1 Úloha - riešenie

Napíšme pohybovú rovnicu pre j-tý atóm

$$j:\ m\frac{\mathrm{d}^2x_j}{\mathrm{d}t^2} = -K(x_j - x_{j-1}) - K(x_j - x_{j+1}) \tag{1}$$

Potenciálna energia systému je daná nasledovne

$$U(x_1, x_2, ..., x_N) = \frac{1}{2}K\sum_{j=1}^{N+1}(x_j - x_{j-1})^2. \tag{2}$$

Ďalej prepíšme pohybovu rovnico ako

$$m\frac{\mathrm{d}^2x_j}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{\partial U}{\partial x_j} = -K(x_j - x_{j-1}) - K(x_j - x_{j+1}) \tag{3}$$

1.1 Upevnené konce lineárneho retiazku

$$m\frac{\mathrm{d}^2x_j}{\mathrm{d}t^2} = -K(x_j - x_{j-1}) - K(x_j - x_{j+1}) = K(x_{j-1} - x_j + x_{j+1}) \quad \text{pre} \quad x_0 = x_{N+1} = 0$$

$$1 : m\frac{\mathrm{d}^2x_1}{\mathrm{d}t^2} = K(x_0 - x_1 + x_2) = K(-x_1 + x_2)$$

$$2 : m\frac{\mathrm{d}^2x_2}{\mathrm{d}t^2} = K(x_1 - x_2 + x_3)$$

$$\vdots$$

$$j - \text{tý} : m\frac{\mathrm{d}^2x_j}{\mathrm{d}t^2} = K(x_{j-1} - x_j + x_{j+1})$$

$$\vdots$$

$$N - 1 : m\frac{\mathrm{d}^2x_{N-1}}{\mathrm{d}t^2} = K(x_{N-2} - x_{N-1} + x_N)$$

$$N : m\frac{\mathrm{d}^2x_N}{\mathrm{d}t^2} = K(x_{N-1} - x_N + x_{N+1}) = K(x_{N-1} - x_N)$$

Nasledujúce rovnice vedú na systém obyčajných diferenciálnych rovníc, ktorý má nasledujúci maticový zápis

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ . \\ . \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2K & -K & 0 & . & . & . & 0 \\ -K & 2K & K & 0 & . & . & 0 \\ 0 & -K & 2K & -K & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & 0 & . & . & -K & 2K & -K \\ 0 & 0 & 0 & . & . & -K & 2K \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ . \\ . \\ x_N \end{pmatrix} \Rightarrow m\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{x}}{\mathrm{d}t^2} = -\hat{K}\mathbf{x}. \tag{4}$$

Požadujeme harmonické riešenia tejto sústavy v tvare

$$\mathbf{x}(t) = \boldsymbol{\varepsilon}\exp[-i\omega t]. \tag{5}$$

Dosadením vyššie predpokladaného riešenia dostaneme

$$
\begin{gathered}
m\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{x}}{\mathrm{d}t^2} = -m\omega^2\boldsymbol{\varepsilon}\exp[-i\omega t] \\
-m\omega^2\boldsymbol{\varepsilon}\exp[-i\omega t] = -\hat{K}\boldsymbol{\varepsilon}\exp[-i\omega t] \\
m\omega^2\boldsymbol{\varepsilon} = \hat{K}\boldsymbol{\varepsilon} \\
(\hat{K} - m\omega^2\hat{I})\boldsymbol{\varepsilon} = 0
\end{gathered}
$$

Vidíme, že problém skonvergoval k nájdeniu vlastných čísel a vlastných hodnôt matice $\hat{K}$. Riešenie je možné diskutovať vzhľadom k charakteru nájdených vlastných hodnôt. Obecné riešenie je dané ako [1]

$$
\mathbf{x}(t) = \sum_{\lambda=1}^{N}\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda \mathrm{Re}[C_\lambda \exp(-i\omega t)] = ... = \sum_{\lambda=1}^{N}\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda \mathrm{Re}[A_\lambda\cos(\omega_\lambda t) + B_\lambda\sin(\omega_\lambda t)] \tag{6}
$$

1.2 Voľné konce

Opäť zapíšeme potenciálnu energiu takéhoto retiazku ako

$$
U(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}K[(x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + ... + (x_{N-1} - x_N)^2] \tag{7}
$$

1.3 Upevnené konce lineárneho retiazku

$$
\begin{gathered}
1 : m\frac{\mathrm{d}^2 x_1}{\mathrm{d}t^2} = K(x_1 - x_2) \\
2 : m\frac{\mathrm{d}^2 x_2}{\mathrm{d}t^2} = +K(x_1 - x_2) - K(x_2 - x_3) \\
. \\
. \\
. \\
j - \text{tý} : m\frac{\mathrm{d}^2 x_j}{\mathrm{d}t^2} = K(x_{j-1} - x_j) - K(x_j - x_{j+1}) \\
. \\
. \\
. \\
N-1 : m\frac{\mathrm{d}^2 x_{N-1}}{\mathrm{d}t^2} = K(x_{N-2} - x_{N-1}) - KK(x_{N-1} - x_N) \\
N : m\frac{\mathrm{d}^2 x_N}{\mathrm{d}t^2} = K(x_{N-1} - x_N)
\end{gathered}
$$

Maticovo zapísané ako

$$
\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{x}}{\mathrm{d}t^2} = -\hat{K}\mathbf{x}, \tag{8}
$$

[1] Kroky medzi rovnosťami sú nechané na riešiteľovi aby si zopakoval prácu s goniometrickými funkciami

kde $\hat{K}$ je dané ako

$$\hat{K} = \begin{pmatrix} K & -K & 0 & . & . & . & 0 \\ -K & 2K & K & 0 & . & . & 0 \\ 0 & -K & 2K & -K & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & 0 & . & . & -K & 2K & -K \\ 0 & 0 & 0 & . & . & -K & K \end{pmatrix} \tag{9}$$

Opäť uvažujeme harmonické riešenie tohoto systému,

$$\mathbf{x}(t) = \sum_{\lambda=1}^{N} \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda \mathrm{Re}[C_\lambda \exp(-i\omega t)],$$

a teda riešenie sa redukuje na nájdenie vlastných čísel a vlastných vektorov takéhoto retiazku v tvare

$$(\hat{K} - m\omega^2 \hat{I})\boldsymbol{\varepsilon} = 0. \tag{10}$$

1.4 Periodické okrajové podmienky

Okrajovú podmienku zadávame v tvare $x_{N+1}(t) = x_1(t)$. Opäť aplikujeme výpočet pomocou potenciálnej energie

$$U(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\sum_{j=2}^{N+1}(x_{j-1} - x_j)^2.$$

$$\begin{aligned}
1: m\frac{\mathrm{d}^2x_1}{\mathrm{d}t^2} &= -K(x_1 - x_2) + K(x_N - x_1) \\
2: m\frac{\mathrm{d}^2x_2}{\mathrm{d}t^2} &= K(x_1 - x_2) - K(x_2 - x_3) \\
&. \\
&. \\
&. \\
N-1: m\frac{\mathrm{d}^2x_{N-1}}{\mathrm{d}t^2} &= K(x_{N-2} - x_{N-1}) - K(x_{N-1} - x_N) \\
N: m\frac{\mathrm{d}^2x_N}{\mathrm{d}t^2} &= K(x_{N-1} - x_N) - K(x_N - x_1)
\end{aligned}$$

Maticovo zapísané ako

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{x}}{\mathrm{d}t^2} = -\hat{K}\mathbf{x}, \tag{11}$$

kde $\hat{K}$ je dané ako

$$\hat{K} = \begin{pmatrix} 2K & -K & 0 & . & . & . & -K \\ -K & 2K & K & 0 & . & . & 0 \\ 0 & -K & 2K & -K & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & 0 & . & . & -K & 2K & -K \\ -K & 0 & 0 & . & . & -K & 2K \end{pmatrix} \tag{12}$$

Opäť uvažujeme harmonické riešenie tohoto systému,

$$\mathbf{x}(t) = \sum_{\lambda=1}^{N} \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda \mathrm{Re}[C_\lambda \exp(-i\omega t)],$$

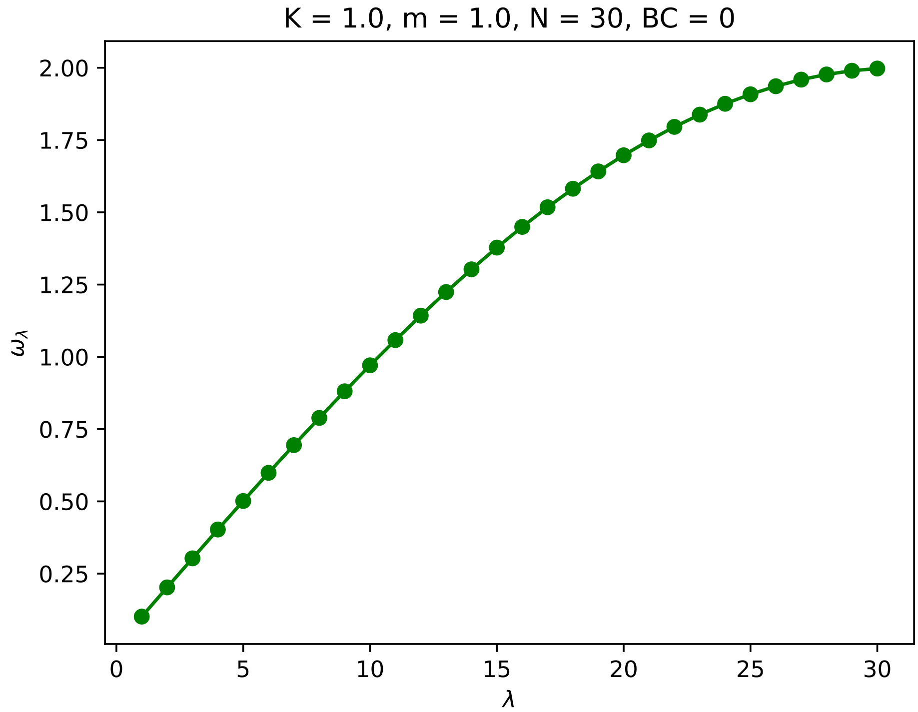
a teda riešenie sa redukuje na nájdenie vlastných čísel a vlastných vektorov takéhoto retiazku v tvare

$$(\hat{K} - m\omega^2\hat{I})\boldsymbol{\varepsilon} = 0. \tag{13}$$

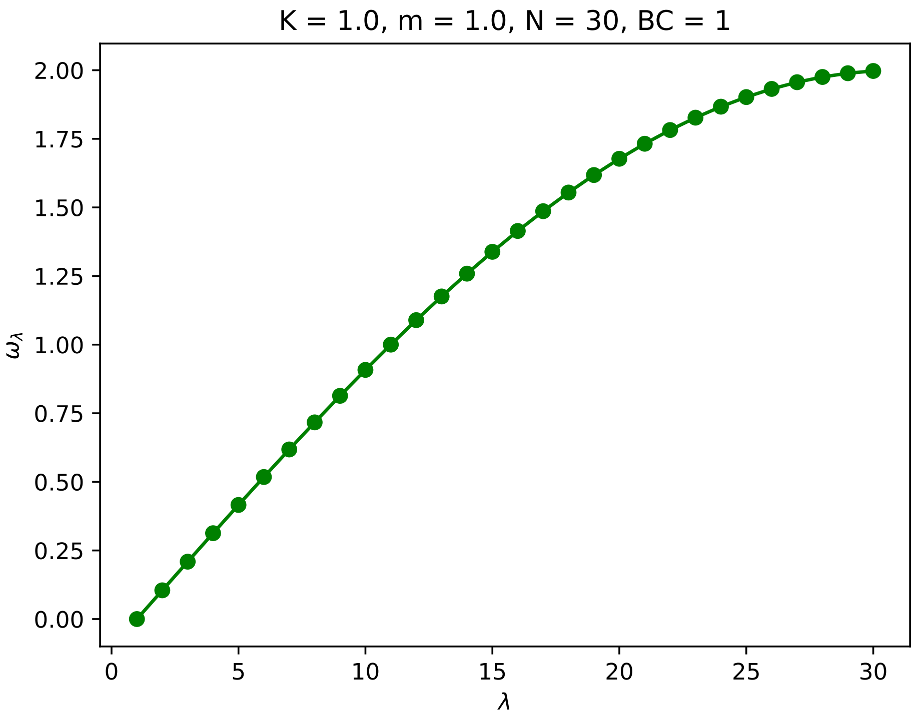
2 Záver

- Pre pevné konce retiazku dostaneme N vlastných hodnôt a N príslušných vlastných vektorov. Takúto situáciu nazývame normálové módy. Sústava je nedegenerovaná.
- Voľné konce. Riešením vlastného problému dostaneme opäť N vlastných hodnôt ale najnižšiafgrekvencia, ktorú dostaneme je $\omega_1 = 0$, táto frekvencia zodpovedá translačnému pohybu celého retiazka.
- Periodické okrajove podmienky. Obdobne riešením vlastného problému získame vlastné frekvencia kmitov a zodpovedajúce vlastné vektory. Najnižšia frekvencia je opäť $\omega_1 = 0$ a opäť zodpovedá translačnému pohybu retiazku. Narozdiel od vyššie uvedených prípadov dostávame dvojnásobnú degeneráciu, a to vďaka tvaru matice tohoto systému.

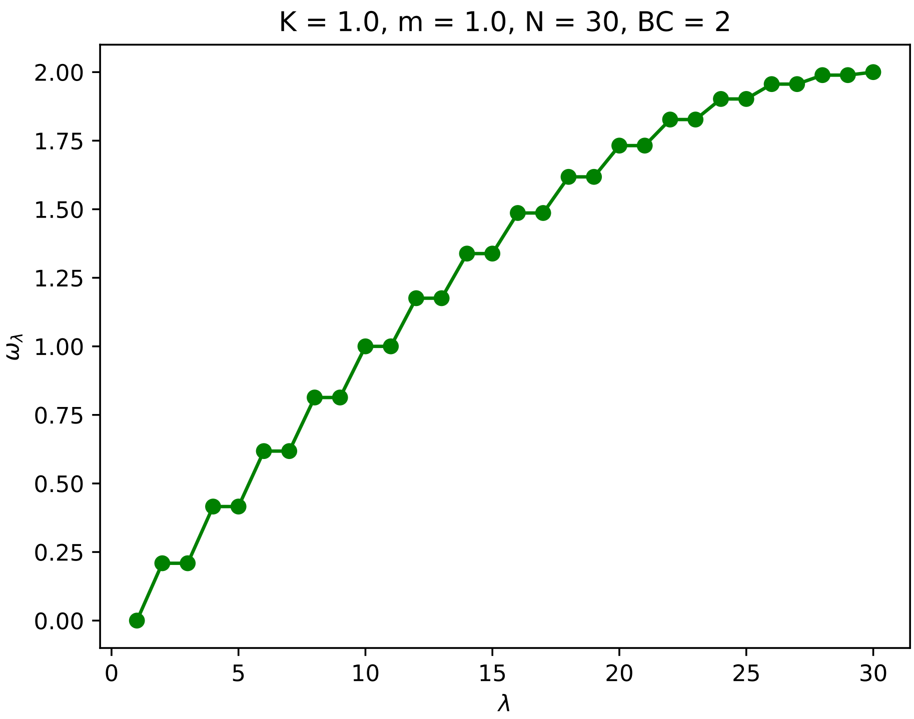
2.1 Grafické zobrazenie výsledkov



Obr. 1: Graf vlastnej frekvencie na poradí atómu v retiazku. Okrajová podmienka pre pevné konce retiazku.



Obr. 2: Graf vlastnej frekvencie na poradí atómu v retiazku. Okrajová podmienka pre voľné konce.



Obr. 3: Graf vlastnej frekvencie na poradí atómu v retiazku. Okrajová podmienka periodické okrajové podmienky.