# Lekce 2
# Mechanika soustavy mnoha částic

**Osnova**

1. Typy mnohočásticových soustav
2. Stupně volnosti
3. Pohybové rovnice
4. Interakce
5. Interakční modely
6. Interakce s okolím
7. Zákon zachování energie
8. Hamiltonova funkce
9. Další zákony zachování
10. Příklady mnohočásticových soustav

# Typy mnohočásticových soustav

**Částice je objekt, jehož rozměry můžeme v rámci daného modelu (alespoň do jisté míry) zanedbat.**

**„do jisté míry"** znamená, že částice může mít vnitřní strukturu

## Klasifikace částic podle vnitřní struktury

- **bezstrukturní:** $\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N$
- **tuhé lineární:** $\vec{r}_1,\Theta_1,\varphi_1;\ldots;\vec{r}_N,\Theta_N,\varphi_N$
- **tuhé nelineární:** $\vec{r}_1,\vec{\Omega}_1;\ldots;\vec{r}_N,\vec{\Omega}_N$

  $\vec{\Omega}_K=(\alpha_K,\beta_K,\gamma_K)\ldots$ Eulerovy úhly
- **flexibilní lineární:** $\vec{r}_1,\Theta_1,\varphi_1,q_1^{(1)},\ldots,q_\nu^{(1)};\ldots$
- **flexibilní nelineární:** $\vec{r}_1,\vec{\Omega}_1,q_1^{(1)},\ldots,q_\nu^{(1)};\ldots$

# Stupně volnosti

Předpokládejme, že se částice skládá z $N$ bezstrukturních jednotek (např. molekula = částice, která se skládá z $N$ atomů = bezstrukturní jednotky).

K popisu stavu takové částice potřebujeme $3N$ souřadnic o $3N$ přidružených hybností (viz lekce 1).

**[souřadnice, přidružená hybnost] = stupeň volnosti**

## Klasifikace stupňů volnosti

| | | |
|---|---|---|
| ➢ **translační** | - 3 | |
| ➢ **rotační** | - 2 | (lineární částice) |
| | - 3 | (nelineární částice) |
| ➢ **vnitřní (vibrační)** | - $3N$ - 5 | (lineární částice) |
| | - $3N$ - 6 | (nelineární částice) |

Fixace různých stupňů volnosti odpovídá různým úrovním přesnosti popisu systému (modelu).

# Pohybové rovnice (bezstrukturní částice)

## Newtonovy pohybové rovnice

$$\begin{aligned} m_1\ddot{\vec{r}}_1 &= \vec{F}_1(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N) \\ &\cdots \\ m_N\ddot{\vec{r}}_N &= \vec{F}_N(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N) \end{aligned} \quad\Leftrightarrow\quad \begin{aligned} \dot{\vec{r}}_1 &= \vec{p}_1/m_1, \quad \dot{\vec{p}}_1 = \vec{F}_1(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N) \\ &\cdots \\ \dot{\vec{r}}_N &= \vec{p}_N/m_N, \quad \dot{\vec{p}}_N = \vec{F}_N(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N) \end{aligned}$$

**Matematicky se jedná o soustavu**

- $3N$ vázaných nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic 2. řádu
- $6N$ vázaných nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu

## Počáteční podmínky

$$\begin{aligned} \vec{r}_K(t=t_0) &= \vec{r}_{0K}, \;\; \dot{\vec{r}}_K(t=t_0) = \vec{v}_{0K} \\ \vec{r}_K(t=t_0) &= \vec{r}_{0K}, \;\; \vec{p}_K(t=t_0) = \vec{p}_{0K} \end{aligned} \qquad (K=1,\ldots,N)$$

# Interakce

## Síly

Interakce obvykle reprezentujeme silami $\vec{F}_1, \ldots, \vec{F}_N$, které závisejí zpravidla na polohách částic

$$\vec{F}_K = \vec{F}_K(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N),$$

někdy ale i na rychlostech/hybnostech (Lorentzova síla)

$$\vec{F}_K = \vec{F}_K(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; \vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N).$$

## Potenciál

Skalární funkce $V = V(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)$ splňující $\forall K = 1, \ldots, N$

$$\vec{F}_K = -\nabla_K V \equiv -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}_K} \equiv -\left[\frac{\partial V}{\partial x_K}, \frac{\partial V}{\partial y_K}, \frac{\partial V}{\partial z_K}\right]$$

**Příklad** – elektrostatický potenciál

$$V(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_K) = \sum_{I=1}^{N-1} \sum_{J=I+1}^{N} \left[\frac{1}{4\pi\varepsilon_o} \frac{Q_I Q_J}{\left|\vec{r}_I - \vec{r}_J\right|}\right]$$

# Interakční modely

## Předpoklad párové aditivity interakcí

$$V(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N)=\sum_{I=1}^{N-1}\sum_{J=I+1}^{N} v_2^{(IJ)}(\vec{r}_I,\vec{r}_J)=\sum_{I=1}^{N-1}\sum_{J=I+1}^{N} v_2(|\vec{r}_I-\vec{r}_J|)$$

**Modely párových potenciálů $v_2$**

- empirické (experiment)
- semiempirické (experiment+teorie)
- teoretické (jen teorie)

## Párově neaditivní interakce

$$V(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N)=\sum_{I=1}^{N-1}\sum_{J=I+1}^{N} v_2^{(IJ)}(\vec{r}_I,\vec{r}_J)+\sum_{I=1}^{N-2}\sum_{J=I+1}^{N-1}\sum_{K=J+1}^{N} v_3^{(IJK)}(\vec{r}_I,\vec{r}_J,\vec{r}_K)+\ldots$$

Neaditivní interakční členy mají velmi komplikovanou strukturu, proto se vždy omezujeme jen na $v_3$ !

# Interakce s okolím

**Vlivy okolí**

- působení částic, které nejsou do modelu explicitně zahrnuty
- stěny nádoby
- interakce s termostatem

**Zahrnutí**

$$\vec{F}(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;q_1,\ldots,q_\alpha)=\vec{F}_{\text{int}}(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N)+\vec{F}_{\text{ext}}(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;q_1,\ldots,q_\alpha)$$

vzájemná interakce částic

interakce s okolím

$$V(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;q_1,\ldots,q_\alpha)=V_{\text{int}}(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N)+V_{\text{ext}}(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;q_1,\ldots,q_\alpha)$$

**Příklad** – Tuhá kulová nádoba

$$V_{\text{ext}}(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;R_0)=\sum_{K=1}^{N}V_{\text{ext}}^{(1)}(\vec{r}_K,R_0),\quad \text{kde}\quad V_{\text{ext}}^{(1)}(\vec{r}_K,R_0)=\begin{matrix}0 & |\vec{r}_K|\leq R_0\\ +\infty & |\vec{r}_K|>R_0\end{matrix}$$

# Zákon zachování energie

Nezávisí–li potenciál explicitně na čase $\left(\partial V / \partial t = 0\right)$, zachovává se celková energie

$$E \equiv \sum_{K=1}^{N} \frac{\vec{p}_K^{\,2}}{2m_K} + V(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_K; q_1, \ldots, q_\alpha)$$

a platí tedy

$$\frac{dE}{dt} \equiv \dot{E} = 0,$$

dosadíme-li za $\vec{p}_{\mathrm{K}} = \vec{p}_{\mathrm{K}}(t)$ a $\vec{r}_{\mathrm{K}} = \vec{r}_{\mathrm{K}}(t)$ řešení pohybových rovnic.

Energie hraje v mnohočásticových soustavách ze všech zachovávajících se veličin (integrály pohybu) nejdůležitější roli!

# Hamiltonova funkce

$$\boxed{H = H(\vec{p}_1,\ldots,\vec{p}_N,\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N,q_1,\ldots,q_\alpha) = \sum_{K=1}^{N}\frac{\vec{p}_K^{\,2}}{2m_K} + V(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;q_1,\ldots,q_\alpha)}$$

## Zákon zachování energie

$$\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{\vec{p}_K,\vec{r}_K} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dH}{dt} \equiv \dot{H} = 0$$

## Hamiltonovy pohybové rovnice

Vzhledem k tomu, že platí

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_K} = \frac{\vec{p}_K}{m_K}, \qquad \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_K} = \frac{\partial V}{\partial \vec{r}_K}$$

můžeme Newtonovy pohybové rovnice přepsat do tvaru

$$\dot{\vec{r}}_K = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_K}, \qquad \dot{\vec{p}}_K = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_K}.$$

# Další zákony zachování

## Zákon zachování hybnosti

$$\frac{d}{dt}\sum_{K=1}^{N}\vec{p}_K = \vec{0}$$

## Zákon zachování momentu hybnosti

$$\frac{d}{dt}\sum_{K=1}^{N}(\vec{r}_K \times \vec{p}_K) = \vec{0}$$

## Zákon zachování hmotnosti a náboje

$$\frac{d}{dt}\sum_{K=1}^{N} m_K = 0 \quad \left(\frac{dm_K}{dt} = 0 \quad \forall K = 1,\ldots,N\right)$$

$$\frac{d}{dt}\sum_{K=1}^{N} Q_K = 0 \quad \left(\frac{dQ_K}{dt} = 0 \quad \forall K = 1,\ldots,N\right)$$

**Zajímavost**

Zákony zachování souvisejí s prostoročasovými symetriemi (teorém E. Noetherové)

- energie – homogenita času
- hybnost – homogenita prostoru
- moment hybnosti - izotropie prostoru

# Příklady mnohočásticových systémů

**Hvězdokupa**

$$V=\sum_{I=1}^{N-1}\sum_{J=I+1}^{N}\left(-\kappa\frac{m_I m_J}{\left|\vec{r}_I-\vec{r}_J\right|}\right)$$

**Izolovaná molekula**

$$V=V\left(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N\right)$$

Obecně velmi komplikovaná funkce souřadnic počítaná metodami kvantové chemie.

**Atomární plyn**

$$V=V_{\text{int}}\left(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N\right)+V_{\text{ext}}\left(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;q_1,\ldots,q_\alpha\right)$$

$$V_{\text{int}}\left(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N\right)=\sum_{I=1}^{N-1}\sum_{J=I+1}^{N}v_2\left(\left|\vec{r}_I-\vec{r}_J\right|\right)+\left(\sum_{I=1}^{N-2}\sum_{J=I+1}^{N-1}\sum_{K=J+1}^{N-2}v_3\left(\vec{r}_I,\vec{r}_J,\vec{r}_K\right)\right)$$

$$V_{\text{ext}}\left(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;q_1,\ldots,q_\alpha\right)=\sum_{I=1}^{N}V_{\text{ext}}^{(1)}\left(\vec{r}_I;q_1,\ldots,q_\alpha\right)$$

# Doporučená literatura

J. KVASNICA, A. HAVRÁNEK, P. LUKÁČ, B. SPRUŠIL
*Mechanika*
Academia, Praha 1988