بسم الله الرحمن الرحیم

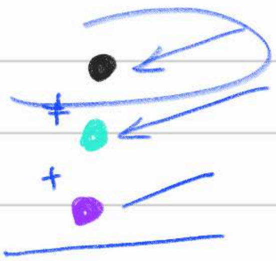
جلسه ۱۸/۹/۱۴۰۰

Virial theorem and Equipartion theorem

قضیه ویریال — قضیه همپاری

Equipartition of Energy

تقسیم انرژی ← هر درجه آزادی که مقدار انرژی از کل بودجه انرژی دریافت می‌کند.



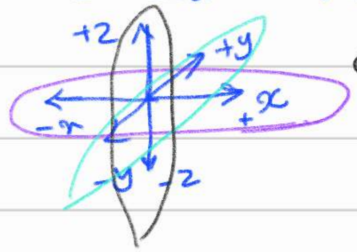
E_{total}

بودجه کل چگونه است؟

از نقطه آماری

3-Dimension , N=1

۳ درجه آزادی



☆ راه اول برای اثبات صورت قضیه با استفاده از هنگرد میکروکانونی $U=E=\langle H\rangle=\text{fixed}$

(Greiner)

☆ راه دوم برای اثبات صورت قضیه: از هنگرد کانونی $U=E=\langle H\rangle\neq c^{ts}$

(Pathria)

Canonical Ensemble.

① صورت قضیه چیست؟

② معنی نتایج چیست؟ چه ابعاد فیزیکی دارد؟

A

B

C

D

① Virial Theorem

$\{\vec{q}, \vec{p}\} \equiv \{\vec{x}\}$ نقطه گذاری

$x_i \in \{\vec{q}, \vec{p}\} : \{(q_i, p_i)\}$ $\quad i = 1 \ldots 2DN$

$2DN$: (q, p)

D: بعد سیستم

N: تعداد ذرات

$$\left\langle x_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right\rangle \overset{?}{=} \delta_{ij} K_B T$$

صورت تعمیم ویریال

ensemble average

$$\left\langle x_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right\rangle = \int d\Gamma \left(x_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right) \rho_c$$

ensemble average

$$= \int d\Gamma_{(x)} \, x_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(\vec{x})}}{Z(T,V,N)}$$

$$= \frac{1}{Z(T,V,N)} \int d\Gamma_{(x)} \underbrace{x_i}_{u} \underbrace{\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} e^{-\beta \mathcal{H}(x)}}_{dV}$$

By-Part Integration

تاکیدی بر انجام انتگرال گیری جزء به جزء

جزء به جزء انتگرالی.

$$\begin{cases} dv \equiv \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} e^{-\beta \mathcal{H}} \longrightarrow V = -\dfrac{1}{\beta} e^{-\beta \mathcal{H}} \Big|_{x_j(1)}^{x_j(2)} \\ u \equiv x_i \longrightarrow u' = \dfrac{\partial x_i}{\partial x_j} \end{cases}$$

مرز

$$\left\langle x_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right\rangle_{ens} = -\frac{x_i}{Z\beta} e^{-\beta \mathcal{H}} \Big|_{x_j(1)}^{x_j(2)} + \underbrace{\frac{1}{\beta Z} \int d\Gamma \frac{\partial x_i}{\partial x_j} e^{-\beta \mathcal{H}}}$$

مرز سیستم صفر در نظر گرفتیم ← صفر هست

$$\left\langle x_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right\rangle_{en} = \frac{1}{\beta Z} \int d\Gamma \overbrace{\frac{\partial x_i}{\partial x_j}}^{\delta_{ij}} e^{-\beta \mathcal{H}}$$

$$= \frac{\delta_{ij}}{\beta Z} \underbrace{\int d\Gamma\, e^{-\beta \mathcal{H}}}_{Z} = \frac{\delta_{ij} \cancel{Z}}{\beta \cancel{Z}}$$

صورت قضیه اثبات شد ✓

$$\boxed{\left\langle x_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right\rangle = \delta_{ij} K_B T}$$

$$\{\vec{q}, \vec{p}\}$$

(۲) حال در این مرحله به این سوال می‌پردازیم که معنی نتیجه بالا چیست؟

* (A) $\{x\} : \{\vec{q}, \vec{p}\}$.

$$\begin{cases} x = q \longrightarrow \left\langle x_i \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right\rangle = \left\langle q_i \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} \right\rangle = \delta_{ij}\, K_B T \\[2ex] x = p \longrightarrow \left\langle x_i \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right\rangle = \left\langle p_i \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \right\rangle = \delta_{ij}\, K_B T \end{cases}$$

شکل‌های کلی‌تر را در نظر بگیرید:

☆ $$\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p}) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}$$

N ذره آزاد در سه بعد ($D=3$)

☆ $$\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p}) = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_i^2 \right)$$

N تا نوسانگر هماهنگ در سه بعد

$3N \to DN$

ضریب ثابت

☆ $$\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p}) = \sum_{i=1} \left[A_i p_i^2 + B_i q_i^2 \right]$$

در مثال: $A_i = \frac{1}{2m}$, $B_i = \frac{1}{2} m \omega^2$

☆ $$\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p}) = \sum_{i=1}^{DN} \left[A_i p_i^{\gamma} + B_i q_i^{\alpha} \right]$$

مثبت مثبت

برای این شکل‌ها کلی

$$\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p}) = \sum_{i=1}^{DN} \Big[\underbrace{A_i p_i^2}_{\text{انرژی جنبشی}} + \underbrace{B_i q_i^2}_{\text{انرژی پتانسیل}} \Big]$$

$$q_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = q_i (2 B_i q_i) = 2 B_i q_i^2 \longrightarrow \boxed{B_i q_i^2 = \frac{1}{2}\left(q_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right)}$$

$$p_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = p_i (2 A_i p_i) = 2 A_i p_i^2 \longrightarrow \boxed{A_i p_i^2 = \frac{1}{2}\left(p_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right)}$$

$$\sum_{i=1}^{DN} A_i p_i^2 + B_i q_i^2 = \sum_{i=1}^{DN} \frac{1}{2}\left(p_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}\right) + \frac{1}{2}\left(q_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}\right)$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\left[\sum_{i=1}^{DN}\left\{\left(p_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}\right) + \left(q_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}\right)\right\}\right]$$

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{DN}\left\{\underbrace{\left\langle p_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}\right\rangle}_{K_B T} + \underbrace{\left\langle q_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}\right\rangle}_{K_B T}\right\}$$

$$E = \frac{1}{2}\left[DN\, K_B T + DN\, K_B T\right]$$

f = # of Degree of freedom   تعداد درجه آزادی

$$= \frac{1}{2}(\underbrace{2DN}_{f})\, K_B T$$

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle = E = f\, \underbrace{\frac{1}{2} K_B T}$$

سهم هر درجه انرژی

تعداد درجات آزادی سیستم

☆ فرض $D = 3 \longrightarrow \boxed{\langle \mathcal{H} \rangle = 6N \frac{1}{2} K_B T = 3N K_B T}$

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{3N}\left[\underbrace{A_i p_i^2}_{3N} + \underbrace{B_i q_i^2}_{3N}\right] \longrightarrow f = 6N$$

☆ فرض $D=3$

$N=1$

$$\mathcal{H}=\sum_{i=1}^{3N} A_i\, p_i^2=\sum_{i=1}^{3N}\frac{p_i^2}{2m}$$ گاز ایده‌آل

$$\langle \mathcal{H}\rangle = f\,\frac{1}{2}K_BT = 3N\,\frac{1}{2}K_BT$$

$f=3N$

$$\boxed{U=\frac{3}{2}NK_BT}$$

گاز ایده‌آل در سه بعد با N ذره

نتیجه: به ازای هر درجه آزادی (هر جمله موجود در هامیلتونی که داریم

p^2 یا q^2) —— $\frac{1}{2}K_BT$ نسبت می‌دهیم

اگر f تا جمله داشته باشیم (تعداد درجه آزادی) ←

$$\langle \mathcal{H}\rangle = f\,\frac{1}{2}K_BT$$

اگر جمله به صورت تابع p^γ باشد ← $\frac{1}{\gamma}K_BT$ به ازای هر جمله

$$\boxed{\delta_{ij}K_BT=\left\langle q_i\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j}\right\rangle=\left\langle p_i\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j}\right\rangle}$$

$\frac{1}{\gamma}K_BT$ ← p^γ , q^γ

مفهوم تقسیم انرژی کل به درجات آزادی

$\frac{1}{2}K_BT$

B

کولف خاصیت ویژگی یک سیستم ویریالی

$$\star \quad \left\langle q_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} \right\rangle = \left\langle p_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \right\rangle = \delta_{ij} K_B T$$ صورت قضیه

$$\star \quad \boxed{\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = +\dot{q}_i} \quad , \quad \boxed{\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = -\dot{p}_i}$$

$i=j$

$$\Rightarrow \quad K_B T = \left\langle q_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right\rangle = \left\langle q_i \left(-\dot{p}_i\right) \right\rangle$$

$$\boxed{K_B T = -\left\langle q_i \dot{p}_i \right\rangle}$$

نیروی وارد بر ذره iام

$i:(x,y,z)$ اگر در ۳ بعد ، $N=1$

$$\left.\begin{aligned} -\langle q_x \dot{p}_x \rangle &= K_B T \\ -\langle q_y \dot{p}_y \rangle &= K_B T \\ -\langle q_z \dot{p}_z \rangle &= K_B T \end{aligned}\right\} \quad -\left\langle \sum_{i=1}^{3} q_i \dot{p}_i \right\rangle = 3 K_B T$$

$$\boxed{-\langle \vec{q} \cdot \dot{\vec{p}} \rangle = 3 K_B T}$$

نیرو $F = \frac{dp}{dt}$

معنی فیزیکی چیست؟

$$-\langle \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \rangle = D\, K_B T$$

تعداد بعد

ذره i ام

مختصات ذره i ام در سیستم

نیروی وارد به ذره i ام

$D = 3$

$N = 1$

ذره آزاد $\quad H_{Kin} = \sum_{i=1}^{3} \frac{p_i^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$

از تساوی تقسیم انرژی $\longrightarrow$ $\boxed{\langle H_{Ki} \rangle = 3\, \frac{1}{2} K_B T = \frac{3}{2} K_B T}$

$$\boxed{-\langle \vec{r} \cdot \vec{F} \rangle = 3 K_B T}$$

مقایسه کنید:

$$\boxed{-\langle \vec{r} \cdot \vec{F} \rangle = 2 \langle H_K \rangle}$$

فرض کنید بتوان نیروی وارد به ذره را برحسب $\vec{F} = -\vec{\nabla} V$ نوشت

$$-\langle \vec{r} \cdot (-\vec{\nabla} V) \rangle = \langle \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V \rangle = 2 \langle H_{Kin} \rangle$$

فرض کنید $V \propto -r^{-\beta}$ (نیروی گرانش ، $-\frac{1}{r}$ ، $\beta=1$)

$$\langle r\cdot\vec{\nabla} V\rangle = -\beta\langle V\rangle$$

$$-\beta\langle V\rangle = 2\langle H_{Kin}\rangle$$

$$2\langle H_{Kin}\rangle + \beta\langle V\rangle = 0$$

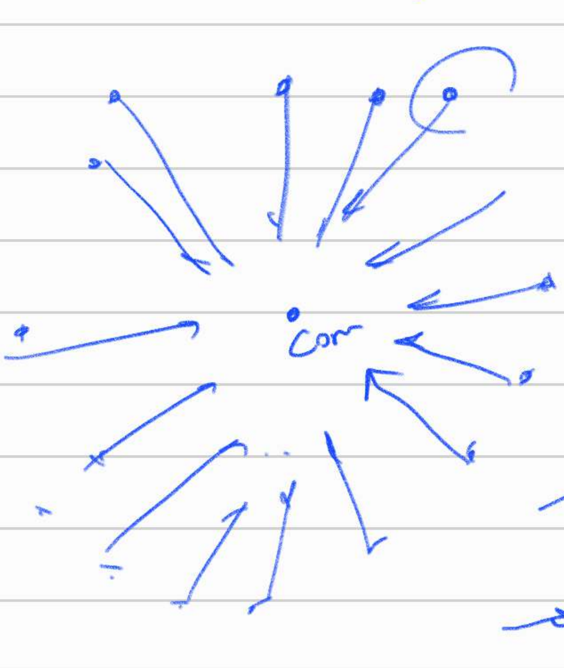
$\beta=1$

$$\boxed{2\langle H_{Kin}\rangle + \langle V\rangle = 0}$$

انرژی جنبشی　　　انرژی پتانسیل

سیستمی که در پایدار شده است یعنی رابطه بالا بین انرژی جنبشی و پتانسیل آن وجود دارد

هر چقدر که انرژی پتانسیل منفی تر شود، لازم است انرژی جنبشی بزرگتر شود



یک سیستم در حال رمبش مدام انرژی پتانسیل منفی تر می شود و در نتیجه انرژی جنبشی زیادتر می شود.

$p^{(2)}$　　$q^{(-1)}$

$$2\langle H_{Kin}\rangle + \langle V\rangle = 0$$

تعادل حاصل نمی تواند تبدیل شود به سیاهچاله

مطالعه فشار یک سیستم ذره‌ای

$$-\langle \vec{r}\cdot\vec{F}\rangle = 3K_BT$$

N ذره

$$-\left\langle \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i\cdot\vec{F}_i \right\rangle = 3NK_BT$$

نیروی وارد بر ذرات

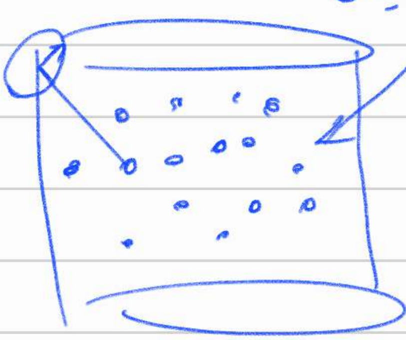
فرض گاز ایده‌آل

$PV = NK_BT$

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{(\vec{p}_i)^2}{2m}$$

نقش انرژی جنبشی

حاوی گاز ایده‌آل



دارای برخورد با دیواره

$$P=\frac{F}{A}$$

$$dF = P\,dA$$

الان نیرو

الان سطح محفظه

فشار درون محفظه

برخورد ذرات با دیواره

نیروی ذرات درون شود

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} \bar{r}_i \cdot \bar{F}_i \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \bar{r}_i \cdot (-\bar{F}_i') \right\rangle$$

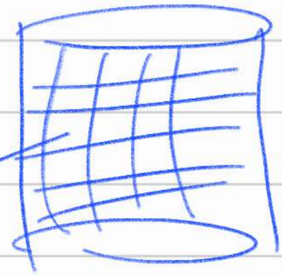
نیروی وارد بر ذره

نیروی وارد بر سطح در اثر برخورد ذره ام

$$\vec{F}'$$

$$\underline{3NK_BT} = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \bar{r}_i \cdot (-\bar{F}_i') \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \bar{r}_i \cdot \underbrace{\bar{F}_i'}_{P\,dA_i} \right\rangle_{ens}$$

این سطح را شبکه بندی می‌کنم به نحوی که مطمئن بشم در هر واحد زمان در این المان سطح فقط یک ذره برخورد داشته.



dA

$$3NK_BT = \left\langle \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \bar{r}_i \cdot p\,\vec{dA}} \right\rangle_{ens}$$

$$= \langle p \rangle_{ens} \oint_{surface} \vec{r} \cdot \vec{dA}$$

$$3NK_BT = \langle p \rangle_{ens} \int \underbrace{d^3r\, \vec{\nabla} \cdot \vec{r}}_{3V}$$

$$\cancel{3}NK_BT = PV\cancel{3} \quad \text{—} \quad \boxed{PV = NK_BT}$$

D

سیستم برهمکنشی :

مکانیک آماری که تا اینجا اغلب سیستم های غیر برهمکنشی توجه می کنیم !

بدون برهمکنش $\mathcal{H} = \sum \frac{p_i^2}{2m} + \mathcal{U}$ 0

به عنوان مثال

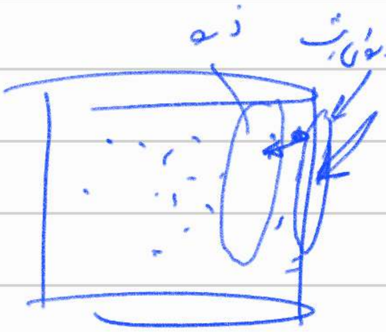
$i \neq j , i < j$

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sum_{i=1} \frac{p_i^2}{2m}}_{\text{بخش بدون برهمکنش (آزاد)}} + \underbrace{\sum_{i,j} U(|r_i - r_j|)}_{\text{بخش برهمکنش بین ذرات}}$$

$PV = N k_B T$ for $\mathcal{U} = 0$

$PV = ?$ for $\mathcal{U} \neq 0$

به طور شهودی اگر اندرکنش بین ذرات جاذب باشد آن موقع انتظار داریم که



سطح

فشار نسبت به حالتی که هیچ اندرکنش جاذب وجود نداشته باشد کم شود.

$$\mathcal{H} = \sum \frac{p_i^2}{2m} + \underbrace{\sum_{ij}{}' \; u(|r_i - r_j|)}$$

$$-\left\langle \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \right\rangle = 3NK_B T$$

قضیه ویریال

نیرویی که به ذره ام وارد می‌شود

$$\vec{F}_i = \underbrace{\vec{F}_i^{(0)}} + \underbrace{\vec{F}_i^{(1)}}$$

نیروی وارده به ذره در اثر برخورد با دیواره

نیروی وارد به ذره در اثر اندرکنش

$$-\underbrace{\left\langle \sum \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{(0)} \right\rangle} - \underbrace{\left\langle \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{(1)} \right\rangle} = \underbrace{3NK_B T}$$

به دلیل برخورد. ایده‌ی دیواره‌ی گاز فشار در کل؛

اثرات برهمکنش بین ذرات

به دلیل اندرکنش

قضیه ویریال

$$3PV - \left\langle \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{(1)} \right\rangle = 3NK_B T$$

$$3PV = 3NK_B T + \left\langle \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{(1)} \right\rangle$$

$$\boxed{PV = Nk_BT + \frac{1}{3}\left\langle \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \right\rangle} \quad (1)$$

اولیه [illegible]

جمله اصلاحی

چگونه حساب می‌شود؟ ← به عنوان یک تمرین حل کنید.

اگر نیرو جاذبه باشد یعنی

در خلاف بردار مکان ذره وارد می‌شود پس

$\vec{F}_i \cdot \vec{r}_i < 0$