

Projet Dynamique Moléculaire

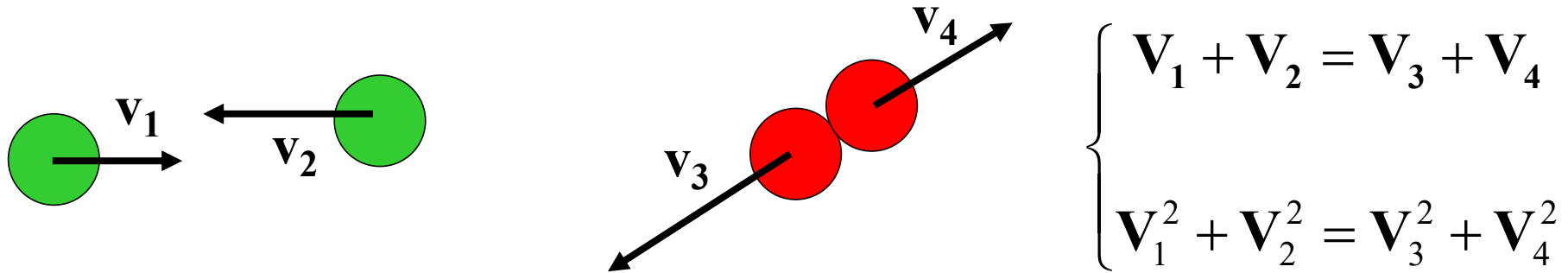
- Hypothèses :
 - Ensemble de particules se déplaçant dans \mathbb{R}^2
 - Toutes de même masse, pas de moment cinétique.
 - Mouvement balistique \rightarrow rectiligne uniforme entre 2 chocs
 - Interaction de type cœur dur lors d'un choc
 - Choc élastique \rightarrow sans perte d'énergie
 - Choc uniquement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

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

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

Lois de conservation lors d'un choc

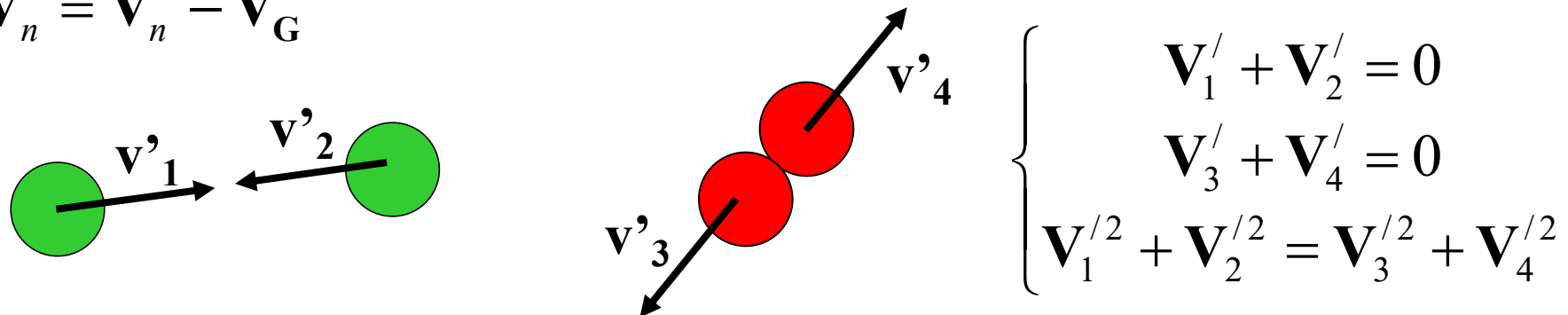
- dans le référentiel du laboratoire



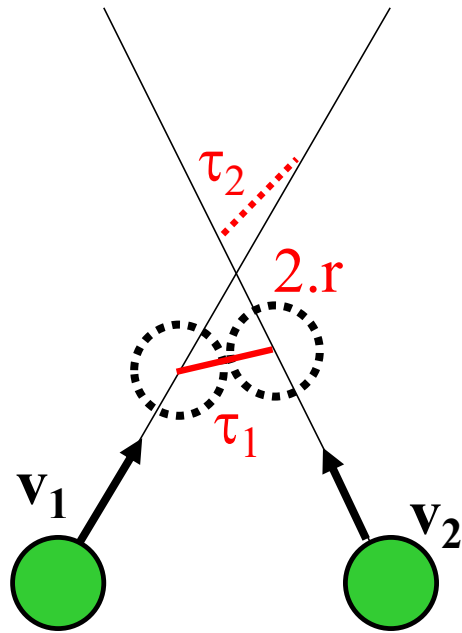
- dans le référentiel du centre de masse (CDM) = référentiel galiléen

$$2\mathbf{OG} = \mathbf{OM}_1 + \mathbf{OM}_2 \Rightarrow \mathbf{V}_G = \frac{1}{2}(\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2) = \frac{1}{2}(\mathbf{v}_3 + \mathbf{v}_4)$$

$$\mathbf{V}'_n = \mathbf{V}_n - \mathbf{V}_G$$



Détermination du temps τ de collision



On note r le rayon des particules :

$$\begin{cases} \mathbf{OM}_1 = \mathbf{OM}_1^0 + \mathbf{V}_1 \cdot \tau \\ \mathbf{OM}_2 = \mathbf{OM}_2^0 + \mathbf{V}_2 \cdot \tau \end{cases} \quad \text{tq} \quad \|\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2\| = 2 \cdot r$$

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

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

$$\tau_1 = \frac{\mathbf{M}_1^0 \mathbf{M}_2^0 \bullet (\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2)}{\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\|^2} - \frac{\sqrt{\Delta'}}{\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\|^2}$$

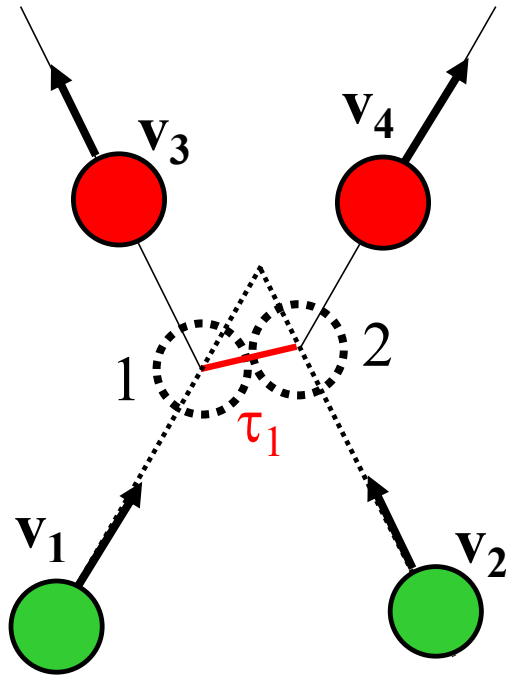
~~$$\tau_2 = \frac{\mathbf{M}_1^0 \mathbf{M}_2^0 \bullet (\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2)}{\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\|^2} + \frac{\sqrt{\Delta'}}{\|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\|^2}$$~~

En pratique dû aux erreurs d'arrondis $\tau_{\text{coll}} = |\tau_1| + \varepsilon$

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



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

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

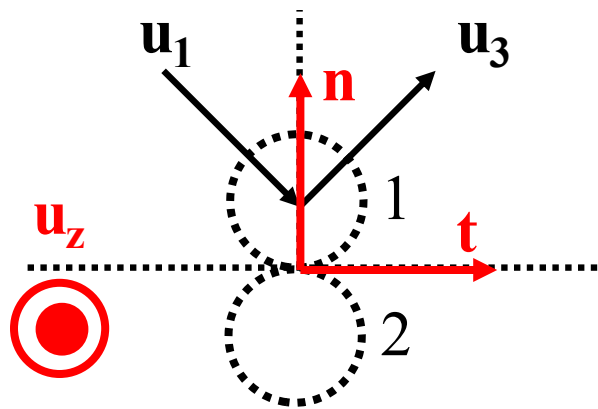
Dans le référentiel du CDM, comme $\begin{cases} \mathbf{V}_3 = \mathbf{V}'_3 + \mathbf{V}_G \\ \mathbf{V}_4 = \mathbf{V}'_4 + \mathbf{V}_G \end{cases}$ avec $\mathbf{V}'_4 = -\mathbf{V}'_3$

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

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



$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1}{\|\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1\|} \quad \text{et} \quad \mathbf{t} = \mathbf{n} \times \mathbf{u}_z$$

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

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

On remarque que, dans le CDM : $\mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{V}_1' + \cancel{\mathbf{V}_G} - \mathbf{V}_2' - \cancel{\mathbf{V}_G}}{\|\mathbf{V}_1' + \cancel{\mathbf{V}_G} - \mathbf{V}_2' - \cancel{\mathbf{V}_G}\|} = \frac{\mathbf{V}_1' - \mathbf{V}_2'}{\|\mathbf{V}_1' - \mathbf{V}_2'\|}$

$$\mathbf{V}_3 = \mathbf{V}_3' + \mathbf{V}_G = \|\mathbf{V}_1'\| \mathbf{u}_3 + \mathbf{V}_G \quad \Rightarrow \quad \mathbf{V}_4 = -\mathbf{V}_3' + \mathbf{V}_G = -\|\mathbf{V}_1'\| \mathbf{u}_3 + \mathbf{V}_G$$

