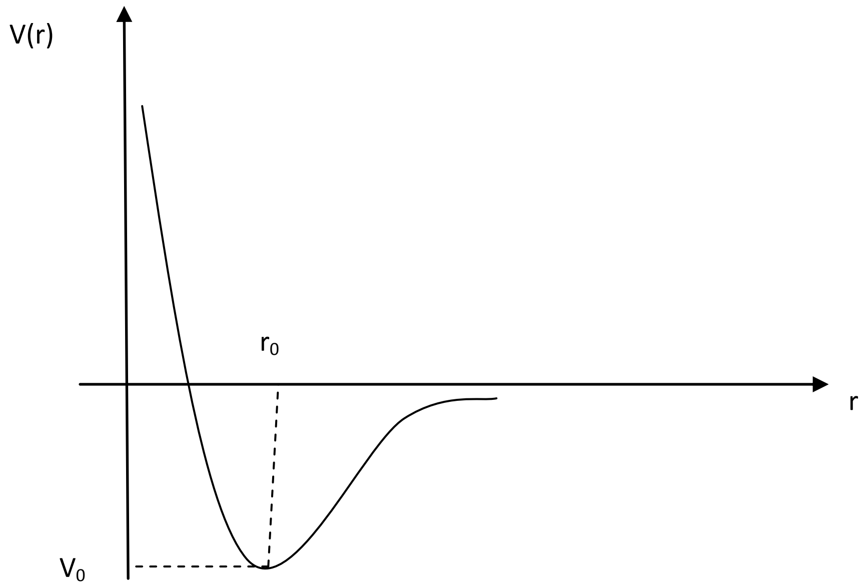
تذكير المكانيك التحليلي

جمل الجسيمات

لنفترض أن N جسيم متماثل ذات كتلة m والاحداثيات q_i (t),i=1,2,…N واقعة داخل حقل خارجي $U(x_1,x_2,\ldots x_N)$ (على سبيل المثال مجال الجاذبية) ، ومتفاعلة مثنى مثنى بكمون $V(x_i-x_j)$. مثلا " كمون لينارد -جونز التجريبي" ، الذي يصف التنافر قصير المدى والتجاذب بعيد المدى. بالنسبة لغاز خامل ، يتكون على سبيل المثال من ذرات ا لأرغون ، يمثل هذا الكمون بالمنحني التالي:



حيث $r_0=3.8A°$ و $V_0=0.01eV$.

لتكن p_i, i=1,2,…N اندفاعات الجسيمات، $p_i=mv_i$ ، حيث $v_i= dq_i/dt$ سرعة الجسيم i .عبارة الطاقة الكلية، وهي مجموع الطاقة الحركية والطاقة الكامنة للنظام المتكون من N جسيم ، تكتب على النحو النالي :

$$.\mathcal{H}=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m}+\sum_{i<j}V\left(q_i-q_j\right)+U(q_1,q_2,\ldots\ldots q_N)$$

تعتبر $\mathcal{H}$ دالة للإحداثيات المعممة والاندفاعات المعممة لكل جسيمات النظام، وتدعى **بدالة الهاميلتونيان** وهي تسمح لنا بايجاد المعالدلات الزمنية للحركة،وذالك بحل مايسمى **بالمعادلات القانونية** او **معادلات هاميلتون:**

$$\dot{p}_i=\frac{dp_i}{dt}=-\frac{d\mathcal{H}}{dq_i} \quad , \quad \dot{q}_i=\frac{dq_i}{dt}=\frac{d\mathcal{H}}{dp_i} \qquad (1.1)$$

الفضاء الطوري

حل المعادلات (1.1) يسمح بتحديد حالة الجملة المشكلة من N جسيم في اية لحظة، اي الحداثيات والاندفاعات **($q_1(t),..,q_N(t), p_1(t), \ldots,p_N(t)$)** وهي تمثل في **الفضاء الطوري** في اي لحظة ،الفضاء الذي محاوره الاحداثيات المعممة والاندفاعات المعـممة لجسيمـــات الجملــة اي الفضاء الذي بعده 6N ، بنقطة تدعى **الحالة المــيكروسكوبية (micro-état)** ويرمز لها بالرمز Γ . واضح انه من اجل نظام مشكل من 10^{23} جسيم يكون بعد الفضاء الطوري هائل جدا (gigantesque) .حل المعادلات (1.1) يسمح بربط الحالة البتدائية Γ_0 لما t=0 بالحالة$\Gamma(t)$ في اللحظة t عبر مسار، يمثل مجموعة النقاط $\Gamma(t)$ لما يتغير الزمن،و يسمى **بالمسار في الفضاء الطوري.**

نظرية

في أي لحظة t تكون الطاقة محفوظة:

$$\mathcal{H}(\Gamma(t)) = \mathcal{H}(\Gamma_0) \qquad (1.2)$$

البرهان: باستخدام المعادلات القانونية(1.1) ،نحصل على :

$$\frac{d\mathcal{H}(\Gamma(t))}{dt} = \frac{\partial\mathcal{H}(\Gamma(t))}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial\mathcal{H}(\Gamma(t))}{\partial p_i}\dot{p}_i = 0$$

معادلة ليوفيل L'´Equation de Liouville

1- دور المجموعة في الميكانيك الاحصائي

يغدو احيانا كثيرة حل المعادلات (1.1) مستحيلا عندما تكون N كبيرة،وبالتالي عدم معرفة احالة الميكروسكوبية Γ التي يتواجد بها النظام. مما يضطرنا الى معالجة المسألة احتماليا . فاذا كان $P(\Gamma)$ قانون احتمال بحيث يكون $P(\Gamma)d\Gamma$ احتمال تواجد الجملة في الحجم العنصري $d\Gamma = dq_1 \ldots d_N dp_1 \ldots dp_N$ حول النقطة Γ من الفضاء الطوري. بطبيعة الحال يجب ان يكون:

$$\int_{\mathbb{R}^{6N}} P(\Gamma)d\Gamma = 1 \qquad (1.3)$$

عموما يكون $P(\Gamma)$ متغيرا بمرور الزمن،لكن عندما يكون النظام متوازنا يصبح مستقلا عن الزمن.

ملاحظة:

ليكن A مقدار فيزيائي ما مقاس ،يأخذ القيمةَ $A(\Gamma)$ عندما تكون الجملة في الحالة الميكوسكوبية Γ .نستطيع حساب قيمته المتوسطة :

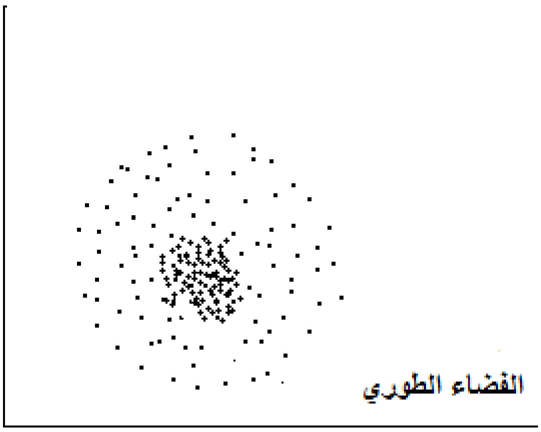
$$\langle A\rangle = \int A(\Gamma)P(\Gamma)d\Gamma \qquad (1.4)$$

وهي تعتبر كتوقع نظري لنتيجة القياس التجريبي لـ A.

غالبا ما نعتبر $\rho(\Gamma)$ الكثافة في الفضاء الطوري ، حيث $\rho(\Gamma) \geq 0$ ،لكن غير مقننة . دائما يمكننا المرور من الكثافة الى الاحتمال على النحو التالي:

$$P(\Gamma) = \frac{\rho(\Gamma)}{\int \rho(\Gamma) d\Gamma} \qquad (1.5)$$

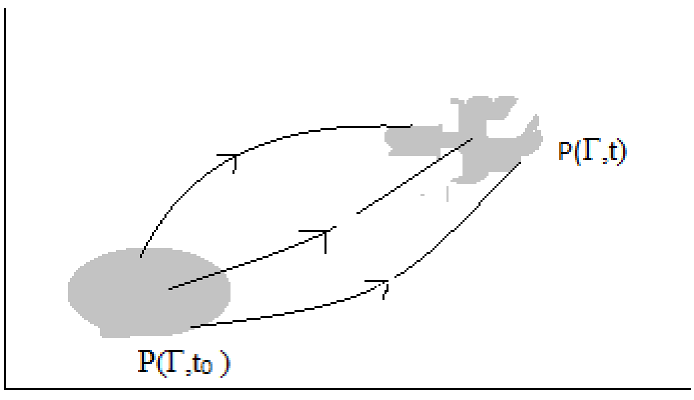
يمكننا تمثيل $\rho(\Gamma) \geq 0$ في الفضاء بمجموعة نقاط ، تزداد كثافتها كلما كبرت $\rho(\Gamma)$.



لندع التعريف الاصلي لقانون الاحتمال لنظام فيزيائي وحيد ، ونتخيل ان كل نقطة من تلك النقاط تمثل نظام مختلف(او الادق نسخة من النظام في حالة مختلفة)،ومن هنا جاء مفهوم المجموعة لـ $\rho(\Gamma)$

2- التدفق في فضاء الحالات

لنعتبر في اللحظة t_0 مجموعة نقاط في الفضاء الطوري ذات كثافة $\rho(\Gamma, t_0)$ تابعيتها للزمن ،حيث ظهرنا تابعيتها للزمن. بمرور الزمن ستكون كل نقطة من دعامة $\rho(\Gamma, t_0)$ نقطة انطلاق لمسار في الفضاء الطوري.
في كل لحظة $t > t_0$ تشكل اطراف(نهايات) المسارات كثافة جديدة $\rho(\Gamma, t)$. المسارات تحددها معدلات الحركة (1.1)،و بالتالي تحدد العلاقة بين $\rho(\Gamma, t_0)$ و $\rho(\Gamma, t)$.



نظرا الى انه لا توجد نقطة في اللحظة t_0 تختفي بمرور الزمن ،ولا توجد نقطة تظهر دون سابقة، فان الكثافة ρ محفوظة، لذالك تخضع الى المعادلة:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\vec{\nabla}.\left(\rho\vec{V}\right)=0\ ; \qquad\qquad \frac{d\Gamma}{dt}=\vec{V}(\Gamma)$$

تبسط هذه المعادلة على النحو التالي:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\vec{V}.\vec{\nabla}\rho+\rho\vec{\nabla}.\vec{V}=0$$

حيث $\vec{\nabla}\rho$ شعاع بعده 6N ، وهو تدرج ρ

$$\vec{\nabla}\rho\equiv\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_1},\dots\frac{\partial\rho}{\partial q_N},\frac{\partial\rho}{\partial p_1},\dots\frac{\partial\rho}{\partial p_N}\right)$$

و $\vec{\nabla}.\vec{V}$ تباعد الشعاع $\vec{V}$

$$\vec{\nabla}.\vec{V}\equiv\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{3}\left[\frac{\partial\dot{q}_{ik}}{\partial q_{ik}}+\frac{\partial p_{ik}}{\partial\dot{p}_{ik}}\right] \qquad (1.6)$$

اذا ما استخدمنا المعادلات القانونية فاننا نجد ان:

$$V\equiv\left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_1}\dots\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_N}.-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_1}\dots-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_N}\right)$$

اذا ما عوضنا في العبارة (1.6) سنجد ان

$$\vec{\nabla}.\vec{V}=0$$

هذا يعني ان

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{V}.\vec{\nabla}\rho=0\equiv\frac{d\rho}{dt} \qquad (1.7)$$

نظرية:

الكثافة $\boldsymbol{\rho(\Gamma,t)}$ ثابتة ، او بعبارة اخرى الحجم في الفضاء الطوري صامد.

المعادلة (1.7) يمكن اعادة كتابتها كـ :

معادلة ليوفيل:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_i}.\frac{\partial\rho}{\partial q_i} + \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_i}.\frac{\partial\rho}{\partial p_i}\right)$$

باعتبار هذه المعادلة خطية في ρ ،فانه يمكن ايضا كتابتها بالشكل التالي:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \mathcal{L}.\rho$$

حيث يدعى $\mathcal{L}$ بمؤثر ليوفيل (opérateur de Liouville) وهو مؤثر معقد ، لكنه خطي على فضاء كل الكثافات $\rho(\Gamma, t)$. هذه الخطية تسمح لنا بكتابة الحل $\rho(\Gamma, t)$ على النحو التالي :

$$\rho(\Gamma, t) = e^{\mathcal{L}t}\rho(\Gamma, 0)$$

مع ذالك ، فإن هذا الحل شكلي فقط : فعلى الرغم من ان المؤثر $e^{\mathcal{L}t}$ معرف تماما ، يظل بعيد المنال.

المجموعات المستقرة:

عموما المجموعة تتعلق بالزمن. لذالك اي متوسط $\langle A\rangle$، لمقدار فيزيائي ما مقاس محسوب وفق العلاقة (1.4)،سيتعلق الزمن.

مع ذالك بينت التجربة ان النظام المعزول تميل الى الاتزان، وعند بلوغها حالة الاتزان تصبح المقادير الفيزيائية الماكروسكوبية ، الواصفة لحالة النظام ، مستقلة عن الزمن. وهذا سبب اهتمامنا بصفة خاصة بالجمل$\rho(\Gamma)$ المتوازنة.
ليس من الصعوبة بمكان ايجاد ان :

$$\frac{d\rho}{dt} \qquad ,\forall\, \varphi$$

اذا كانت $\rho(\Gamma)$ دالة للهاملتونيان $\mathcal{H}$، اي

$$\boldsymbol{\rho(\Gamma) = \varphi\big(\mathcal{H}(\Gamma)\big)}$$

كنا راينا في العلاقة (1.5) ان $\int \rho(\Gamma)d\Gamma$ يمثل مجموع الحالات، سنرمز له بالرمز Z :

$$\boldsymbol{Z = \int \rho(\Gamma)d\Gamma}$$

وتسمى Z ايضا **بدالة التوزيع (fonction de partition)** للمجموعة المتزنة، وهي تلعب دور محوري في حساب الخواص الماكروسكوبية للنظام عند الاتزان.