Die Bewegung im Potentialfeld

Die Bewegung eines einzelnen Massenpunktes zeitlich konstanter Trägemasse m unter dem Einfluss äußerer Kräfte wird durch das Newton'sche Axiom

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}(\vec{r},\dot{\vec{r}};t)$$

bestimmt; Grundaufgabe ist die Bestimmung der Bahnkurve $\vec{r}(t)$ bei vorgegebenem $\vec{F}$.

<u>Bem.</u> Natürlich kann eine Kraft auch von der Beschleunigung abhängen, $\vec{F}(\vec{r},\dot{\vec{r}},\ddot{\vec{r}};t)$, beispielsweise bei der Bewegung eines geladenen Teilchens.

Eine Kraft $\vec{F}(\vec{r})$, die nicht explizit von Geschwindigkeit und Zeit abhängt, heißt <u>konservativ</u>, wenn

(a) sie ein Potential besitzt, $\vec{F}(\vec{r}) =: -\operatorname{grad} U(\vec{r})$, wobei das Potential ein <u>vollständiges Differential</u> bildet,

$$dU = (\partial_x U)\,dx + (\partial_y U)\,dy + (\partial_z U)\,dz \quad ;$$

(b) sie wirbelfrei ist, d.h. $\operatorname{rot} \vec{F}(\vec{r}) = 0$;

(c) die von ihr verrichtete Arbeit wegunabhängig ist und insbesondere auf geschlossenen Wegen Null beträgt,

$$\oint d\vec{s}\,\vec{F} = 0 \quad .$$

<u>Bem.</u>
- Alle drei Bedingungen sind äquivalent.
- In eindimensionalen Systemen (genauer: Systemen mit nur einem Freiheitsgrad) kann stets ein Potential eingeführt werden.

Bedingung (a) besagt, dass ein Massenpunkt entlang des steilsten Potentialgefälles beschleunigt; der Kraftbegriff stellt dabei nur einen Zwischenschritt dar.
Bedingung (b) folgt direkt aus (a) mit der Identität $\text{rot grad}(\cdot) \equiv 0$.
Auch Bedingung (c) folgt direkt aus (a):

$$\oint d\vec{s}\, \text{grad}\, U = \oint \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x U \\ \partial_y U \\ \partial_z U \end{pmatrix} = \oint \left(\partial_x U\, dx + \partial_y U\, dy + \partial_z U\, dz \right) = \oint dU$$

$$= 0.$$

Beachte, dass das Potential nicht eindeutig definiert ist, sondern um eine beliebige Konstante verschoben werden kann: $\text{grad}\,(U + \text{const}) = \text{grad}\, U$.

$\longrightarrow$ beliebiger Bezugspunkt $\vec{r}_0$ in $U(\vec{r}) = -\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} d\vec{r}\,'\, \vec{F}(\vec{r}\,')$

<u>Bsp.</u> • $\vec{F} = \vec{\alpha} \times \vec{r}$, $\vec{\alpha}$ const : nicht konservativ

<u>Variante 1:</u> mittels Vektoridentität

$$\text{rot}\, \vec{F} = \text{rot}\,(\vec{\alpha} \times \vec{r}) = \underbrace{(\vec{r}\, \text{grad})\vec{\alpha}}_{0} - (\vec{\alpha}\, \text{grad})\vec{r} + \vec{\alpha}\,(\text{div}\, \vec{r}) - \underbrace{\vec{r}\,(\text{div}\, \vec{\alpha})}_{0}$$

$$(\vec{\alpha}\, \text{grad})\vec{r} = (\alpha_x \partial_x + \alpha_y \partial_y + \alpha_z \partial_z) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{pmatrix} = \vec{\alpha}$$

$$\text{div}\, \vec{r} = \partial_x x + \partial_y y + \partial_z z = 3$$

$$= 2\vec{\alpha} \neq 0$$

<u>Variante 2:</u> mittels Indexkalkül

$$\text{rot}\,(\vec{\alpha} \times \vec{r}) = \varepsilon_{ijk}\, \partial_j (\vec{\alpha} \times \vec{r})_k\, \vec{e}_i = \alpha_l\, \varepsilon_{ijk}\, \varepsilon_{klm} \underbrace{(\partial_j x_m)}_{\delta_{jm}} \vec{e}_i$$

$$= \alpha_l\, \varepsilon_{kij}\, \varepsilon_{klj}\, \vec{e}_i = \alpha_l\, (\delta_{il}\delta_{jj} - \delta_{ij}\delta_{jl})\, \vec{e}_i = 2\vec{\alpha} \neq 0$$

- $\vec F = \vec\alpha \times (\vec\beta \times \vec r)$, $\quad \vec\alpha, \vec\beta$ const : konservativ nur für $\vec\alpha \parallel \vec\beta$

<u>Variante 1:</u> mittels Vektoridentitäten

$$\operatorname{rot}\vec F = \operatorname{rot}\left(\vec\alpha\times(\vec\beta\times\vec r)\right) = \underbrace{\operatorname{rot}\left(\vec\beta(\vec\alpha\vec r)\right)}_{\operatorname{grad}(\vec\alpha\vec r)\times\vec\beta + (\vec\alpha\vec r)\cancelto{0}{\operatorname{rot}\vec\beta}} - \underbrace{\operatorname{rot}\left(\vec r(\vec\alpha\vec\beta)\right)}_{\cancelto{0}{\operatorname{grad}(\vec\alpha\vec\beta)}\times\vec r + (\vec\alpha\vec\beta)\cancelto{0}{\operatorname{rot}\vec r}}$$

$$= \underbrace{\operatorname{grad}(\vec\alpha\vec r)}_{\cancelto{0}{(\vec r\operatorname{grad})\vec\alpha} + \vec r\times\cancelto{0}{\operatorname{rot}\vec\alpha} + \underbrace{(\vec\alpha\operatorname{grad})\vec r}_{\vec\alpha,\ \text{siehe oben}} + \vec\alpha\times\cancelto{0}{\operatorname{rot}\vec r}}\times\vec\beta = \vec\alpha\times\vec\beta \longrightarrow \text{Null für } \vec\alpha\parallel\vec\beta$$

<u>Variante 2:</u> mittels Indexkalkül

$$\operatorname{rot}\left(\vec\alpha\times(\vec\beta\times\vec r)\right) = \varepsilon_{ijk}\,\vec e_i\,\partial_j\underbrace{\left(\vec\alpha\times(\vec\beta\times\vec r)\right)_k}_{\varepsilon_{klm}\alpha_l\underbrace{(\vec\beta\times\vec r)_m}_{\varepsilon_{mrs}\beta_r x_s}} = \alpha_l\beta_r\,\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{klm}\,\varepsilon_{mrs}\underbrace{(\partial_j x_s)}_{\delta_{js}}\vec e_i$$

$$= \alpha_l\beta_r\,\varepsilon_{ijk}\underbrace{\varepsilon_{mkl}\,\varepsilon_{mrj}}_{\delta_{kr}\delta_{lj}-\delta_{kj}\delta_{lr}}\vec e_i = \alpha_j\beta_k\,\varepsilon_{ijk}\,\vec e_i - \alpha_l\beta_l\,\cancelto{0}{\varepsilon_{ijj}}\,\vec e_i$$

$$= \vec\alpha\times\vec\beta$$

Für konservative Kräfte ist die <u>Lösung der Bewegungsgleichung durch Quadratur</u> möglich. In einer Dimension:

$$U(x) = -\int_{x_0}^{x} dx'\, F(x') \longrightarrow \underline{-\frac{d}{dt}U(x)} = \int_{x_0}^{x} dx'\,\frac{dF(x')}{dt} = \int_{x_0}^{x} dx'\,\frac{dF(x')}{dx'}\,\frac{dx'}{dt}$$

$$= \int_{x_0}^{x}\dot x'\, dF(x') \underset{x_0=0}{=} \underline{\dot x\, F(x)} \qquad (*)$$

$\longrightarrow$ Bewegungsgleichung: $\quad m\ddot{x} = F(x) \quad | \cdot \dot{x}$

$$m\dot{x}\ddot{x} = \dot{x}F(x)$$
$$\frac{d}{dt}\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2\right) = -\frac{d}{dt}U(x) \qquad (*)$$

$$\Rightarrow \quad \underline{\frac{m}{2}\dot{x}^2 = E - U(x)}, \qquad E: \text{Integrationskonstante}$$

Das ist eine Bilanzgleichung, die durch Trennung der Variablen gelöst werden kann:

„Umstellen" nach dt: $\qquad dt = \dfrac{\pm dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(E-U(x))}}$

$$\longrightarrow \quad \underline{\underline{t - t_0 = \int_{x_0}^{x(t)} \frac{\pm dx'}{\sqrt{\frac{2}{m}(E-U(x'))}}}}, \qquad x_0 \equiv x(t_0)$$

<u>Bsp.</u> harmonischer Oszillator

Potential: $\quad U(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2 \quad \longrightarrow \quad t - t_0 = \displaystyle\int_{x_0}^{x} \frac{\pm dx'}{\sqrt{2E/m - \omega^2 x'^2}}$,

wählen „+", $t_0 = 0$, $x_0 = 0$

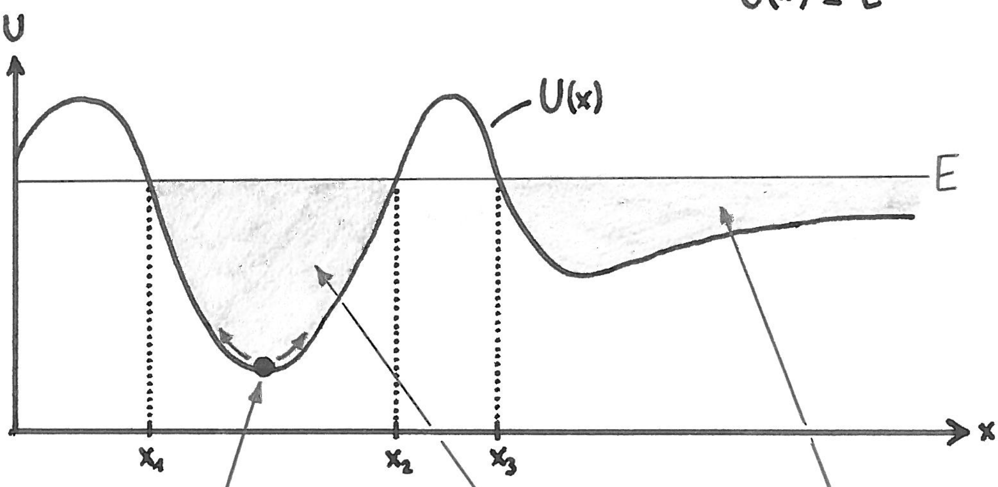
$$\longrightarrow \quad \omega t = \int_0^x \frac{dx'}{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - x'^2}} = \arcsin\left(x\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\right)$$

$$\underline{\underline{x(t) = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sin(\omega t)}}$$

Durch die Wahl des positiven Vorzeichens ging eine Lösung verloren (i.A. Linearkombination aus „+" und „−").

Anhand des Potentials kann die Bewegung eines Massenpunktes anschaulich per Kurvendiskussion analysiert werden (stabile/instabile Gleichgewichtslagen, gebundene/freie Bewegung).

Bilanzgleichung: $\frac{m}{2}\dot{x}^2 = E - U(x)$ $\longrightarrow$ nur solche x erlaubt, für die $U(x) \leq E$



freie Bewegung: Der MP kann das räumlich Unendliche erreichen.

stabile Gleichgewichtslage: Der MP kann dort ruhen oder Schwingungen darum ausführen.

gebundene Bewegung: Der MP kann das Gebiet $x_1 \leq x \leq x_2$ nicht verlassen.

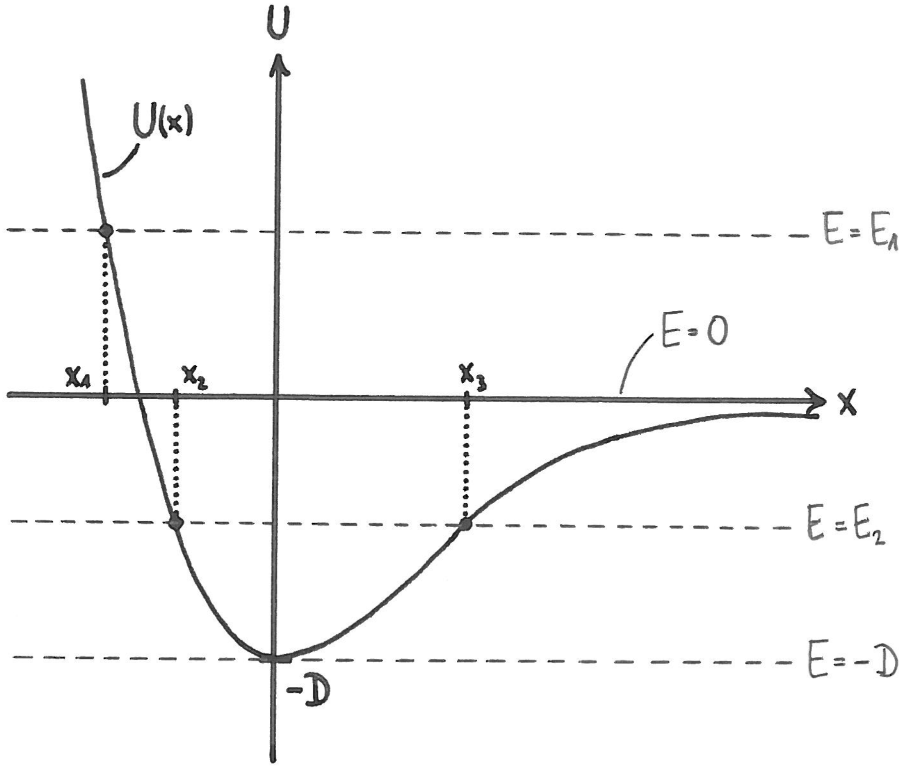
Welche der möglichen Bewegungen der Massenpunkt tatsächlich ausführt, ist durch die Anfangsbedingungen festgelegt.

Sogenannte <u>Äquipotentialflächen</u> sind durch $U(x) = const$, bzw. $U(\vec{r}) = const$ in zwei oder drei Dimensionen, definiert. Auf einer Äquipotentialfläche bewegt sich ein Massenpunkt, ohne dass Arbeit verrichtet wird; die zugehörige Kraft steht darauf senkrecht.

<u>Bsp.</u> Das sogenannte „Morse-Potential" beschreibt näherungsweise die Schwingungen eines zweiatomigen Moleküls und ist gegeben durch

$$U(x) = D\left(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}\right), \qquad \alpha, D: \text{const},$$

wobei x die Auslenkung aus der Ruhelage bezeichnet.



$E_1 > 0$: Jede Auslenkung $x \geq x_1$ kann erreicht werden, auch $x \to \infty$; d.h. das Molekül trennt sich auf.

$E = 0$: Um eine unendliche Auslenkung zu erreichen, muss unendlich viel Zeit vergehen, denn

$$dt = \frac{\pm dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - U(x))}} \xrightarrow{x \to \infty} \infty \, ;$$

besser gesagt: Das Unendliche kann nur mit verschwindender Geschwindigkeit erreicht werden.

$E_2 < 0$: Es sind nur Auslenkungen $x_2 \leq x \leq x_3$ möglich, bspw. Schwingungen um $x = 0$. Die Atome sind gebunden.

$E = -D$: Es ist nur die Ruhelage $x = 0$ möglich.

Häufig interessiert man sich für Schwingungen kleiner Auslenkung um die Ruhelage, hier $|x| \ll 1$

$\longrightarrow$ mit der Reihenentwicklung der Exponentialfunktion,

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \ldots :$$

$$U(x) = D\left(1 - \cancel{2\alpha x} + 2\alpha^2 x^2 - 2 + \cancel{2\alpha x} - \alpha^2 x^2\right) + \mathcal{O}(x^3)$$

$$\approx -D + D\alpha^2 x^2$$

Das ist das (um die Konstante $-D$ verschobene) Potential eines harmonischen Oszillators der Frequenz $\omega = \alpha\sqrt{2D/m}$.