Eigenschwingungen

$V = \{v_{ij}\}$ $\quad i,j = 1 \dots N$

$\vec{a} = (a_1, \dots, a_N)$

$\lambda = \omega^2$

Eigenwertproblem: $\boxed{V \vec{a} = \lambda \vec{a}}$

Eigenwerte λ_k: $\quad \det(V - \lambda \mathbb{1}) \vec{a} \stackrel{!}{=} 0 \qquad (1)$

charakteristische Gl., Polynom N-ter Ord.

Eigenvektoren $\vec{a}_k$: Lösung von (1) mit $\lambda = \lambda_k$

orthogonal (bzw. orthonormal)

$$\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\rightarrow$ Eigenvektormatrix $\quad A = (\vec{a}_1, \dots \vec{a}_N)$ ist orthogonal

$$A^T = A^{-1} \quad \rightarrow \quad A A^T = \mathbb{1} = A^T A$$

A diagonalisiert die Hessematrix V

$$\boxed{A^T V A = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N) = \Lambda}$$

$\rightarrow$ Lösungen: $\quad q_i(t) = a_{ik} e^{i\omega_k t} \qquad (k = 1, \dots, N)$

Allg. Lsg: $\quad q_i(t) = \sum_k C_k a_{ik} e^{i\omega_k t}$

mit Koeff. C_k aus Anfangsbedingungen

$$\boxed{\begin{aligned} q_i(t) &= \sum_k a_{ik} Q_k(t) \\ Q_k(t) &= C_k e^{i\omega_k t} \end{aligned}} \quad \Leftrightarrow \quad \vec{q} = A \vec{Q}$$

"Eigenschwingungen"

$$\boxed{Q_k(t) = C_k e^{i\omega_k t}}$$ "Eigenschwingungen" (oder Normalmoden)

Pot. Energie:

$$U = \frac{1}{2}\sum_{i,j} V_{ij}\, q_i q_j = \frac{1}{2}\vec{q}^T V \vec{q}$$

$$= \frac{1}{2}\vec{Q}^T \underbrace{A^T V A}_{\Lambda} \vec{Q} = \frac{1}{2}\vec{Q}^T \Lambda \vec{Q}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N} \omega_k^2 Q_k^2$$ pot. Energie in $\vec{Q}_k$ ist diagonal!

$$T = \frac{1}{2}\sum_i \dot{q}_i^2 = \frac{1}{2}\dot{\vec{q}}^T \dot{\vec{q}} =$$

$$= \frac{1}{2}\dot{\vec{Q}}^T \underbrace{A^T A}_{=1} \dot{\vec{Q}} = \frac{1}{2}\dot{\vec{Q}}^T \dot{\vec{Q}}$$

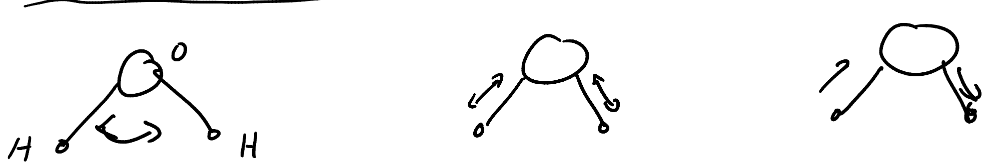
$$= \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N} \dot{Q}_k^2$$ kin. Energie ist diagonal

Mit $P_k = \dot{Q}_k$ ist damit der Hamiltonian

$$\boxed{H(Q,P) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}\left(P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2\right)}$$

der in ein System unabhängiger Oszillatoren separiert.

Bsp: Normalmoden von Wasser



Biegeschwingung

symmetrische asymmetrische

Streckschwingung

Anwendung: Wasser absorbiert (infrarot) Licht mit den Eigenfrequenzen: Wer sind exp. observable Größen

→ Schwingungsspektroskopie

8. Das Zweikörperproblem

- beschreibt z.B. das Keplerproblem (Erde, Sonne) das H-Atom, das 2-atomige Molekül
- analytisch lösbar
- Anwendung von Symmetrieüberlegungen

2 Körper mit Massen m_i, Orten $\vec{r}_i$, Impulsen $\vec{p}_i$ $(i=1,2)$
wechselwirken durch ein Zentralpotential $U(|\vec{r}_2-\vec{r}_1|)$.
abgeschlossenes, konservatives System mit Energie

$$H = T + U = \sum_{i=1}^{2} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} + U(|\vec{r}_2-\vec{r}_1|) \qquad (1)$$

Vorgehen:

- Seperation der Schwerpunktsbewegung (Impulserhaltung → Reduktion auf Einkörperproblem (3 statt 6 Freiheitsgrade)
- Drehimpulserhaltung → 1D Problem
- Diskussion des Keplerproblems, $U \sim 1/r$

(1) Trafo in Schwerpunkts- und Relativbewegung

Schwerpunktskoord.: $$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2} \qquad (2)$$

Relativkoord: $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

$$T = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2} = \frac{m_1}{2}\dot{\vec{r}}_1^{\,2} + \frac{m_2}{2}\dot{\vec{r}}_2^{\,2}$$

$$\xrightarrow{(2)} \underbrace{\frac{m_1+m_2}{2}}_{M/2}\dot{\vec{R}}^2 + \underbrace{\frac{m_1 m_2}{2(m_1+m_2)}}_{\mu/2}\dot{\vec{r}}^2 = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} \qquad (3)$$

Gesamtmasse: $M = m_1 + m_2$

reduzierte Masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \longrightarrow$ m_1 für $m_1/m_2 \ll 1$ (Sonne Erde)

$\frac{m}{2}$ für $m_1 = m_2 = m$ 2-atom Mol.

Da Gesamtimpuls erhalten ist

$$\vec{P} = M\dot{\vec{R}} = \vec{P}_0 = \text{const.},$$

ist Schwerpunktsbew., die unabhängig von Relativbewegung ist

$$\vec{R}(t) = \vec{R}(0) + \frac{\vec{P}(0)}{M}t \qquad (4)$$

$\rightarrow$ Separation von SP- und Relativbewegung oder Entkopplung $\rightarrow$ Einkörperproblem mit 3 (statt 6) Freiheitsgrade

Betrachte Relativbewegung

$$\mu\ddot{\vec{r}} = -\nabla U(|\vec{r}|) \qquad (5)$$

② Drehimpulserhaltung

des Zentralproblem, d.h.

$$\vec{L} = \mu \vec{r} \times \dot{\vec{r}} = \text{const.} \quad (\text{also auch Richtung konstant})$$

oEdA sei $\vec{L} = l\,\vec{e}_z$ (6)

Mit $\vec{L} \perp \vec{r}$, ist $\vec{r} \perp \vec{e}_z$ und damit

$$z(t) = \text{Const} \overset{\text{oEdA}}{=} 0$$

d.h. Bewegung findet in x-y Ebene statt. (nur noch 2 FG)

<u>Polarkoordinaten:</u>

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\cos\varphi \\ r\sin\varphi \end{pmatrix}, \quad \dot{\vec{r}} = \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{r}\cos\varphi - r\dot{\varphi}\sin\varphi \\ \dot{r}\sin\varphi + r\dot{\varphi}\cos\varphi \end{pmatrix}$$

$$T = \frac{\mu}{2}\dot{\vec{r}}^2 = \frac{\mu}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\right)$$

mit $l = \mu(x\dot{y} - y\dot{x}) = \mu r\cos\varphi\,(\dot{r}\sin\varphi + r\dot{\varphi}\cos\varphi)$
$\qquad - \mu r \sin\varphi\,(\dot{r}\cos\varphi - r\dot{\varphi}\sin\varphi)$

$$l = \mu r^2\dot{\varphi} = \text{const}$$

ergibt sich für die Gesamtenergie

$$\boxed{\begin{aligned} E &= \frac{\mu}{2}\dot{r}^2 + \frac{l^2}{2\mu r^2} + U(r) = \text{const.} \\ &= \frac{\mu}{2}\dot{r}^2 + U_{\text{eff}}(r) \end{aligned}} \qquad (7)$$

effektives Potential $U_{eff}(r) = U(r) + \frac{l^2}{2\mu r^2}$

hat neben dem 'normalen' Radialterm $U(r)$

noch den sog. Zentrifugalterm $\frac{l^2}{2\mu r^2}$

oder Zentrifugalbarriere

→ 1D System, Bewegungsgleichung (7) für $\dot{r}$ ist lösbar

Lösung:

Mit $\frac{dr}{dt} = \pm\sqrt{\frac{2}{\mu}\left(E - U_{eff}(r)\right)}$

ist $\int_{t_0}^{t} dt' = t - t_0 = \pm \int_{r_0}^{r} \frac{dr'}{\sqrt{\frac{2}{\mu}\left(E - U_{eff}(r')\right)}}$

was $r = r(t, E, l, r_0)$ ergibt

Bahnkurve $r(\varphi)$ erhalten wir

$\dot{r}(\varphi) = \frac{d r(\varphi)}{dt} = \frac{dr}{d\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = \frac{dr}{d\varphi}\dot{\varphi}$

$\frac{dr}{d\varphi} = \frac{\dot{r}}{\dot{\varphi}} = \frac{\pm\sqrt{2/\mu\left(E - U_{eff}(r)\right)}}{l/\mu r^2}$

→ $\varphi - \varphi_0 = \pm\frac{l}{\sqrt{2\mu}} \int_{r_0}^{r} \frac{dr'}{r'^2\sqrt{E - U_{eff}(r')}}$

r_0, φ_0, E, l sind Anfangsbedingungen