Ecuaciones de Hamilton para N osciladores acoplados perturbados

30 de abril de 2017

Consideremos un sistema de osciladores acoplados linealmente y a través del potencial Lennard-Jones. Tomemos tres partículas N=3, por lo que A será una matriz de 6×6 .

Si, con el parámetro de la red a_0 definimos $r_{ij} = |a_0 - x_i + x_j|$, el sistema de ecuaciones (no lineal) quedaría entonces:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ vx \\ vy \\ vz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -k_x/m_x & k_x/m_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_x/m_y & -\left(k_y+k_x\right)/m_y & k_y/m_y & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_y/m_z & -k_y/m_z & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ vx \\ vy \\ vz \end{pmatrix} - \sum_i \frac{1}{m_i} \frac{d}{dr_i} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{a_{xy}}{r_{xy}^{12}} - \frac{b_{xy}}{r_{xy}^{6}} + \frac{a_{xz}}{r_{xz}^{12}} - \frac{b_{xz}}{r_{yz}^{6}} \\ \frac{a_{yx}}{r_{xy}^{12}} - \frac{b_{yx}}{r_{xy}^{6}} + \frac{a_{yz}}{r_{yz}^{12}} - \frac{b_{yz}}{r_{yz}^{6}} \end{pmatrix} .$$
 (1)