Klassische Mechanik

Newton: Zeit: t

Raum: N Teilchen mit kartesischen Koord $\underline{r} = (\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N)$
und Massen m_i

Wechselwirkung (potenzielle Energie): $V(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N)$

Kraft: $\underline{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \underline{r}_i}$

Geschwindigkeit: $\underline{v} \equiv \frac{d\underline{r}}{dt} \equiv \dot{\underline{r}}$

Beschleunigung: $\underline{a} \equiv \frac{d\underline{v}}{dt} = \frac{d^2\underline{r}}{dt^2} = \ddot{\underline{r}}$

Impuls $\underline{p} = m\underline{v}$

Zustand des Systems vollständig festgelegt durch $\underline{r}, \dot{\underline{r}}$
$(\underline{r}(t_0), \dot{\underline{r}}(t_0))$ bestimmen Bewegung für alle Zeiten t

$\Rightarrow \ddot{\underline{r}} = f(\underline{r}, \dot{\underline{r}})$ Bewegungsgleichung

Newton $\boxed{m\ddot{\underline{r}} = \underline{F} = -\frac{\partial V}{\partial \underline{r}}}$ Gilt nur für kartesische Koordinaten!

MD Simulation: Anwendung der Newton-Gl. auf molekulare Systeme

Kinetische Energie $T = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m_i \dot{\underline{r}}^2$

Erdbeschleunigung

Beispiel 1: freier Fall ~~...~~, $N = 1$, $V(r) = mgr$

$$m\ddot{r} = -\frac{\partial V}{\partial r} = -mg \Rightarrow \ddot{r} = -g$$

$$\dot{r}(t) = \int_0^t \ddot{r}(t')dt' = -gt + \dot{r}(0)$$

$$\underline{\underline{r(t)}} = \int_0^t \dot{r}(t')dt' = \underline{\underline{-\frac{1}{2}gt^2 + \dot{r}(0)t + r(0)}}$$

Anfangsbedingungen

Bsp. 2: Harmonischer Oszillator: $V(r) = \frac{1}{2} k r^2$

$m\ddot{r} = -\frac{\partial V}{\partial r} = -kr$

Lösungsansatz: Schwingung

$r(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t$

$r(0) = B$

$\dot{r}(t) = A\omega \cos \omega t - B\omega \sin \omega t$

$\dot{r}(0) = A\omega$

$\ddot{r}(t) = -A\omega^2 \cos\omega t - B\omega^2 \cancel{\cos} \omega t = -\omega^2 r(t)$

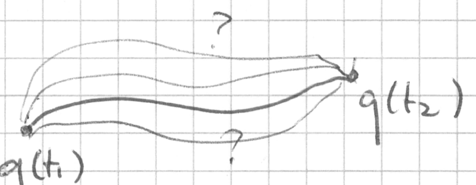
$\Longrightarrow \omega^2 = \frac{k}{m}, \Longrightarrow \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

$$\boxed{r(t) = \frac{\dot{r}(0)}{\omega} \sin \omega t + r(0) \cos \omega t \quad \text{mit } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}}$$

Schwingung umso schneller, je leichter das Teilchen (m), je stärker die WW (k).

Verallg. Koordinaten: $q(t) = (q_1(t), \dots, q_n(t))$

Trajektorien:



Welchen Weg nimmt das System?

Antwort: ~~Derjenige~~ Weg, für den $\int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t)\, dt =$ minimal ist

$L = T - V = E_{kin} - E_{pot}$ Lagrangefunktion

Bewegungsgl. in verallg. Koordinaten:

kl. Variation der Trajektorie $q(t) \to q(t) + \delta q(t)$

$\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$

$$0 = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t)\, dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q}\, dt$$

Lagrange-Gl.

$$= \cancel{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \Big|_{t_1}^{t_2}}^{\,0} - \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q\, dt \Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0}$$

kart. Koordinaten ~~$\underline{r}, \dot{\underline{r}}$~~ $q = r$

$$L(r,\dot r) = \frac{1}{2} m \dot{\underline{r}}^2 - V(\underline{r})$$

$$0 = \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\underline{r}}} - \frac{\partial L}{\partial \underline{r}} = \frac{d}{dt} m \dot{\underline{r}} + \frac{\partial V(\underline{r})}{\partial \underline{r}} \Longrightarrow m \ddot{\underline{r}} = -\frac{\partial V}{\partial \underline{r}} \text{ (Newton!)}$$

Hamilton - Bewegungsgleichungen:

Verallgem. Impulse $p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot q}$

Hamiltonfkt. $H(p,q) = p \cdot \dot q - L$

$$dH = \frac{\partial H}{\partial p} dp + \frac{\partial H}{\partial q} dq$$

$$dH = d(p\dot q - L(q,\dot q))$$

$$= \dot q\, dp + \cancel{p\, d\dot q} - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial q}}_{= \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q} = \dot p} dq - \cancel{\underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot q}}_{= p} d\dot q}$$

$$= \dot q\, dp - \dot p\, dq$$

$$\Longrightarrow \boxed{\dot q = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot p = -\frac{\partial H}{\partial q}}$$ 2n Differentialgl. 1. Ord.

Energieerhaltung:

$$H = p\dot q - L, \quad L = T(q,\dot q) - V(q), \quad T(q,\dot q) = \frac{1}{2} \dot q \overset{n \times n \text{ Matrix}}{A(q)} \dot q$$

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot q} = \frac{\partial T}{\partial \dot q} = \frac{1}{2} \dot q A(q) + \frac{1}{2} A(q) \dot q = A(q)\dot q$$

$$H = p\dot q - T + V = \underbrace{\dot q A(q) \dot q}_{= 2T} - T + V = T + V = E_{tot}$$

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial H}{\partial q}\frac{dq}{dt} = \dot q \dot p - \dot p \dot q = 0$$