

Andrzej Raczyński

Mechanika klasyczna cz.6

1 Mechanika Lagrange'a 3

1.1 Wahadło cykloidalne

Wahadło cykloidalne jest to punkt materialny poruszający się w polu grawitacyjnym po łuku cykloidy

$$\begin{aligned}x &= a(u - \sin u), \\y &= a(1 - \cos u),\end{aligned}\tag{1}$$

gdzie u jest parametrem i naszą współrzędną uogólnioną. Oś x jest pozioma, a oś y jest skierowana w dół. Cykloida jest krzywą, po jakiej porusza się punkt materialny leżący na okręgu toczącym się bez poślizgu. Mamy

$$\begin{aligned}\dot{x} &= a(\dot{u} - \cos u \dot{u}), \\ \dot{y} &= a \sin u \dot{u}.\end{aligned}\tag{2}$$

Energia kinetyczna wynosi

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{1}{2}ma^2\dot{u}^2(1 + \cos^2 u - 2 \cos u + \sin^2 u) = 2ma^2\dot{u}^2 \sin^2 \frac{u}{2}.\tag{3}$$

Energia potencjalna $V = -mgy = -mga(1 - \cos u)$. Lagranżjan ma postać

$$L = T - V = 2ma^2\dot{u}^2 \sin^2 \frac{u}{2} + mga(1 - \cos u)\tag{4}$$

Pochodne potrzebne to

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial \dot{u}} &= 4ma^2 \sin^2 \frac{u}{2} \dot{u}, \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{u}} &= 4ma^2 \sin^2 \frac{u}{2} \ddot{u} + 4ma^2 2 \sin \frac{u}{2} \cos \frac{u}{2} \frac{1}{2} \dot{u}^2,\end{aligned}\tag{5}$$

$$\frac{\partial L}{\partial u} = 2ma^2 2 \sin \frac{u}{2} \cos \frac{u}{2} \frac{1}{2} \dot{u}^2 + mga \sin u.\tag{6}$$

Równanie Lagrange'a ma postać

$$4ma^2 \sin^2 \frac{u}{2} \ddot{u} + 4ma^2 2 \sin \frac{u}{2} \cos \frac{u}{2} \frac{1}{2} \dot{u}^2 - 2ma^2 2 \sin \frac{u}{2} \cos \frac{u}{2} \frac{1}{2} \dot{u}^2 - mga \sin u = 0, \quad (7)$$

a po uporządkowaniu

$$\sin \frac{u}{2} \ddot{u} + \frac{1}{2} \cos \frac{u}{2} \dot{u}^2 - 2\omega^2 \cos \frac{u}{2} = 0, \quad (8)$$

gdzie $\omega^2 = \frac{g}{4a}$. Pierwsze dwa wyrazy dają się wyrazić przez $-\frac{d^2}{dt^2} \cos \frac{u}{2}$. Sprawdźmy

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dt} \cos \frac{u}{2} &= \sin \frac{u}{2} \frac{1}{2} \dot{u}, \\ -\frac{d^2}{dt^2} \cos \frac{u}{2} &= \frac{1}{2} \sin \frac{u}{2} \ddot{u} + \frac{1}{2} \cos \frac{u}{2} \frac{1}{2} \dot{u}^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Równanie Lagrange'a przyjmuje więc postać

$$\frac{d^2}{dt^2} \cos \frac{u}{2} + \omega^2 \cos \frac{u}{2} = 0. \quad (10)$$

Rozwiązaniem jest $\cos \frac{u}{2} = C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t$.

Niech w chwili $t = 0$ wahadło znajduje się w położeniu równowagi: $x = a\pi$, $y = 2a$, czyli $u = \pi$. Wtedy $\cos \frac{u}{2} = 0$ i $C_1 = 0$. Niech prędkość początkowa (niezerowa tylko składowa x) ma wartość v_0 . Mamy więc $\dot{x}(0) = 2a\dot{u}(0) = v_0$, czyli $-\sin \frac{u}{2} \frac{1}{2} \dot{u}|_{t=0, u=\pi} = C_2 \omega$. Ostatecznie $C_2 = -\frac{v_0}{4a\omega}$.

Okres drgań nie zależy tu od amplitudy, podczas gdy dla wahadła płaskiego tak było jedynie w przybliżeniu małych drgań.

2 Teoria małych drgań

Rozważmy układ z więzami niezależnymi od czasu, opisany przez f współrzędnych uogólnionych, wprowadzonych w sposób niezależny od czasu. Energia kinetyczna jest formą kwadratową prędkości uogólnionych

$$T = \sum_{j=1}^{3N} \frac{1}{2} m_j \dot{x}_j^2 = \frac{1}{2} \sum_j m_j \sum_l \frac{\partial x_j}{\partial q_l} \dot{q}_l \sum_s \frac{\partial x_j}{\partial q_s} \dot{q}_s \equiv \frac{1}{2} \sum_{l,s=1}^f A_{ls}(q) \dot{q}_l \dot{q}_s, \quad (11)$$

gdzie definicja macierzy symetrycznej A wynika z powyższego zapisu.

Załóżmy, że istnieje położenie równowagi trwałe (minimum energii potencjalnej) i jego współrzędne są $q = 0 = (0, 0, \dots, 0)$ (zawsze można je tak przesunąć). W przybliżeniu małych drgań, w którym w lagranżjanie ograniczamy się do członów drugiego stopnia względem współrzędnych i prędkości, można pominąć zależność A od q i przyjąć $A(q) \approx A(0)$ (pominięte wyrazy są stopnia trzeciego i wyższych). Ponieważ energia kinetyczna jest dodatnia, macierz A jest dodatnio określona, co oznacza że forma kwadratowa $\sum_{l,s=1}^f A_{ls}(0)\dot{q}_l\dot{q}_s$ jest dodatnia dla dowolnych prędkości uogólnionych, lub inaczej, że wartości własne macierzy A są dodatnie.

Energię potencjalną można rozwinąć w szereg Taylora

$$V(q) = V(0) + \sum_l \frac{\partial V(0)}{\partial q_l} q_l + \frac{1}{2} \sum_{l,s} \frac{\partial^2 V(0)}{\partial q_l \partial q_s} q_l q_s + \dots \quad (12)$$

Ponieważ energię potencjalną rozwinięto w otoczeniu minimum właściwego,, pierwsze pochodne V są równe zero. $V(0)$ można też przyjąć równe zero. Zgodnie z przybliżeniem małych drgań rozwinięcie obcina się na drugim wyrazie. Wprowadźmy oznaczenie $B_{ls} = \frac{\partial^2 V(0)}{\partial q_l \partial q_s}$; macierz B też jest dodatnio określona, bo punkt $Q = 0$ jest minimum właściwym. Jest też symetryczna.

Lagranżjan ma więc postać

$$L = \frac{1}{2} \sum_{l,s=1}^f A_{ls}(0)\dot{q}_l\dot{q}_s - \frac{1}{2} \sum_{l,s} B_{ls}q_lq_s. \quad (13)$$

Równania Lagrange'a mają postać

$$\sum_s A_{ls}\ddot{q}_s + \sum_s B_{ls}q_s = 0, \quad l = 1, 2, \dots, f. \quad (14)$$

Dla jednego stopnia swobody $f = 1$ jest to równanie oscylatora harmonicznego. Istotą metody jest przedstawienie współrzędnych q_l jako superpozycji drgań pewnych oscylatorów harmonicznnych, zwanych drganiami normalnymi.

Jeśli potraktujemy (q_1, q_2, \dots, q_f) jako kolumnę, można równania Lagrange'a napisać w formie macierzowej

$$A\ddot{q} + Bq = 0. \quad (15)$$

Wyraźmy teraz q jako superpozycję nowych zmiennych Q , tzn. $q_l = \sum_s U_{ls} Q_s$, lub krótko $q = UQ$ z nieokreślonymi na razie elementami macierzy U . Otrzymamy

$$AU\ddot{Q} = BUQ. \quad (16)$$

pomnożmy teraz obie strony przez macierz transponowaną U^T , żądając, aby $U^T AU = I$ (macierz jednostkowa), i $U^T BU = D$ (macierz diagonalna). Wtedy równania Lagrange'a przybierają postać

$$\ddot{Q}_l + D_{ll} Q_l = 0, \quad (17)$$

którego rozwiązaniem jest

$$Q_l = A_l \cos \omega_l t + B_l \sin \omega_l t, \quad (18)$$

gdzie $\omega_l = \sqrt{D_{ll}}$.

Nie jest oczywiste, że taka transformacja U istnieje i że element macierzy diagonalnej D są dodatnie.

Ponieważ A jest macierzą symetryczną, istnieje macierz ortogonalna U_1 , taka że $U_1^T A U_1 = A'$ jest macierzą diagonalną. Ponieważ A jest dodatnio określona, jej wartości własne, a więc elementy diagonalne macierzy A' , są dodatnie. Można zbudować macierz U_2 , która jest diagonalna i której elementy diagonalne są równe $\frac{1}{\sqrt{A'_{jj}}}$. Wtedy $U_2^T A' U_2$ jest macierzą jednostkową I .

Macierz B poddana tym transformacjom przejdzie w $B'' = U_2^T U_1^T B U_1 U_2$. Macierz B'' jest symetryczna, bo $B''^T = U_2^T U_1^T B''^T U_1^T U_2^T = B''$. Macierz B'' jest też dodatnio określona, bo

$$\begin{aligned} \sum_{l,s} B''_{ls} q_l q_s &= \sum_{l,s} [(U_1 U_2)^T B (U_1 U_2)]_{ls} q_l q_s = \sum_{l,s,j,k} (U_1 U_2^T)_{lj} B_{jk} (U_1 U_2)_{ks} q_l q_s = \\ &= \sum_{j,k} B_{jk} \tilde{q}_j \tilde{q}_k, \end{aligned} \quad (19)$$

gdzie $\tilde{q}_k = \sum_s (U_1 U_2)_{ks} q_s$. Suma w powyższym wzorze jest dodatnia: macierz B'' jest dodatnio określona, bo macierz B jest dodatnio określona. Istnieje macierz ortogonalna U_3 , taka że $U_3^T B'' U_3 = D$, gdzie D jest macierzą diagonalną o dodatnich wartościach własnych. Oczywiście $U_3^T I U_3 = I$. Tak więc macierz $U = U_1 U_2 U_3$ ma żądane własności: $U^T A U = I$, $U^T B U = D$ i elementy D_{ll} macierzy diagonalnej D są dodatnie.

Nie ma konieczności obliczania osobno macierzy U_j . Można napisać $U^T B U = D = I D = U^T A U D$, czyli po pomnożeniu przez $(U^T)^{-1}$ otrzymujemy

$$\sum_s B_{ls} U_{sk} = \sum_s A_{ls} U_{sk} D_{kk}, \quad l = 1, 2, \dots, f \quad (20)$$

albo

$$\sum_{s=1}^f [B_{ls} - D_{kk} A_{ls}] U_{sk} = 0, \quad l = 1, 2, \dots, f. \quad (21)$$

Ostatnia relacja jest układem równań liniowych, jednorodnych na współczynniki U_{sk} . Warunkiem istnienia niezerowych rozwiązań jest zerowanie się wyznacznika układu, co stanowi równanie stopnia f na wartości własne D_{kk} .

Teoria małych drgań ma zastosowanie przy opisie oscylacji cząsteczek wieloatomowych lub sieci krystalicznych.

2.1 Przykład: cząsteczka CO₂

Cząsteczka dwutlenku węgla jest liniowa, z atomem węgla, o masie m_2 i położeniu x_2 , w środku i atomami tlenu, o masie m_1 i położeniach x_1 i x_3 , $x_1 < x_3$. W układzie środka masy $m_1 x_1 + m_2 x_2 + m_3 x_3 = 0$.

Energia potencjalna związana jest ze zmianą długości wiązań i w przybliżeniu harmonicznym jest dana wzorem

$$V = \frac{k}{2}(x_2 - x_1 - a)^2 + \frac{k}{2}(x_3 - x_2 - a)^2, \quad (22)$$

gdzie k jest stałą sprężystości, a a jest położeniem równowagi. Jeśli wyrazimy x_2 przez x_1 oraz x_3 jako

$$x_2 = -\frac{m_1(x_1 + x_3)}{m_2}, \quad (23)$$

oraz wprowadzimy $y_1 = x_1 + a$, $y_3 = x_3 - a$, energia potencjalna wyraża się wzorem

$$V = \frac{k}{2m_2^2} \{[(m_1 + m_2)^2 + m_1^2](y_1^2 + y_3^2) + 4m_1(m_1 + m_2)y_1 y_3\}, \quad (24)$$

co daje macierz B w postaci

$$B = \begin{pmatrix} \gamma & \delta \\ \delta & \gamma \end{pmatrix}, \quad (25)$$

gdzie $\gamma = \frac{k}{m_2^2}[(m_1 + m_2)^2 + m_1^2]$, $\delta = k\frac{2m_1}{m_2^2}(m_1 + m_2)$.

Energia kinetyczna wynosi

$$T = \frac{1}{2}m_1(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{1}{2}m_2\dot{x}_2^2 = \frac{1}{2}(m_1 + \frac{m_1^2}{m_2})(\dot{y}_1^2 + \dot{y}_3^2) + \frac{m_1^2}{m_2}\dot{y}_1\dot{y}_3, \quad (26)$$

co daje macierz A w postaci

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}, \quad (27)$$

gdzie $\alpha = m_1 + \frac{m_1^2}{m_2}$, $\beta = \frac{m_1^2}{m_2}$. Równanie macierzowe $(B - \lambda A)U = 0$ będzie miało rozwiązania niezerowe, gdy

$$\det \begin{pmatrix} \gamma - \alpha\lambda & \delta - \beta\lambda \\ \delta - \beta\lambda & \gamma - \alpha\lambda \end{pmatrix} = 0, \quad (28)$$

co daje dwa rozwiązania $\lambda_1 = \frac{\gamma - \delta}{\alpha - \beta}$ i $\lambda_2 = \frac{\gamma + \delta}{\alpha + \beta}$. Po podstawieniu otrzymuje się $\lambda_1 = \frac{k}{m_1}$, $\lambda_2 = k\frac{2m_1 + m_2}{m_1 m_2}$. Grają one rolę elementów macierzy diagonalnej D_{11} i D_{22} z ogólnych wzorów. Częstości drgań normalnych wynoszą $\omega_{1,2} = \sqrt{\lambda_{1,2}}$, tzn. drgania normalne są

$$\begin{aligned} Q_1 &= C_1 \cos \omega_1 t + C_2 \sin \omega_1 t, \\ Q_2 &= C_3 \cos \omega_2 t + C_4 \sin \omega_2 t. \end{aligned} \quad (29)$$

Współczynniki U_{jk} otrzymamy z równania

$$(B_{11} - \lambda_k A_{11})U_{1k} + (B_{12} - \lambda_k A_{12})U_{2k} = 0. \quad (30)$$

Drugie z równań nie wniesie nic nowego, bo przez zerowanie wyznacznika równania zrobiły się linowo zależne. Po wstawieniu elementów macierzowych i wartości własnych otrzymuje się

$$U_{12} = U_{22}, \quad U_{21} = -U_{11}. \quad (31)$$

Można jeden z tych elementów macierzowych przyjąć równy 1 i wyliczyć drugi. Inny wybór odbiłby się na odpowiednich wartościach stałych C_j , które wyznacza się z warunków początkowych. Ostateczny wynik to

$$\begin{aligned} x_1 &= Q_1(t) + Q_2(t) - a, \\ x_3 &= -Q_1(t) + Q_2(t) + a. \end{aligned} \quad (32)$$

W szczególnych przypadkach zachodzi:

1. gdy $Q_2 = 0$, atom węgla spoczywa, a atomy tlenu drgają w przeciwfazie,
2. gdy $Q_1 = 0$, atomy tlenu i atom węgla drgają w fazie.