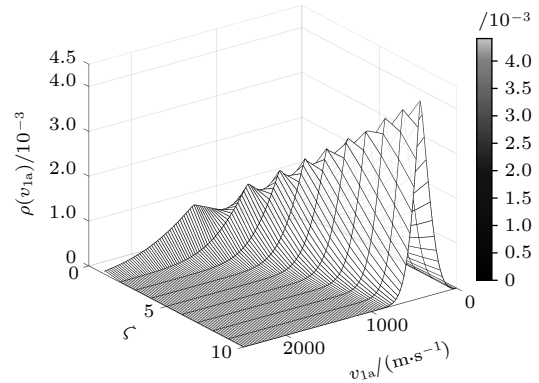


图 14 不同质量比粒子以平衡速率入射 300 K 背景氦气碰撞后入射粒子的速率分布

Fig. 14. Speed distributions of incident particles with different mass ratios after collisions with a 300 K background helium gas, assuming the particles enter at their equilibrium speed.

表 4 部分质量比对应的平衡入射速率峰值差值

Table 4. Peak values difference in the equilibrium incidence speed for selected mass ratios.

ζ	$v_1/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	$(\delta v)_{i,p}/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$
0.0001	157844.3730	2.8386
0.01	15764.9902	-4.3809
0.1	4931.9051	0.1444
1.0	1460.5441	0.001
10000	13.6700	0.0003
100	136.8351	0.046
10.0	436.4460	-0.0792

注: $(\delta v)_{i,p}$ 为峰值速率 $v_{1a,p}$ 与入射速率 v_1 的差值.

针对非平衡速率入射的情形, 研究了粒子以不同的非平衡速率入射 300 K 氦气为背景的速率分布. 入射速度在 1000 m/s 以上, 1000 万次仿真的统计结果展示在图 16(a) 中. 单次碰撞后的速率分布均表现出尖峰特点, 10 亿次仿真后速率分布峰值位置数据展示在表 5 中. 可以看到, 1) 当入射速率接近平衡速率时, 粒子速率分布的峰值与入射速率在数值上非常接近; 2) 当入射速率远大于平衡速率时, 速率分布峰值与入射速率有较小的偏差.

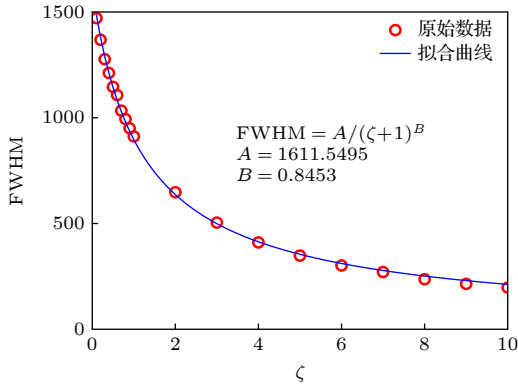


图 15 半宽 (FWHM) 随质量比的变化, 其中 ζ 为质量比, 拟合函数为 $A/(\zeta+1)^B$, A , B 为拟合参数

Fig. 15. Variation of FWHM with respect to the mass ratio, where ζ denotes the mass ratio. The fitting function is given by $A/(\zeta+1)^B$, where A and B are fitting parameters.

当入射速率远小于平衡速率时, 速率分布较为特殊, 计算结果如图 16(b) 所示, 10 亿次仿真后的速率分布峰值数据展示在表 5 中. 这种情况下, 分布函数近似与入射速率无关, 其峰值也近似与入射速率无关, 在 773.8945—813.3373 m/s 范围内波动. 该效应是由固定的热涨落引起, 对应 (29) 式 E_f

中的第二项, 当 $\zeta = 1$ 时为 $k_B T$, 该项与入射能量 E_1 无关. 表 5 中低速入射速率分布峰值速率对应的能量 (第三行) 约在 $0.5k_B T$ (平均能量为 $k_B T$), 基本支持理论分析. 当入射粒子的能量极低时, 碰撞后粒子的能量近乎全部为该项的热涨落能量, 与低入射能量的 E_1 无关, 单次碰撞的能量交换效率很高. 该机制可望用于热化 (冷化) 场景的应用: 热化/冷化工作介质气体相比背景温度极高/极低, 且其分子质量和背景分子的质量相近时, 极短时间内 (单次碰撞的特征时间内) 拥有极高的能量交换效率.

本部分关于入射粒子单次碰撞不能达到热平衡, 其碰撞后的速率分布不为麦克斯韦分布的结论, 可深化对粒子能量弛豫和热化过程多步本质的认识. 考察粒子的弛豫动力学过程时, 不同的弛豫阶段, 粒子 (或子系统) 与背景能量交换的特征参数可能是不一样的. 利用 (1) 式及 (29) 式, 可望对弛豫不同阶段的特征参数进行刻画和描述, 为粒子的弛豫动力学提供基础. 该研究可用于热化问题, 可为相关应用场景提供支持 [34–36]. 另外, 连续使用本文提出的物理模型和子程序, 可对粒子在稀薄背景

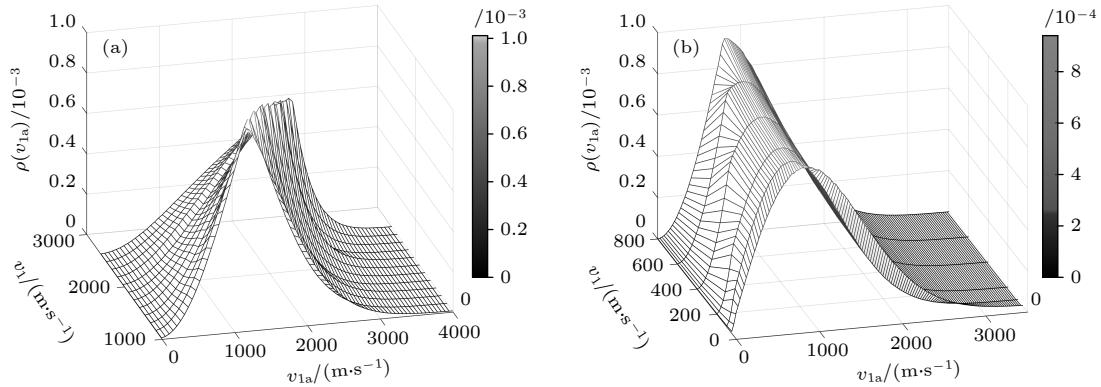


图 16 碰撞后入射粒子速率分布 (a) 粒子以平衡速率的 0.7, 0.8, ..., 1.8 倍入射 300 K 背景氦气时单次碰撞后的速率分布; (b) 粒子入射速率远小于平衡速率时单次碰撞后的速率分布

Fig. 16. Speed distributions of incident particles after a single collision: (a) Speed distributions after one collision with 300 K background helium for particles incident at 0.7, 0.8, ..., 1.8 times the equilibrium speed; (b) speed distributions after one collision when the incident speed is much smaller than the equilibrium speed.

表 5 速率分布函数峰值速率与对应的人射速率

Table 5. Peak speed of the speed distribution function and the corresponding incident speed.

入射速率 $v_1 / (\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	50	100	200	300	400	500	600
峰值速率 $v_{1a,p} / (\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	787.6408	773.8945	813.3373	803.2126	773.2495	787.6408	795.0696
峰值对应动能 $\varepsilon_{1a,p} / (k_B T)$	0.4980	0.4808	0.5310	0.5179	0.4800	0.4980	0.5074
入射速率 $v_1 / (\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	700	800	900	1000	2000	3000	4000
峰值速率 $v_{1a,p} / (\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	772.5872	806.2162	902.5743	1000.9084	1999.1030	2998.1526	3997.9476

中的弛豫过程进行高效仿真. 进一步研究可望给出入射粒子在碰撞后速度分布的解析式或高效准确的速度分布数据库. 这些对粒子的能量弛豫过程的研究都是有价值的.

5 结 论

本文提出了能量交换平衡速率 (平衡速率) 和交换平衡能量 (平衡能量) 的概念, 建立了仿真入射粒子与热平衡背景气体分子发生概率性碰撞的物理模型. 通过数值仿真, 统计了以理论给出的平衡速率入射的粒子与背景分子碰撞后的平均能量变化. 结果显示, 其平均能量增益基本为 0, 数值仿真结果支持理论结论. 本研究所给出的模型还可给出粒子单次碰撞后的速率分布, 可用于粒子入射稀薄热平衡气体的能量和速率预测, 有助于非平衡弛豫过程等领域的微观机制理解. 本研究可为相关应用提供解释和支持, 在低地轨道 (LEO, 约 200—500 km) 环境中, 航天器运行于高 Knudsen 数的稀薄气体中. 有报道指出, 气体分子质量和结构分子质量接近时, 能量交换效率表现出一种质量匹配效应^[37,38], 这和本文的结论是一致的. 本文关于能量交换效率与质量比关系的讨论, 以及单次碰撞无法恢复麦克斯韦分布的结论, 可深化对热化过程多步本质的认识, 并可为相关应用提供支持, 如粒子以相近质量低能入射时, 与背景分子的能量交换效率极高, 可望用于优化热化 (冷化) 过程的设计.

感谢宁夏新型固态电子材料与器件研发创新团队的支持.

参考文献

- [1] Schweitzer F, Ebeling W, Tilch B 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 5044
- [2] Gomez-Solano J R 2024 *Physica A* **646** 129889
- [3] Lev B I, Zagorodny A G 2009 *Phys. Lett. A* **373** 1101
- [4] Lin C L, He B, Wu Y, Wang J G 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 035101 (in Chinese) [林成亮, 何斌, 吴勇, 王建国 2025 物理学报 **74** 035101]
- [5] Sun Q C, Liu C Q, Zhou G D 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 236101 (in Chinese) [孙其诚, 刘传奇, 周公旦 2015 物理学报 **64** 236101]
- [6] Lemons D S, Gythiel A 1997 *Am. J. Phys.* **65** 1079
- [7] Pathria R K, Beale P D 2021 *Statistical Mechanics* (4th Ed.) (Amsterdam: Academic Press) pp609–611
- [8] Epstein P S 1924 *Phys. Rev.* **23** 710
- [9] Millikan R A 1913 *Phys. Rev.* **2** 109
- [10] Harris K R 2009 *J. Chem. Phys.* **131** 054503
- [11] Uhlenbeck G E, Ornstein L S 1930 *Phys. Rev.* **36** 823
- [12] Li Z, Wang H 2003 *Phys. Rev. E* **68** 061206
- [13] Shukla P K, Eliasson B 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 25
- [14] Morfill G E, Ivlev A V 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 1353
- [15] Liu B, Goree J, Vaulina O S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 015005
- [16] Ohtori N, Uchiyama H, Ishii Y 2018 *J. Chem. Phys.* **149** 214501
- [17] Wei T L, Cao X S, Ma D C, Li Y J, Jia C L 2022 *Phys. Rev. E* **106** 034101
- [18] Wei T L, Cao X S, Li Y J, Jia C L 2025 *Results Phys.* **74** 108276
- [19] Zhao H Q, Zhao H 2021 *Phys. Rev. E* **103** L030103
- [20] Einstein A (translated by Cowper A D) 1956 *Investigations on the Theory of the Brownian Movement* (New York: Dover Publications) pp1–19
- [21] Shen C 2005 *Rarefied Gas Dynamics* (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag) pp61–64
- [22] Bartschat K 2018 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51** 132001
- [23] Wu Y J, Meng T M, Zhang X W, Tan X, Ma P F, Yin H, Ren B H, Tu B S, Zhang R T, Xiao J, Ma X W, Zou Y M, Wei B R 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 240701 (in Chinese) [吴怡娇, 孟天鸣, 张献文, 谭旭, 马蒲芳, 殷浩, 任百惠, 屠秉晟, 张瑞田, 肖君, 马新文, 邹亚明, 魏宝仁 2024 物理学报 **73** 240701]
- [24] Zhu X T, Guo J D 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 127901 (in Chinese) [朱学涛, 郭建东 2018 物理学报 **67** 127901]
- [25] Zipkes C, Palzer S, Ratschbacher L, Sias C, Köhl M 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 133201
- [26] Wang N P, Huo Y K, Pan Z Y, Shao Q Y 1995 *Chin. Phys. Lett.* **12** 389
- [27] Ding H B, Pang W N, Liu Y B, Shang R C 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 2252
- [28] Maxwell J C 1860 *Philos. Mag.* **19** 19
- [29] Feynman R P, Leighton R B, Sands M 2010 *The Feynman Lectures on Physics* (Vol. 1) (New York: Basic Books) pp39–40
- [30] Bird G A 1994 *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Oxford: Clarendon Press) pp35–40
- [31] Conde L, Ibáñez L F, Lambás J 2008 *Phys. Rev. E* **78** 026407
- [32] Dunkel J, Hänggi P 2006 *Phys. Rev. E* **74** 051106
- [33] Wei T L, Cao X S 2024 *Am. J. Phys.* **92** 29
- [34] Seifert U 2012 *Rep. Prog. Phys.* **75** 126001
- [35] Hutzler N R, Lu H I, Doyle J M 2012 *Chem. Rev.* **112** 4803
- [36] Doyle J, Friedrich B, Krems R V, Masnou-Suuws F 2004 *Eur. Phys. J. D* **31** 149
- [37] Teolis B, Sarantos M, Schorghofer N, Jones B, Grava C, Mura A, Prem P, Greenhagen B, Capria M T, Cremonese G, Lucchetti A, Galluzzi V 2023 *Space Sci. Rev.* **219** 4
- [38] Capozzi L C, Barresi A A, Pisano R 2019 *Data Brief* **22** 722

Kinetic study on energy balance speed and speed distribution of particles colliding with thermal equilibrium molecules^{*}

WEI Tongli^{1)†} WANG Cuiyu¹⁾ KUANG Mingxing¹⁾ CAO Xiansheng²⁾

1) (*Key Laboratory of Physics and Optoelectronic Information Functional Materials, School of Electrical and Information Engineering, North Minzu University, Yinchuan 750021, China*)

2) (*School of Microelectronics, Changzhou University, Changzhou 213164, China*)

(Received 17 August 2025; revised manuscript received 25 January 2026)

Abstract

The energy relaxation of particles in a background is a fundamental issue in nonequilibrium statistical dynamics. Single collisions between a nonequilibrium particle and background molecules serve as the elementary unit of the particle's nonequilibrium stochastic evolution and relaxation processes. Studies of the statistical properties and distribution of energy exchange in single collisions therefore provide a solid foundation for exploring the long-time evolutionary behavior of the entire system or its relevant subsystems. In our previous microscopic studies, we derived the mean energy gain equation for a particle with a specified incident speed undergoing a probabilistic collision with background molecules, yet its validity remains to be fully verified. Based on microscopic kinetic theory, a physical model for probabilistic collisions between an incident particle and background molecules is constructed, and corresponding numerical simulations are carried out. The balance speeds for particles of different masses-speeds at which the theoretical mean energy gain vanishes-are calculated numerically. Simulations are performed for a large number of collision events, and the statistical mean energy gains or losses are shown to be in excellent agreement with theoretical predictions, thus rigorously verifying the derived mean energy gain equation. For instance, at the balance speed, when the mass of the incident particle equals that of the background molecules, the energy gain is only on the order of $10^{-5}k_B T$, demonstrating extremely high consistency between simulation and theory. For off-balance speeds, the mean energy gain is found to be approximately proportional to the difference between the incident kinetic energy and the balance energy.

The post-collision speed distribution is systematically analyzed over various mass ratios and incident speeds. The distribution exhibits a single peak and deviates significantly from the Maxwell-Boltzmann distribution, confirming that energy relaxation is a gradual process involving multiple successive collisions. For balance speed incidence, the peak is located very close to the incident speed, and its half-width decreases with increasing mass ratio. For off-balance speeds, the peak shifts away from the incident speed, especially at low and high incident speeds. Last but not least, at incident speeds far below the balance speed, the distribution becomes nearly independent of the incident speed, with the peak energy stabilizing around $k_B T/2$. This behavior reflects the dominance of thermal fluctuations and may find useful applications in thermalization processes. This study provides a clear microscopic picture of the energy relaxation process of nonequilibrium particles in an equilibrium environment, offering physical insights into stochastic dynamics in the kinetic limit and reliable theoretical support for practical applications involving thermalization processes.

Keywords: energy balance speed, balance energy, simulations of collisions, energy relaxation

DOI: [10.7498/aps.75.20251112](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251112)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251112](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251112)

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Ningxia Hui Autonomous Region, China (Grant No. 2023AAC03297) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12465007, 11864001).

[†] Corresponding author. E-mail: weitl@nmu.edu.cn



粒子与热平衡背景碰撞的能量交换平衡速率及碰撞后速率分布的动理学研究

魏同利 王翠玉 旷明星 曹先胜

Kinetic study on energy balance speed and speed distribution of particles colliding with thermal equilibrium molecules

WEI Tongli WANG Cuiyu KUANG Mingxing CAO Xiansheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 120003 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251112

CSTR: 32037.14.aps.75.20251112

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251112>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

动态响应和屏蔽效应对稠密等离子体中电子离子能量弛豫的影响

Analysis of dynamic response and screening effects on electron-ion energy relaxation in dense plasma

物理学报. 2025, 74(3): 035101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241588>

强激光场下原子超快动力学过程中的能量交换

Energy exchange in ultrafast dynamics of atom with strong laser fields

物理学报. 2022, 71(4): 043201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211703>

非平衡等离子体流场相干反斯托克斯拉曼散射光谱计算及振转温度测量

Coherent anti-Stokes Raman scattering spectral calculation and vibrational-rotational temperature measurement of non-equilibrium plasma flow field

物理学报. 2024, 73(15): 154202 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240455>

冷却速率对La基非晶合金 β 弛豫行为和应力弛豫的影响

Effects of cooling rate on β relaxation process and stress relaxation of La-based amorphous alloys

物理学报. 2024, 73(3): 036101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231417>

等离子体中激光能量沉积系数、电子热传导系数和电阻率的统一推导

Unified derivation of laser energy deposition coefficient, electron thermal conduction coefficient and resistivity in plasma

物理学报. 2025, 74(12): 125201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250340>

高能重离子碰撞中心快度区鉴别粒子的平均横动量

Midrapidity average transverse momentum of identified charged particles in high-energy heavy-ion collisions

物理学报. 2024, 73(18): 181201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240905>