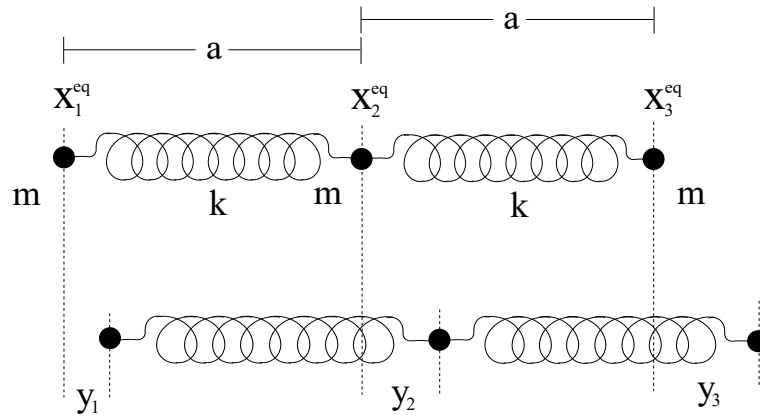


KLASSISCHE MECHANIK

David Gross, Johan Åberg, Markus Heinrich

Übungsblatt 5 Abgabe: 15. November um 12 Uhr

1 Normalmoden



Die Bewegung von Teilchen, die harmonisch wechselwirken, kann in besonders einfache Komponenten zerlegt werden, den sogenannten *Normalmoden*. Diese Moden entsprechen einer kollektiven periodischen Bewegung aller Teilchen mit einer gemeinsamen Frequenz.

Als Beispiel betrachten wir ein Modell eines linearen Moleküls, das aus drei Atomen der Masse m besteht, die entsprechend dem folgenden Potential wechselwirken:

$$V(x_1, x_2, x_3) = \frac{k}{2}(x_2 - x_1 - a)^2 + \frac{k}{2}(x_3 - x_2 - a)^2,$$

wobei $k > 0$ und $a > 0$. Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass sich die Teilchen nur entlang der Achse des Moleküls bewegen können.

Das Molekül befindet sich in mechanischem Gleichgewicht, wenn die Positionen der Atome $x_1 = x_1^{\text{eq}}$, $x_2 = x_2^{\text{eq}}$ und $x_3 = x_3^{\text{eq}}$ die Relationen $x_2^{\text{eq}} - x_1^{\text{eq}} = a$ und $x_3^{\text{eq}} - x_2^{\text{eq}} = a$ erfüllen. Es ist vorteilhaft neue Koordinaten $y_1 = x_1 - x_1^{\text{eq}}$, $y_2 = x_2 - x_2^{\text{eq}}$ und $y_3 = x_3 - x_3^{\text{eq}}$ einzuführen, die die *Auslenkung* aus der Gleichgewichtsposition messen. Das Potential in den neuen Koordinaten lautet:

$$V(y_1, y_2, y_3) = \frac{k}{2}(y_2 - y_1)^2 + \frac{k}{2}(y_3 - y_2)^2 = \frac{1}{2} \vec{y}^t \mathbf{V} \vec{y}, \quad \vec{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}, \quad (1)$$

wobei \mathbf{V} eine 3×3 Matrix ist und t die Transposition bezeichnet, d.h. $\vec{y}^t = [y_1, y_2, y_3]$. Weiterhin gilt $\dot{y}_1 = \dot{x}_1$, $\dot{y}_2 = \dot{x}_2$ und $\dot{y}_3 = \dot{x}_3$.

- a) Bevor wir das Molekül behandeln, wollen wir uns anschauen, wie man im Allgemeinen Normalmoden berechnet. Wir betrachten die Funktion

$$U(y_1, y_2, \dots, y_N) = \frac{1}{2} \vec{y}^t \mathbf{U} \vec{y}, \quad \vec{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}, \quad (2)$$

wobei \mathbf{U} eine beliebige $N \times N$ Matrix ist. Zeigen Sie, dass man immer eine symmetrische Matrix \mathbf{U}' finden kann, so dass $U(y_1, y_2, \dots, y_N) = \frac{1}{2} \vec{y}^t \mathbf{U}' \vec{y}$.

Hinweis: Eine Matrix \mathbf{U}' ist symmetrisch, falls $\mathbf{U}'_{kl} = \mathbf{U}'_{lk}$. (1 Punkte)

- b) Nehmen Sie an, dass die Funktion U in Gl. (2) das Potential einer Menge von Teilchen der Masse m darstellt und dass wir \mathbf{U} symmetrisch wählen. Zeigen Sie, dass die Bewegungsgleichung wie folgt geschrieben werden kann:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{y} = -\mathbf{U} \vec{y}. \quad (3)$$

(1 Punkte)

- c) Um Normalmoden zu finden, machen wir denn Ansatz $\vec{y}(t) = e^{i\omega t} \vec{q}$, wobei \vec{q} ein zeitunabhängiger Vektor und ω eine reelle Zahl ist. Zeigen Sie, dass dieser Ansatz zu einem Eigenwertproblem führt. Was sind die erlaubten Frequenzen ω für einen gegebenen Eigenwert? Geben Sie die entsprechenden Lösungen zu Gl. (3) an. Wie kann man diese kombinieren um sicherzustellen, dass die resultierende Funktion reellwertig ist (und daher eine tatsächliche physikalische Bewegung beschreibt)?

Hinweis: Sie können verwenden, dass wenn \mathbf{U} von einem harmonischen Potential stammt, die Eigenwerte von \mathbf{U} immer reell und nichtnegativ sind (da \mathbf{U} positiv semidefinit ist).

(3 Punkte)

- d) Im Fall, dass \vec{q} ein Eigenvektor zum Eigenwert 0 ist, gibt es noch eine weitere Lösung, die nicht von der Form des Ansatzes aus c) ist. Stattdessen verwenden wir einen Ansatz der Form $\vec{y} = f(t) \vec{q}$ für Gl. (3). Zeigen Sie, dass dies zu einer Differentialgleichung für f führt. Was ist die allgemeine Lösung? Geben Sie die entsprechenden Lösungen für Gl. (3) an.

(2 Punkte)

- e) Nach diesen allgemeinen Überlegungen kommen wir nun zu dem linearen Molekül mit Potential V zurück. Bestimmen Sie die Matrix \mathbf{V} in Gl. (1).

(2 Punkte)

- f) Berechnen Sie Eigenwerte und -vektoren der Matrix \mathbf{V} aus e).

(3 Punkte)

- g) Skizzieren Sie die Bewegung der Normalmoden des linearen Moleküls. Welcher Art von Bewegung entspricht der Eigenwert 0? Mit welchem Erhaltungssatz steht dieser in Verbindung?

(2 Punkte)

- h) Drücken Sie die allgemeine Lösung der Bewegungsgleichung des linearen Moleküls durch seine Normalmoden aus. Stellen Sie sicher, dass die angegebenen Funktionen reellwertig sind.

(2 Punkte)

- i) Wir ändern das Problem nun so, dass das mittlere Teilchen (also das mit Gleichgewichtsposition x_2^{eq}) eine Masse M verschieden von m hat (aber wir lassen das Wechselwirkungspotential ansonsten so wie zuvor). Zeigen Sie, dass die Bewegungsgleichungen wie folgt geschrieben werden können:

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{y} = -\mathbf{W} \vec{y}. \quad (4)$$

Bestimmen Sie die Matrix \mathbf{W} .

Hinweis: Beachten Sie, dass auf der linken Seite von (4) keine Masse auftaucht (im Gegensatz zu (3)). Daher müssen die Massen m und M in der Matrix \mathbf{W} berücksichtigt werden.

(1 Punkte)

- j) Bestimmen Sie die Eigenwerte und -vektoren der Matrix \mathbf{W} und vergleichen Sie diese mit Aufgabe f).

(3 Punkte)

Bemerkung: Der Zweck dieser Aufgabe ist es sich an Konzepte wie harmonische Schwingung und Normalmoden zu gewöhnen und die Beziehung zu Eigenwerten und -vektoren zu verstehen.