بسم الله الرحمن الرحیم

جلسه ۸ / ۱۲ / ۱۴۰۲

Modern Physics : Chapter 1

1.1 Review on classical physics. (Con.)

Part A: Mechanics

Total Energy
در غیاب نیروهای اتلافی

$$E = \underbrace{E_K + E_{Pot}}$$

⋇ Hamiltoni

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$$

$\mathcal{H}_0$ → بخش هامیلتونی (انرژی) که مربوط به ذرات آزاد سیستم بدون برهمکنش

Free Part
(Ideal part)

$\mathcal{H}_I$ → بخش برهمکنش

یک ذره داشته باشیم

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{|\vec{P}|^2}{2m} \rightarrow$$

ذره ایده‌آل
ذره آزاد

↓

ذره آزاد نوشته شود ← Kinetic Energy

Non-Intracting
System ← بس ذره‌ای / Many-Body

یک سیستم بدون برهمکنش

$$\mathcal{H}_I = 0$$

شکل کلی هامیلتونی یک سیستم ایده‌آل N-Particles در D-Dimension

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{H}_0^{(i)} = \sum_{i=1}^{N} \frac{|\vec{P}_i|^2}{2m_i}$$

فرض $m_i = m_j$

$\boxed{DN}$ ← $3N$

$\underbrace{\vec{p} = p_x\hat{i} + p_y\hat{j} + p_z\hat{k}}_{\text{3-Momentum}}$ در سه بعد

$$H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} = \underbrace{\frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m}}_{\text{ذره اول}} + \underbrace{\frac{p_4^2 + p_5^2 + p_6^2}{2m}}_{\text{ذره دوم}} + \cdots$$

p_x p_y p_z

یک سیستم N ذره‌ای در 3 بعد بدون برهمکنش و ایده‌آل

گاز ایده‌آل در 3 بعد

$\boxed{\#\ \text{Linear Momentum}}$ $\quad \vec{p} = m\vec{v} \rightarrow \vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$

$\boxed{\#\ \text{Angular Momentum}}$ $\quad \vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \tau = \frac{d\vec{l}}{dt}$

برای مکان نسبت به یک مرجع (مبدا)

Conservation laws
قوانین بقا

(A) $\underbrace{\text{Conservation of Energy}}_{\text{(Scalar)}}$ (Isolated System)

(B) Conservation of linear Momentum $\vec{F} = 0$

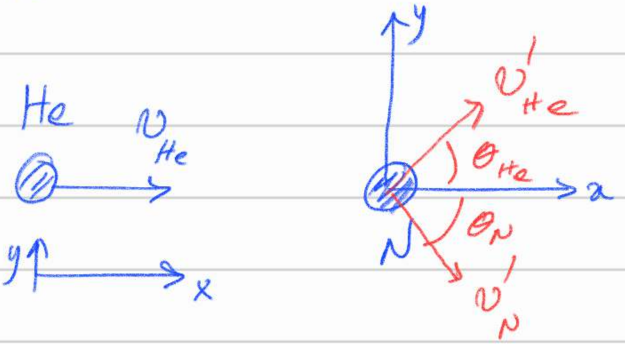
$\frac{d\vec{p}}{dt} = 0 \rightarrow \vec{p} = cts$ (Vector)

Example: 1.1 Analytical and Neumerical approach for Collision phenomenon

پدیده برخورد

Theoretical Part :

بخش نظری



$$\begin{cases} \vec{v}'_{He} = ? \\ v'_N = ? \end{cases} , \quad \text{Elastic collision}$$

$$\bar{F}_{ext} = 0 \Rightarrow \frac{d\bar{P}_{total}}{dt} = 0 \quad \bar{p}_{total} = cts$$

$$\bar{P}_{total}\Big|_{inital} = \bar{p}_{total}\Big|_{final}$$

$$\vec{p}_{int} = \vec{p}^{\,He}_{ini} + \vec{p}^{\,N}_{ini}$$

$$\vec{p}_{final} = \vec{p}^{\,He}_{final} + \vec{p}^{\,N}_{final}$$

و

$$\begin{cases} p^{(x)}_{ini} = p^{(x)}_{fin} \longrightarrow p^{(x)}_{ini} = m_{He} v_{He} \\ p^{(y)}_{ini} = p^{(y)}_{fin} \longrightarrow p^{(y)}_{ini} = 0 \end{cases}$$

Lab. Fram

$$p^{x}_{final} = m_{He} v'_{He} \cos\theta_{He} + m_N v'_N \cos\theta_N = \overbrace{m_{He} v_{He}}^{\text{اولیه}}$$

$$p^{y}_{final} = m_{He} v'_{He} \sin\theta_{He} + m_N v'_N \sin\theta_N = 0$$

$$\begin{cases} v'_N \cos\theta_N = 3.6 \times 10^5 \ m/s \\ v'_N \sin\theta_N = -3.36 \times 10^5 \ m/s \\ v'_N = \sqrt{(v'_N \cos\theta_N)^2 + (v'_N \sin\theta_N)^2} \\ \theta_N = \tan^{-1} \dfrac{v'_N \sin\theta_N}{v'_N \cos\theta_N} = -42.48^\circ \end{cases}$$

Simulation

رهیافت شبیه سازی

* ① Conservation of Energy
* ② Conservation of Linear Momentum

الگوریتم انجام یک شبیه سازی (دینامیک مولکولی)

Molecular Dynamics

خواص مختلف سامانه را بر حسب زمان به ما می دهد

$\langle H \rangle = \bar{E} = U \ldots$, $C_V = \dfrac{\partial \langle H \rangle}{\partial T}\Big|_V$

متوسط

\langle

\rangle

χ, ...

$\boxed{N=2}$ فرض $\longrightarrow$ $\boxed{N \quad \text{دلخواه}}$

$H = H_0 + \cancel{H_1}$ پتانسیل

$$\underbrace{\frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2}_{\text{قبل از برخورد}} = \underbrace{\frac{1}{2} m_1 v_1'^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2'^2}_{\text{بعد از برخورد}}$$

$\boxed{m_1 = m_2}$ فرض

با فرض کشسان بودن ذرات
از کلیت مسئله زیر سؤال نمی‌برد!!
مسئله ساده می‌شود

$$\boxed{v_1^2 + v_2^2 = v_1'^2 + v_2'^2}$$

$$\vec{F}_{external} = 0 \Rightarrow \frac{d\vec{P}}{dt} = 0 \qquad \boxed{\vec{P} = cte}$$

ثابت حرکت

$$m_1\vec{v}_1 + m_2\vec{v}_2 = m_1\vec{v}_1' + m_2\vec{v}_2' \qquad \boxed{m_1 = m_2} \text{ فرض}$$

$$\underbrace{\vec{v}_1 + \vec{v}_2}_{\text{قبل از برخورد}} = \underbrace{\vec{v}_1' + \vec{v}_2'}_{\text{بعد از برخورد}} \longrightarrow \vec{v}_1 - \vec{v}_1' = \vec{v}_2' - \vec{v}_2$$

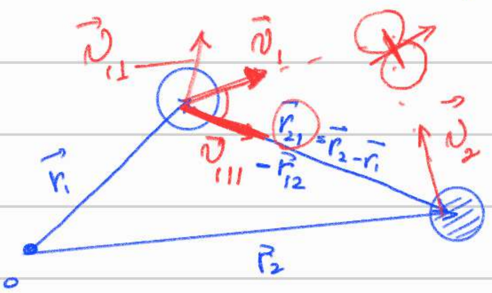
توجه

$$\Delta\vec{v}_1 \equiv \vec{v}_1' - \vec{v}_1$$

$$\Delta\vec{v}_2 \equiv \vec{v}_2' - \vec{v}_2$$

$$\left.\begin{array}{l} -\Delta\vec{v}_1 = \Delta\vec{v}_2 \\ \Delta\vec{v}_1 = -\Delta\vec{v}_2 \end{array}\right\} \Leftrightarrow$$

نیروهای داخلی که به ذرات در هنگام برخورد وارد می‌شود در راستای خط واصل برخورد



$$|r_{12}| = |r_{21}| = r$$

$$\vec{v}_1 = \vec{v}_{1\parallel} + \vec{v}_{1\perp}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \vec{v}_{1\parallel} = \dfrac{(\vec{v}_1 \cdot \vec{r}_{21})}{|r_{21}|}\hat{r}_{21} \\[2ex] \vec{v}_{2\parallel} = \dfrac{\vec{v}_2 \cdot \vec{r}_{12}}{|r_{12}|}\hat{r}_{12} \end{array}}$$

بعد از برخورد

$$\left\{\begin{array}{l} v'_{1\parallel} = v_{2,\parallel} \\ v'_{2\parallel} = v_{1,\parallel} \end{array}\right\} \qquad \boxed{m_1 = m_2}$$

سهم مؤلفه در راستای برخورد ذره دوم بعد از برخورد

سهم مؤلفه در راستای برخورد ذره اول قبل از برخورد

$$v'_{1\perp} = v_{1\perp}$$ → در راستای عمود هم تغییری وارد نمی‌شود

$$v'_{2\perp} = v_{2\perp}$$

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}'_{1\parallel} + \vec{v}'_{1\perp} = \vec{v}_{2,\parallel} + \vec{v}'_{1\perp}$$

$$= v_{2,\parallel} - \vec{v}_{1,\parallel} + \vec{v}_{1,\parallel} + v_{1\perp}$$

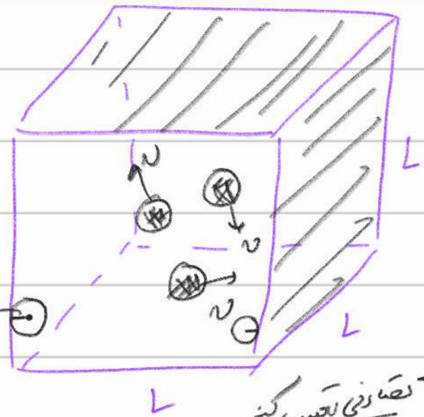
$$\vec{v}'_1 = \left((\vec{v}_2 - \vec{v}_1)\cdot\hat{r}_{21}\right)\hat{r}_{21} + \vec{v}_1$$

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{v}'_1 &= \Delta\vec{v}_1 + \vec{v}_1\\ \vec{v}'_2 &= -\Delta\vec{v}_1 + v_2\end{aligned}}$$

سرعتی که بر هر کدام از ذرات بعد از برخورد اضافه یا کسر می‌شود

Main Algorith

جاسازی



برخورد با دیواره‌ها

برخورد با یکدیگر

$\vec{v}$ ← سرعت‌های ذرات

$\vec{r}$ ← مکان ذرات

تصادفی تعیین کنیم

R = Radius

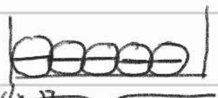
شعاع هر ذره

$$\text{3D}, \begin{Bmatrix} r_x, r_y, r_z \\ v_x, v_y, v_z \end{Bmatrix}$$ هر ذره

① Assigning Random Location for N-Particles

موقعیت هر ذره
$$\begin{Bmatrix} R \leq x \leq L-R \\ R \leq y \leq L-R \\ R \leq z \leq L-R \end{Bmatrix}$$
مکان اولیه

→ Non-overlapping Locatin



مکان اولیه ذرات
$$r_{old} \begin{cases} x \in [R, L-2R\,\mathrm{int}(L/2R)] \\ y \in [R, L-2R\,\mathrm{int}(L/2R)] \\ z \in \ \text{"} \end{cases}$$

② Assigning Velocity $\vec{v}:(v_x, v_y, v_z)$

سرعت اولیه

برداره

بردار

سرعت $p(\vec{v})$ = Maxwell – Boltzmann Distribution

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\left(\frac{K_BT}{m}\right)^{3/2}} e^{-\frac{mv^2}{2K_BT}}$$

تابع توزیع سرعت گر

تابع توزیع تندی

احتمال یافتن ذره با سرعت

تو

$\vec{v}$, $\vec{v}+d\vec{v}$ محدوده

اندازه سرعت

$p(s) \sim v^2 p(\vec{v})$

Speed

Box–Muller ALgorithm

$$\begin{cases} v_x = \sqrt{-2\ln(1-\xi_1)}\,\cos 2\pi\xi_2 \\ v_y = \sqrt{-2\ln(1-\xi_1)}\,\sin 2\pi\xi_2 \\ v_z = \sqrt{-2\ln(1-\xi_3)}\,\cos 2\pi\xi_4 \end{cases}$$

$1 \equiv$ عدد توزیع $= \left(\frac{K_BT}{m}\right)^{1/2}$

$\boxed{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4}$

۴ عدد تصادفی هستند که توسط کامپیوتر تولید شده اند

Call Random Number → $(0, 1)$ — تابع توزیع تخت

~~$0, 1.0000$~~

سرعت ثابت بر در نظر میگیریم

$\boxed{x = x_0 + vt}$

تابع توزیع تخت $\xi \in [0, 1]$

③ $\vec{r}_{New} = \vec{r}_{old} + \vec{v}_{old}\,\Delta t$ — $\vec{r} = \vec{r} + \vec{v}\,\Delta t$

موقعیت جدید ذره بعد از یک

زمان Δt

0.1

$\boxed{\Delta t = 1}$

برخورد انجام میشود یا نه

دیواره

سایر ذرات

④ Call Wall Collision Subroutine

آزمایشی

Call Pair Collision Subroutine

⑤ Subroutine Wall Collision

loop $i=1, N$

if $x_i \leqslant R$ or $x_i \geqslant L-R$

کنسل $v_{ix} = -v_{ix}$

else if $y_i \leqslant R$ or $y_i \geqslant L-R$

$v_{iy} = -v_{iy}$

else if $z_i \leqslant R$ or $z_i \geqslant L-R$

$v_{iz} = -v_{iz}$

End if

End loop

Subroutine Pair Collision

Loop $i=1, N-1$

Loop $j=i+1, N$

$$d = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$$

if $d \leqslant 2R$

$$\Delta \vec{v}_i = \frac{\left[(\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \overbrace{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}^{d} \right] \overbrace{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}^{d}}{d^2}$$

$$\begin{cases} \vec{v}_i = \vec{v}_i + \Delta \vec{v}_i \\ \vec{v}_j = \vec{v}_j - \Delta \vec{v}_i \end{cases}$$

Endif

End loop

End loop

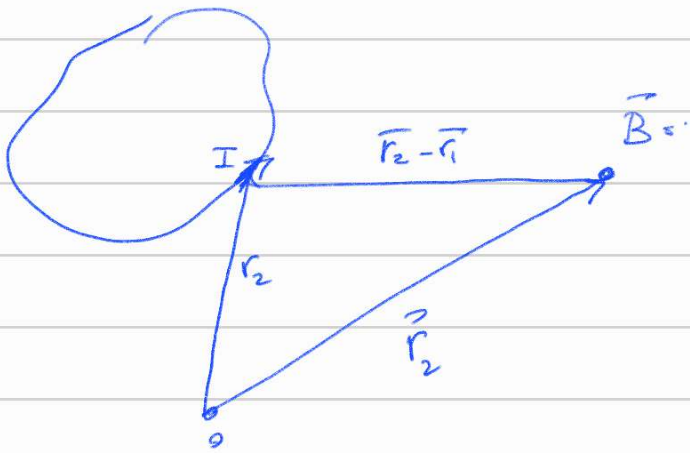
Part B : Electromagnetism

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r^2}$$

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r_{12}^2}$$

انرژی پتانسیل الکتریکی $U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r}$

magnetic field.



$$\vec{B}_I(r_2) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Omega} \frac{\vec{J}(\bar{r}_1) \times (\bar{r}_1 - \bar{r}_2)}{|r_1 - r_2|^3} \, d\Omega$$

$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}_{ext}$

$|\vec{\mu}| = I A$

Electromagnetic Spectrum

1.7

$$\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

$$\mathcal{H}(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

x

تابع پارش: $Z = e^{-\beta \mathcal{H}}$ — ارزش

طبق خواص ترمودینامیکی دست سایر خواص استخراج می‌شود.

$$\boxed{E = \langle \mathcal{H} \rangle}$$

$L(q, \dot{q})$

$x \quad \dot{x}$

$r, v \longrightarrow (r, p)$

$\mathcal{H}(r,p)$ / $L(r,\dot{r})$ — دارای یک جور اطلاعات هستند

$$\to \mathcal{H}(q,p) = \dot{q}p - L(q,\dot{q})$$

Legendre Transformation

(Page 87 Greiner Thermodynamics and Statistics)

یک ترفند هندسی ← عوض از متغیر یک عوارد

$$L = \int d^d x\, \underbrace{\mathcal{L}(\phi, \partial\phi, \ldots)}_{\text{چگالی لاگرانژی}} \leftarrow \boxed{\text{Field Theory}}$$

Euler-Lagrange Equations → معادلات حرکت

Part c: Kinetic theory of Matter

$\boxed{\langle H \rangle = ?}$

طيب بس

$C_v =$

$\boxed{C_v = \frac{3}{2} R}$