Små svängningar

Vi befinner oss vid jämvikt om de generaliserade krafterna är noll,

$$Q_i = -\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_0 = 0$$

$\quad$ tagen i jämviktspunkten $\underset{\sim}{q}_0$

Utveckla kring $\underset{\sim}{q}_0$:

$$q_i = q_{0i} + \eta_i$$

q_{0i} jämviktsläget, η_i avvikelse från jämvikt

Taylor-utveckla V (antag att vi har ett autonomt system)

$$V(q_1, .., q_f) = V(q_{01}, .., q_{0f}) + \sum_i \underbrace{\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_0}_{=0} \eta_i + \frac{1}{2}\sum_{ij}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j}\right)_0 \eta_i \eta_j + \ldots$$

Vi kan byta gen koordinater η_i och stryka den första konstanta termen i V (dvs stryk $V(\underset{\sim}{q}_0)$ = konst.). Potentialen blir då

$$V = \sum_{ij} \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j}\right)_0 \eta_i \eta_j \equiv \sum_{ij} \frac{1}{2} V_{ij} \eta_i \eta_j$$

Kinetiska energin ges av (antag att vi har tidsoberoende tvång):

$$T = \sum_{ij} \frac{1}{2} m_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j = \sum_{ij} \frac{1}{2} m_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j$$

Koefficienterna $m_{ij} = m_{ij}(\underset{\sim}{q})$. Taylorutveckla och behåll lägsta ordningen i η: $m_{ij}(\underset{\sim}{q}) = \underbrace{m_{ij}(\underset{\sim}{q}_0)}_{=T_{ij}} + \ldots \simeq T_{ij}$

$$\Rightarrow \quad T = \frac{1}{2}\sum_{ij} T_{ij}\dot{\eta}_i \dot{\eta}_j$$

$$\Rightarrow \quad L = T - V = \frac{1}{2}\sum_{ij}\left(T_{ij}\dot{\eta}_i\dot{\eta}_j - V_{ij}\eta_i\eta_j\right)$$

L.E. ger oss rörelseekvationerna

$$\sum_j T_{ij}\ddot{\eta}_j + \sum_j V_{ij}\eta_j = 0 \qquad (*)$$

dvs ett system av andra ordningens differentialekvationer med konstanta koefficienter.

I de flesta fall kan vi formulera systemet så att T_{ij} är diagonal (dvs diagonalisera systemet). Vi får då

$$T_i\ddot{\eta}_i + \sum_j V_{ij}\eta_j = 0 \qquad (**)$$

vilken är lättare att integrera.

Ansätt en lösning på formen

$$\eta_i = C a_i e^{-i\omega t}$$

Sätt in i $(*)$ och vi får

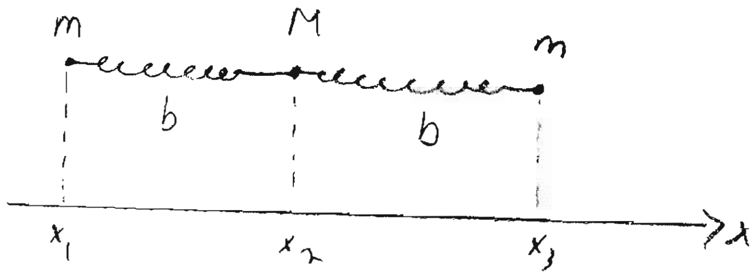
$$\sum_j \left(V_{ij}a_j - \omega^2 T_{ij}a_j\right) = 0 \qquad (***)$$

Homogent ekv. system för a_j. Har icke-triviala lösning endast om determinanten för koefficientmatrisen försvinner

$$\det\left(V_{ij} - \omega^2 T_{ij}\right) = 0 \qquad (****)$$

Lös denna s.k. karakteristiska ekvation så erhåller vi egenfrekvenserna ω. För var och en av dessa, lös ekv. (***) för amplituderna a_i. Vår totala lösning är sedan en linjär kombination av alla dessa lösningar.

Exempel: Fria vibrationer hos en linjär triatomisk molekyl.



Tre massor: m, m och M

Två fjädrar: fjäderkonstant k, naturliga längden b

Potentialen ges då av

$$V = \frac{1}{2}k(x_2 - x_1 - b)^2 + \frac{1}{2}k(x_3 - x_2 - b)^2$$

Jämvikt gäller då fjädrarna har sina naturliga längder b, dvs då

$$x_{02} - x_{01} = b = x_{03} - x_{02}$$

Inför nya koordinater η som anger avvikelsen från jämviktsläget,

$$\eta_i = x_i - x_{0i}$$

Potentialen blir då

$$V = \frac{1}{2}k(\eta_2 - \eta_1)^2 + \frac{1}{2}k(\eta_3 - \eta_2)^2 =$$

$$= \frac{1}{2}k(\eta_1^2 + 2\eta_2^2 + \eta_3^2 - 2\eta_1\eta_2 - 2\eta_2\eta_3)$$

Kinetiska energin ges av

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2$$

Lagrangianen blir nu

$$L = T - V = \frac{1}{2}m(\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2 - \frac{1}{2}k(\eta_1^2 + 2\eta_2^2 + \eta_3^2 - 2\eta_1\eta_2 - 2\eta_2\eta_3)$$

L.E. ger då rörelseekvationerna

$$\begin{cases} m\ddot{\eta}_1 + k(\eta_1 - \eta_2) = 0 \\ M\ddot{\eta}_2 + k(2\eta_2 - \eta_1 - \eta_3) = 0 \\ m\ddot{\eta}_3 + k(\eta_3 - \eta_2) = 0 \end{cases} \qquad (1)$$

Ansatz

$$\eta_i = a_i e^{i\omega t} \qquad (2)$$

Insatt i (1) ger detta

$$\begin{cases} -m\omega^2 a_1 + ka_1 - ka_2 = 0 \\ -M\omega^2 a_2 + 2ka_2 - ka_1 - ka_3 = 0 \\ -m\omega^2 a_3 + ka_3 - ka_2 = 0 \end{cases} \qquad (3)$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} k - m\omega^2 & -k & 0 \\ -k & 2k - M\omega^2 & -k \\ 0 & -k & k - m\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 0 \qquad (4)$$

Ekv. (4) har en icke-trivial lösning endast om determinanten för koefficientmatrisen är noll, dvs om

$$\begin{vmatrix} k-\omega^2 m & -k & 0 \\ -k & 2k-\omega^2 M & -k \\ 0 & -k & k-\omega^2 m \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \quad (k-\omega^2 m)^2(2k-\omega^2 M) - k^2(k-\omega^2 m) - k^2(k-\omega^2 m) = 0$$

$$\Rightarrow \quad (k-\omega^2 m)\left[(k-\omega^2 m)(2k-\omega^2 M) - 2k^2\right] = 0$$

$$\Rightarrow \quad (k-\omega^2 m)\left[\cancel{2k^2} - k\omega^2 M - 2k\omega^2 m + \omega^4 mM - 2k^2\right] = 0$$

$$\Rightarrow \quad \omega^2(k-\omega^2 m)\left(\omega^2 mM - k(2m+M)\right) = 0 \qquad (5)$$

Denna kubiska ekvation i ω^2 har uppenbarligen lösningarna

$$\begin{cases} \omega_1 = \overset{+}{(-)}\, 0 & (6a) \\ \omega_2 = \overset{+}{(-)} \sqrt{\dfrac{k}{m}} & (6b) \\ \omega_3 = \overset{+}{(-)} \sqrt{\dfrac{k}{m}\left(1+\dfrac{2m}{M}\right)} & (6c) \end{cases}$$

(6a) ger rätlinjig rörelse hos hela systemet (dvs konstant hastighet åt höger eller vänster). De andra två ekv. ger oscillationer.

För att hitta lösningarna sätter vi in våra ω_i i ekv. (3),

$$\begin{cases} (k - m\omega_i^2)a_{1i} - k a_{2i} = 0 & (7a) \\ -k a_{1i} + (2k - M\omega_i^2)a_{2i} - k a_{3i} = 0 & (7b) \\ -k a_{2i} + (k - m\omega_i^2)a_{3i} = 0 & (7c) \end{cases}$$

och löser dessa för vart och ett av de tre fallen för ω_i

i/ $\omega_1 = 0$

Ekv. (7) blir

$$\begin{cases} k(a_{11} - a_{21}) = 0 \\ k(a_{11} + 2a_{21} - a_{31}) = 0 \\ k(-a_{21} + a_{31}) = 0 \end{cases}$$

Dessa ekv har den uppenbara lösningen $a_{11} = a_{21} = a_{31} = C_1$ där C_1 är en konstant. Vi återkommer till denna strax, s. 54.

ii/ $\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}$

Ekv. (7) blir nu

$$\begin{cases} -k a_{22} = 0 \\ -k a_{12} + (2k - M\frac{k}{m})a_{22} - k a_{32} = 0 \\ -k a_{22} = 0 \end{cases}$$

Den första och tredje ekv. ger att $a_{22} = 0$, den andra ger då att $a_{12} = -a_{32} = C_2$

Lösningen är alltså

$$\begin{cases} \eta_{12} = C_2 e^{i\sqrt{\frac{k}{m}}t} \\ \eta_{22} = 0 \\ \eta_{23} = -C_2 e^{i\sqrt{\frac{k}{m}}t} = -\eta_{12} \end{cases}$$

dvs mellanatomen är i vila och de två andra atomerna svänger i motfas med vinkelfrekvensen $\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

$\omega_2 = -\sqrt{\frac{k}{m}}$ ger samma lösning, men med en egen konstant C_2'

$$\begin{cases} \eta_{12}' = C_2' e^{-i\sqrt{\frac{k}{m}}t} \\ \eta_{22}' = 0 \\ \eta_{23}' = -C_2' e^{-i\sqrt{\frac{k}{m}}t} \end{cases}$$

iii/ $\omega_3 = \sqrt{\frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)}$

Ekv. (7) blir nu

$$\begin{cases} \left(k - m\frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)\right)a_{13} - k a_{23} = 0 \\ -k a_{13} + \left(2k - M\frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)\right)a_{23} - k a_{33} = 0 \\ -k a_{23} + \left(k - m\frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)\right)a_{33} = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -\frac{2m}{M}k\, a_{13} - k a_{23} = 0 & (8a) \\ -k a_{13} - \frac{M}{m}k a_{23} - k a_{33} = 0 & (8b) \\ -k a_{23} - \frac{2m}{M}k a_{33} = 0 & (8c) \end{cases}$$

(8a) ger att

$$a_{23} = -\frac{2m}{M}a_{13} \qquad (9)$$

(8c) ger att

$$a_{33} = -\frac{M}{2m}a_{23} \overset{(9)}{=} \frac{M}{2m}\frac{2m}{M}a_{13} = a_{13} \qquad (10)$$

Välj $a_{13} = C_3$. Lösningen ~~blir nu~~

$$\begin{cases} \eta_{13} = C_3 e^{i\omega_3 t} \\ \eta_{23} = -\frac{2m}{M}C_3 e^{i\omega_3 t} \\ \eta_{33} = C_3 e^{i\omega_3 t} \end{cases}$$

Molekyl 1 & 3 svänger således i fas och molekyl 2 svänger i motfas med lite annan amplitud.

$\omega_3 = -\sqrt{\frac{k}{m}\left(1+\frac{2m}{M}\right)}$ ger samma lösning för a_{13}, a_{23}, a_{33}, men med en egen konstant C_3', dvs den totala lösningen för ω_3 blir

$$\begin{cases} \eta_{13} = C_3 e^{i\omega_3 t} + C_3' e^{-i\omega_3 t} \\ \eta_{23} = -\frac{2m}{M} C_3 e^{i\omega_3 t} - \frac{2m}{M} C_3' e^{-i\omega_3 t} \\ \eta_{33} = C_3 e^{i\omega_3 t} + C_3' e^{-i\omega_3 t} \end{cases}$$

i/ Låt oss nu betrakta $\omega_1 = 0$ vidare. Man skulle kunna tro att $\eta_i = C_1$ är vår lösning. Den är dock ofullständig då den inte kan uppfylla alla våra begynnelsevillkor $\eta_i(0) = \eta_i^0$, $\dot{\eta}_i(0) = v_i^0$

Vi kan istället göra ansatsen

$$\eta_i = a_i + b_i t$$

vilket insatt i rörelseekvationerna (1) ger oss

$$\begin{cases} k(a_1 + b_1 t - a_2 - b_2 t) = 0 \\ k(2a_2 + 2b_2 t - a_1 - b_1 t - a_3 - b_3 t) = 0 \\ k(a_3 + b_3 t - a_2 - b_2 t) = 0 \end{cases}$$

Om dessa ska gälla för godtyckliga t måste (p.s.s. som tidigare)

$$\begin{cases} a_1 = a_2 = a_3 = C_1 \\ b_1 = b_2 = b_3 = C_1' \end{cases}$$

Lösningen är således

$$\begin{cases} \eta_{11} = C_1 + C_1' t \\ \eta_{21} = C_1 + C_1' t \\ \eta_{31} = C_1 + C_1' t \end{cases}$$

dvs rätlinjig rörelse med konst hastighet.