Projet Dynamique Moléculaire

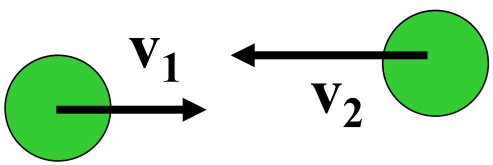
- Hypothèses :
  - Ensemble de particules se déplaçant dans R^2
  - Toutes de même masse, pas de moment cinétique.
  - Mouvement balistique → rectiligne uniforme entre 2 chocs
  - Interaction de type cœur dur lors d'un choc
  - Choc élastique → sans perte d'énergie
  - Choc uniquement qu'entre 2 particules → interaction à 2 corps

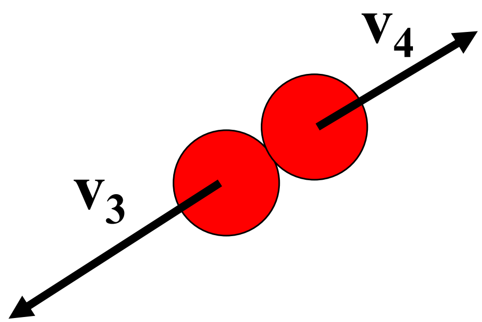
http://hypo.ge.ch/www/physic/simulations/gaz/chaleur_atomes.html

http://www.lptl.jussieu.fr/users/viot/COURS/coursdea2003/node35.html

Lois de conservation lors d'un choc

- dans le référentiel du laboratoire



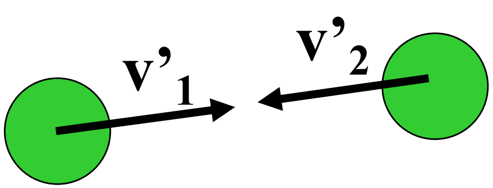


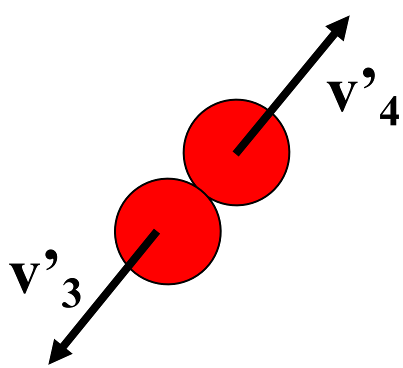
$$\begin{cases} \mathbf{V_1} + \mathbf{V_2} = \mathbf{V_3} + \mathbf{V_4} \\ \mathbf{V}_1^2 + \mathbf{V}_2^2 = \mathbf{V}_3^2 + \mathbf{V}_4^2 \end{cases}$$

- dans le référentiel du centre de masse (CDM) = référentiel galiléen

$$2\,\mathbf{OG} = \mathbf{OM_1} + \mathbf{OM_2} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{V_G} = \frac{1}{2}\left(\mathbf{V_1} + \mathbf{V_2}\right) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{V}_3 + \mathbf{V}_4\right)$$

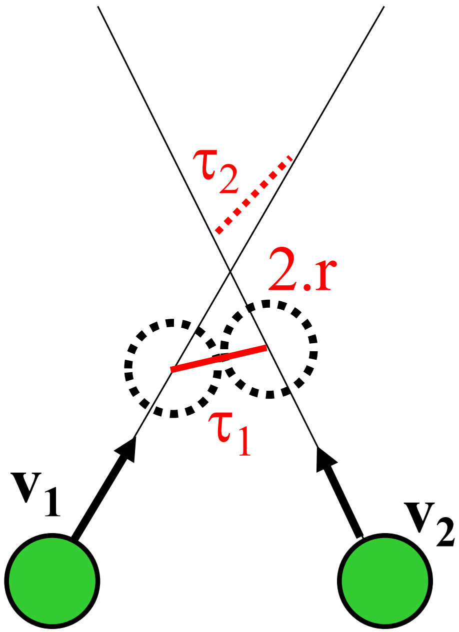
$$\mathbf{V}_n^{/} = \mathbf{V}_n - \mathbf{V_G}$$





$$\begin{cases} \mathbf{V}_1^{/} + \mathbf{V}_2^{/} = 0 \\ \mathbf{V}_3^{/} + \mathbf{V}_4^{/} = 0 \\ \mathbf{V}_1^{/2} + \mathbf{V}_2^{/2} = \mathbf{V}_3^{/2} + \mathbf{V}_4^{/2} \end{cases}$$

Détermination du temps τ de collision



On note r le rayon des particules :

$$\begin{cases} \mathbf{OM_1} = \mathbf{OM_1^0} + \mathbf{V_1}\cdot\tau \\ \\ \mathbf{OM_2} = \mathbf{OM_2^0} + \mathbf{V_2}\cdot\tau \end{cases} \qquad \text{tq} \quad \left\|\mathbf{M_1M_2}\right\| = 2\cdot r$$

$$\left\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right\|^2\cdot\tau^2 - 2\,\mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0 \bullet \left(\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right)\tau + \left\|\mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0\right\|^2 = 4\cdot r^2$$

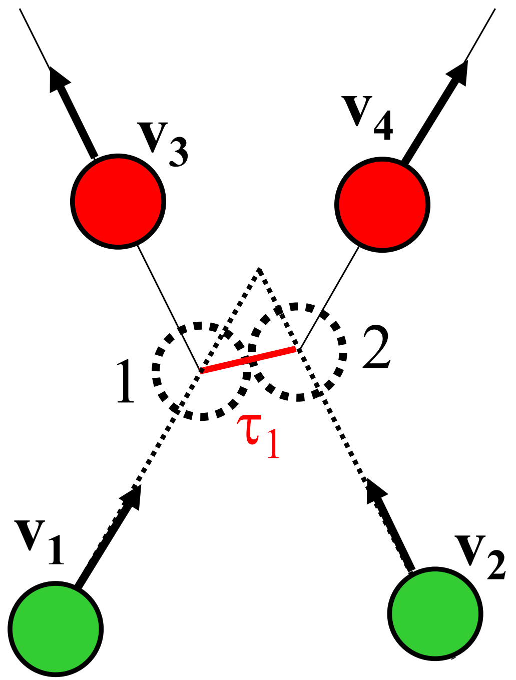
$$\Rightarrow \quad \Delta' = \left(\mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0 \bullet \left(\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right)\right)^2 - \left\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right\|^2\cdot\left(\left\|\mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0\right\|^2 - 4\cdot r^2\right)$$

$$\tau_1 = \frac{\mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0 \bullet \left(\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right)}{\left\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right\|^2} - \frac{\sqrt{\Delta'}}{\left\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right\|^2} \qquad \cancel{\tau_2 = \frac{\mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0 \bullet \left(\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right)}{\left\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right\|^2} + \frac{\sqrt{\Delta'}}{\left\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right\|^2}}$$

En partique dû aux erreurs d'arrondis $\tau_{coll}=|\tau 1|+\varepsilon$

Non Physique

Trajectoires après le choc



Après collision, en prenant l'instant τ_1 comme nouvelle origine pour le temps, les équations des trajectoires dans le référentiel du labo sont

$$\begin{cases} \mathbf{OM_1} = \mathbf{OM_1^0} + \mathbf{V}_3 \cdot t \\ \mathbf{OM}_2 = \mathbf{OM}_2^\mathbf{0} + \mathbf{V}_4 \cdot t \end{cases} \Rightarrow \quad \mathbf{M_1 M_2} = \mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0 + (\mathbf{V}_4 - \mathbf{V}_3)t$$

Interaction entre boules dures $\Rightarrow \quad (\mathbf{V}_4 - \mathbf{V}_3) \bullet \mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0 > 0$

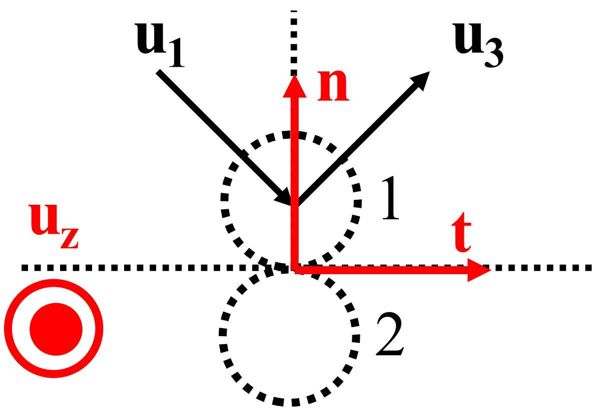
Dans le référentiel du CDM, comme $\begin{cases} \mathbf{V}_3 = \mathbf{V'}_3 + \mathbf{V_G} \\ \mathbf{V}_4 = \mathbf{V'}_4 + \mathbf{V_G} \end{cases}$ avec $\mathbf{V'}_4 = -\mathbf{V'}_3$

$$\boxed{(\mathbf{V}_4 - \mathbf{V}_3) \bullet \mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0 > 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \begin{cases} \mathbf{V'}_4 \bullet \mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0 > 0 \\ \mathbf{V'}_3 \bullet \mathbf{M}_1^0\mathbf{M}_2^0 < 0 \end{cases}}$$

Modèle de chocs spéculaires

On se place dans le référentiel de la particule 2

On note $\mathbf{u_1}$ et $\mathbf{u_2}$ vecteurs unitaires des trajectoires avant et après choc



$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{M_2M_1}}{\left\|\mathbf{M_2M_1}\right\|} \qquad \text{et} \qquad \mathbf{t} = \mathbf{n} \times \mathbf{u}_z$$

A partir de $\mathbf{u}_1 = \dfrac{\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2}{\left\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right\|}$, on construit :

$$\mathbf{u}_3 = (\mathbf{u}_1 \bullet \mathbf{t})\,\mathbf{t} - (\mathbf{u}_1 \bullet \mathbf{n})\,\mathbf{n}$$

On remarque que, dans le CDM : $\mathbf{u_1} = \dfrac{\mathbf{V}_1' + \cancel{\mathbf{V}_G} - \mathbf{V}_2' - \cancel{\mathbf{V}_G}}{\left\|\mathbf{V}_1' + \cancel{\mathbf{V}_G} - \mathbf{V}_2' - \cancel{\mathbf{V}_G}\right\|} = \dfrac{\mathbf{V}_1' - \mathbf{V}_2'}{\left\|\mathbf{V}_1' - \mathbf{V}_2'\right\|}$

$$\boxed{\mathbf{V}_3 = \mathbf{V}_3' + \mathbf{V_G} = \left\|\mathbf{V}_1'\right\| \mathbf{u_3} + \mathbf{V_G} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{V}_4 = -\mathbf{V}_3' + \mathbf{V_G} = -\left\|\mathbf{V}_1'\right\| \mathbf{u_3} + \mathbf{V_G}}$$