

1.8 Harmonische Näherung

In diesem Abschnitt werden wir uns mit dem Lagrange Formalismus befassen für den Fall, dass das System nur leichte Auslenkungen aus seiner Ruhelage erfährt. Ein Beispiel hierfür sind Anregungsmoden für das Wassermolekül, so wie es in Abb. 1.1 dargestellt ist. Natürlich müssen wir uns darüber im Klaren sein, dass die Behandlung eines solchen atomaren Systems natürlich die Behandlung mit den Werkzeugen der Quantenmechanik erfordert. Die Behandlung im Rahmen der klassischen Mechanik, die wir hier anstreben kann also nicht zu quantitativen Ergebnissen führen. Allerdings werden wir bei dieser Diskussion Begriffe entwickeln, wie z.B. die Frequenzen der Normalschwingungen, die so auch für die Diskussion in der Quantenmechanik relevant sind. Diese Schwingungsfrequenzen der Normalmoden sind gerade auch die Frequenzen, bei denen das Wasser elektromagnetische Wellen absorbiert und damit, wie wir aus der Diskussion im Teil Optik der Vorlesung wissen, die interessanten Parameter zur Beschreibung des Frequenzverhaltens des Brechungsindex.

Das Wassermolekül kann auf verschiedene Arten angeregt werden. Es kann rotieren, es kann zu Schwingungen angeregt werden, bei denen sich der Winkel zwischen den beiden Wasserstoffatomen ändert, oder aber auch zu Schwingungen, bei denen sich der Abstand zwischen den Wasserstoffatomen und dem Sauerstoffatom ändert. Wir wollen uns auf diese Schwingungen der Abstände beschränken und werden deshalb als Beispiel im zweiten Teil dieses Paragraphen die einfache lineare Kette behandeln, wie sie als vereinfachtes Modell des Wassermoleküls im rechten Teil der Abb 1.1 dargestellt ist.

Dies ist ein sehr einfaches Modell für die Schwingungsmoden eines relativ einfachen Moleküls. Wir werden dabei sehen, wie wir aus den Schwingungsmoden etwas lernen können über die Masse der beteiligten Atome und den Kräften, die zwischen diesen wirken. Für das Wassermolekül ist die Frage des atomaren Aufbaus natürlich längst beantwortet. Aber in der aktuellen Forschung ist die Frage nach der Struktur von komplexen Molekülen im Bereich der Biologie von großem Interesse. Ein Zugang zur Untersuchung dieser Strukturen besteht darin, im Experiment die charakteristischen Frequenzen zu bestimmen, bei denen solche Moleküle elektromagnetische Wellen absorbieren. Dann versucht man Modelle für die Struktur dieser Moleküle zu entwickeln, die genau diese charakteristischen Frequenzen reproduzieren.

Charakteristische Frequenzen von komplexen Systemen sind aber nicht für die Physik auf atomarer Ebene interessant, sie spielen auch bei makroskopischen Objekten (Bauwesen: Stabilität von Bauten bei Erschütterungen, Astronomie: Schwingungsmoden von Sternen ...) eine große Rolle. Im ersten Teilabschnitt werden wir allgemein die Begriffe und die Technik für die Behandlung und Berechnung solcher Schwingungsmoden entwickeln, im zweiten Teil wird dann das Beispiel des linearisierten Wassermoleküls behandelt. Zum besseren Verständnis ist es vielleicht hilfreich für den Leser bei der Bearbeitung des allgemeinen Teils stets das konkrete Beispiel vor Augen zu behalten.

1.8.1 Kleine Schwingungen im Lagrange Formalismus

In diesem Abschnitt wird eine Methode entwickelt, mit der man ein System beschreibt, das durch n generalisierte Koordinaten q_i beschrieben wird und das lediglich kleine Ab-

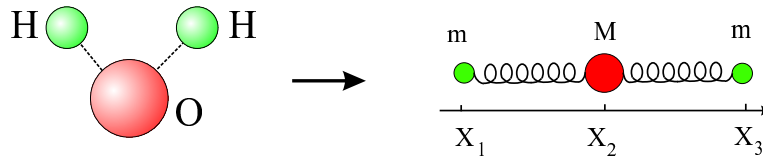


Abbildung 1.1: Modell des Wassermoleküls

weichungen von einem Punkt im Konfigurationsraum erfährt, bei dem das Potenzial (wir nehmen hier ein lokales, geschwindigkeitsunabhängiges Potenzial an) ein Minimum hat. Bezeichnen wir die Werte der generalisierten Koordinaten, bei denen V minimal ist, mit q_{i0} , so können wir das Potenzial in der Nähe dieses Minimums gut durch eine Taylorentwicklung um diesen Punkt beschreiben. Es gilt also

$$V(q_i) = V(q_{i0}) + \sum_j \frac{\partial V}{\partial q_j} (q_j - q_{j0}) + \sum_{j,k} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial q_j \partial q_k} (q_j - q_{j0})(q_k - q_{k0}) + \dots \quad (1.122)$$

Für kleine Abweichungen der generalisierten Koordinaten

$$\eta_i = q_i - q_{i0}, \quad (1.123)$$

können wir die Terme dritter und höherer Ordnung in dieser Entwicklung vernachlässigen. Ausserdem gilt am Minimum, dass

$$\frac{\partial V}{\partial q_j} (q_{i0}) = 0,$$

so dass wir bei einer Normierung bei der $V(q_{i0}) = 0$ gesetzt wird, das Potenzial aus (1.122) annähern können durch

$$V(\eta_i) = \sum_{j,k} \frac{1}{2} K_{jk} \eta_j \eta_k \quad \text{mit} \quad K_{jk} = \frac{\partial^2 V}{\partial q_j \partial q_k}. \quad (1.124)$$

Die Zahlen K_{jk} können wir als Elemente einer symmetrischen Matrix mit

$$K_{kj} = K_{jk}, \quad (1.125)$$

der Dimension n (das ist die Zahl der Freiheitsgrade) anordnen. Man bezeichnet diese K_{jk} als Elemente des **Kraftkonstantentensors**.

Als nächstes werden wir nun eine entsprechende Entwicklung bis zu quadratischen Gliedern in den Abweichungen η_i für die kinetische Energie vornehmen. Im Abschnitt ?? (??) haben wir gezeigt, dass man im Fall zeitunabhängiger Zwangsbedingungen die kinetische Energie eines Systems schreiben kann in der Form:

$$T = \sum_{j,k=1}^n \frac{\alpha_{jk}}{2} \dot{q}_j \dot{q}_k = \sum_{j,k=1}^n \frac{\alpha_{jk}}{2} \dot{\eta}_j \dot{\eta}_k, \quad (1.126)$$

mit

$$\begin{aligned} \alpha_{jk} &= \sum_{a=1}^N m_a \frac{\partial \vec{r}_a}{\partial q_j} \frac{\partial \vec{r}_a}{\partial q_k} \\ &= \alpha_{jk}(q_{i0}) + \sum_{l=1}^n \frac{\partial \alpha_{jk}}{\partial q_l} \underbrace{(q_l - q_{l0})}_{=\eta_l} + \dots \end{aligned}$$

In der zweiten Zeile wurden die Funktionen α_{jk} , die ja im allgemeinen Fall von den generalisierten Koordinaten q_i abhängen um den Punkt $q_i = q_{i0}$ in einer Taylorreihe entwickelt. Setzt man aber diese Entwicklung in (1.126) ein, so sieht man, dass bereits das zweite Glied in dieser Entwicklung Beiträge zu T liefert, die von dritter Ordnung in den kleinen Größen η_i (bzw. $\dot{\eta}_i$) sind, so dass wir unter konsequenter Vernachlässigung solcher Terme dritter Ordnung die kinetische Energie approximieren müssen durch

$$T = \sum_{j,k=1}^n \frac{M_{jk}}{2} \dot{\eta}_j \dot{\eta}_k \quad \text{mit} \quad M_{jk} := \alpha_{jk}(q_{i0}). \quad (1.127)$$

Auch die Zahlen M_{jk} , das sind die Werte der Funktionen α_{jk} an der Stelle q_{i0} bilden eine symmetrische Matrix der Dimension n , den sogenannten **Massentensor**. Aus den Darstellungen (1.124) und (1.127) erhalten wir also die harmonische Näherung für die Lagrangefunktion

$$L(\eta_i, \dot{\eta}_i) = \sum_{j,k=1}^n \frac{M_{jk}}{2} \dot{\eta}_j \dot{\eta}_k - \frac{K_{jk}}{2} \eta_j \eta_k. \quad (1.128)$$

Dabei haben die Auslenkungen aus dem Minimum des Potentials, η_i , und die zugehörigen Geschwindigkeiten die Rolle der generalisierten Koordinaten und Geschwindigkeiten übernommen. Die Lagrange Bewegungsgleichungen lauten dann

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_i} &= \frac{d}{dt} \sum_j M_{ij} \dot{\eta}_j = \sum_j M_{ij} \ddot{\eta}_j \\ &= \frac{\partial L}{\partial \eta_i} = - \sum_j K_{ij} \eta_j. \end{aligned} \quad (1.129)$$

Fassen wir die einzelnen Auslenkungen zu einem Spaltenvektor der Dimension n zusammen (dabei soll der Doppelpfeil daran erinnern, dass wir hier Vektoren der Dimension n vorliegen haben)

$$\vec{\eta} = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \dot{\vec{\eta}} = \begin{pmatrix} \dot{\eta}_1 \\ \vdots \\ \dot{\eta}_n \end{pmatrix}, \quad (1.130)$$

so können wir die Bewegungsgleichung (1.129) auch umschreiben in die Vektorgleichung

$$M \ddot{\vec{\eta}} = -K \vec{\eta}, \quad (1.131)$$

wobei M (K) hier für die Matrix des Massentensors (Kraftkonstantentensors) steht. Zur Lösung dieser Gleichung (die ja eigentlich für n gekoppelte Differenzialgleichungen steht) machen wir den Ansatz einer harmonischen Schwingung

$$\vec{\eta}(t) = \vec{\eta}_0 \exp(i\omega t), \quad (1.132)$$

wobei wir wie üblich natürlich nur an den Realteil dieser Gleichung interessiert sind. Setzt man diesen Ansatz in (1.131) ein, so ergibt sich

$$\underbrace{(K - \omega^2 M)}_{=B(\omega^2)} \vec{\eta}_0 = \vec{0}. \quad (1.133)$$

Diese Gleichung besitzt nur dann eine nichttriviale Lösung, wenn die Determinante der Matrix

$$\det B(\omega^2) = \det (K - \omega^2 M) = 0. \quad (1.134)$$

Wäre nämlich die Determinante der hier definierten Matrix B ungleich Null, so würde eine inverse Matrix B^{-1} existieren. Multipliziert man (1.133) von links mit B^{-1} , so führt das auf

$$B^{-1} B \vec{\eta}_0 = \vec{\eta}_0 = \vec{0},$$

was aber bedeutet, dass wir nur die triviale Lösung erhalten. Die Determinante der Matrix B ist ein Polynom n ten Grades in den gesuchten Frequenzen ω^2 . Gleichung (1.134) ist also eine Bestimmungsgleichung für diese Winkelgeschwindigkeiten ω^2 .¹

Man wird also n Lösungen ω_α^2 für (1.134) erhalten. Mit den Mitteln der Linearen Algebra kann man nachweisen, dass alle diese Lösungen reell sind und positiv

$$\omega_\alpha^2 \geq 0. \quad (1.135)$$

Aus der Sicht der Mathematik liegt dies daran, dass die Matrizen K und M symmetrisch sind und positiv definit. Dies bedeutet z.B. für K , dass $V(\eta_i)$ in (1.124) für alle Werte der η_i positiv ist, was ja direkt damit verbunden ist, dass V an der Stelle $\eta_i = 0$ (d.h. $q_i = q_{i0}$) ein echtes Minimum aufweist.

Wir wollen aber an dieser Stelle auf den mathematischen Nachweis von (1.135) verzichten und dieses Ergebnis aus physikalischer Sicht erläutern. Wäre nämlich eine der Lösungen ω_α^2 negativ oder komplex, so gäbe es für ω_α zwei komplexe Lösungen mit

$$\omega_{\alpha,1} = w_\alpha + iu_\alpha \quad \text{und} \quad \omega_{\alpha,2} = -w_\alpha - iu_\alpha.$$

Eine der beiden Lösung besäße also einen negativen Imaginärteil $-u_\alpha$. Dies führt aber nach (1.132) zu einer Zeitabhängigkeit der generalisierten Koordinaten von der Form

$$\eta_i(t) = \eta_{i0} \exp(-i\omega_\alpha t) \exp(u_\alpha t)$$

also eine Schwingung, bei der die Amplitude exponentiell mit der Zeit anwächst. Eine solche Bewegung ist aber für eine Schwingung um ein Minimum nicht zu erwarten.

Für positive Werte von ω_α^2 liefert der Ansatz (1.132) eine harmonische Schwingung wie ein Oszillator mit einer reellen Winkelgeschwindigkeit ω_α . Man bezeichnet diese harmonische Schwingungen als **Normalschwingungen** oder auch **Normalmoden** des Systems.

Wir können also nun eine dieser Lösungen ω_α^2 herausgreifen und bestimmen dafür durch die Lösung des linearen Gleichungssystems (siehe (1.133))

$$(K - \omega_\alpha^2 M) \vec{\eta}_{\alpha 0} = \vec{0}.$$

Bezeichnet man die Elemente dieses Vektors der Normalschwingung zur Frequenz ω_α mit $A_{i\alpha}$:

$$\vec{\eta}_{\alpha 0} = \begin{pmatrix} A_{1\alpha} \\ \vdots \\ A_{n\alpha} \end{pmatrix},$$

¹Nimmt man an, dass die Matrix M der Einheitsmatrix entspricht, so ist (1.133) ein gewöhnliches Eigenwertproblem. Die Gleichung (1.134) entspricht dann der Aufgabe die Nullstellen des charakteristischen Polynoms von K zu finden. Deshalb bezeichnet man Gleichungen vom Typ (1.133) auch als verallgemeinertes Eigenwertproblem.

so schreibt sich dieses Gleichungssystem in der ausführlichen Schreibweise

$$\sum_{j=1}^n (K_{ij} - \omega_\alpha^2 M_{ij}) A_{j\alpha} = 0, \quad \text{für } i = 1 \dots n. \quad (1.136)$$

Wie wir (hoffentlich) alle aus der Linearen Algebra wissen, kann man diese Koeffizienten z.B. berechnen durch das Rezept

$$A_{j\alpha} = (-1)^{1+j} \det \left([K - \omega_\alpha^2 M]^{1j} \right). \quad (1.137)$$

Dabei bezeichnet $[K - \omega_\alpha^2 M]^{1j}$ die Matrix der Dimension $n - 1$, die sich aus $(K - \omega_\alpha^2 M)$ ergibt, wenn man die erste Zeile streicht und die j -te Spalte.

Zum Beweis dieses Rechenrezeptes zeigen wir zunächst, dass (1.137) die erste Gleichung von (1.136 für $i = 1$) erfüllt, da

$$\sum_{j=1}^n (K_{1j} - \omega_\alpha^2 M_{1j}) A_{j\alpha} = \det(K - \omega_\alpha^2 M) = 0,$$

gilt. Die erste Gleichung in dieser Zeile verifiziert man dadurch, dass man die Determinante von $(K - \omega_\alpha^2 M)$ nach den Elementen der ersten Zeile entwickelt. Die zweite Gleichung ist dann gerade die Bestimmungsgleichung für die ω_α (1.134). Damit ist also die erste Zeile von (1.136) erfüllt.

Für i ungleich 1 liefert das Einsetzen von (1.137) in die i -te Zeile des Gleichungssystems (1.136) die Determinante der Matrix $(K - \omega_\alpha^2 M)$, wo allerdings die i -te Zeile durch die erste Zeile ersetzt ist. Die Determinante einer Matrix, in der 2 Zeilen identisch sind ist ebenfalls gleich 0, wodurch also die Gültigkeit des Rechenrezeptes (1.137) bestätigt wäre.

Nachdem wir nun wissen, wie man diese Eigenvektoren der Normalschwingungen berechnen kann, wollen wir noch einige Eigenschaften herausarbeiten. Wir betrachten dazu zwei Lösungen zu unterschiedlichen Winkelgeschwindigkeiten $\omega_\alpha^2 \neq \omega_\beta^2$. Die entsprechenden Gleichungssysteme liefern also

$$\begin{aligned} \sum_j K_{ij} A_{j\alpha} &= \omega_\alpha^2 \sum_j M_{ij} A_{j\alpha} \\ \sum_j K_{ij} A_{j\beta} &= \omega_\beta^2 \sum_j M_{ij} A_{j\beta} \end{aligned}$$

Multipliziert man die erste dieser Gleichungen mit $A_{i\beta}$ und summiert diese über alle i , sowie die zweite mit $A_{i\alpha}$ und summiert ebenfalls über i , ergibt sich

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} K_{ij} A_{j\alpha} A_{i\beta} &= \omega_\alpha^2 \sum_{i,j} M_{ij} A_{j\alpha} A_{i\beta} \\ \sum_{i,j} K_{ij} A_{i\alpha} A_{j\beta} &= \omega_\beta^2 \sum_{i,j} M_{ij} A_{i\alpha} A_{j\beta}. \end{aligned} \quad (1.138)$$

Subtrahiert man diese Gleichungen voneinander und berücksichtigt, dass $M_{ji} = M_{ij}$, sowie $K_{ji} = K_{ij}$, so erhält man

$$0 = (\omega_\alpha^2 - \omega_\beta^2) \sum_{i,j} M_{ij} A_{i\alpha} A_{j\beta}.$$

Da der Faktor $(\omega_\alpha^2 - \omega_\beta^2)$ nach Voraussetzung ungleich 0 ist, bedeutet dies, dass

$$\sum_{i,j} M_{ij} A_{i\alpha} A_{j\beta} = \vec{\eta}_{\alpha 0}^t M \vec{\eta}_{\beta 0} = 0, \quad \text{für } \alpha \neq \beta.$$

Die Vektoren $\vec{\eta}_{\alpha 0}$ können nun noch so normiert werden, dass diese Multiplikation den Wert 1 ergibt für den Fall $\alpha = \beta$. Dies bedeutet also zusammengefasst

$$\sum_{i,j} M_{ij} A_{i\alpha} A_{j\beta} = \vec{\eta}_{\alpha 0}^t M \vec{\eta}_{\beta 0} = \delta_{\alpha\beta} \quad (1.139)$$

mit dem Kronecker Symbol $\delta_{\alpha\beta}$. Man kann diese Gleichung so interpretieren, dass die Vektoren $\vec{\eta}_{\alpha 0}$ orthogonal sind bezüglich der Metrik, die durch den Massentensor M definiert ist².

Man kann die Gleichung (1.139) aber natürlich auch als Gleichung für Matrixelemente mit den Zeilen- und Spaltenindizes α und β ansehen. Dann ist diese Gleichung gleichbedeutend mit

$$A^t M A = 1, \quad (1.140)$$

was ja bedeutet, dass der Massentensor M durch die Transformation, die durch die Matrix A beschrieben wird diagonalisiert wird. Dabei ist A im Allgemeinen aber keine orthogonale Transformation. Die zu A inverse Matrix ist ja nicht A^t sondern

$$A^{-1} = A^t M.$$

Mit diesen Ergebnissen (speziell (1.139)) können wir nun z.B. die zweite Gleichung von (1.138) umschreiben auf

$$\sum_{i,j} K_{ij} A_{i\alpha} A_{j\beta} = \omega_\beta^2 \delta_{\alpha\beta}$$

was in Matrixschreibweise ja bedeutet

$$A^t K A = \begin{pmatrix} \omega_1^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \omega_n^2 \end{pmatrix}. \quad (1.141)$$

Durch die Transformation mit A wird also auch der Kraftkonstantentensor K auf eine Matrix der Diagonalgestalt transformiert. In der Diagonale stehen die Quadrate der Frequenzen der Normalschwingungen ω_α . Durch die Transformation werden also gleichzeitig M und K diagonalisiert.

Mit diesen Normalschwingungen haben wir spezielle Lösungen der Bewegungsgleichungen gefunden. Die Bewegungsgleichungen sind lineare Gleichungen und deshalb ist auch jede Linearkombination dieser Normalschwingungen ein Lösung. Die Entwicklungskoeffizienten dieser Linearkombination müssen noch aus den Startbedingungen hergeleitet werden. Sind die Startbedingungen so, dass nur eine Normalschwingung des Systems angeregt wird, so wird die Bewegung des Systems als periodische Schwingung mit der entsprechenden Winkelgeschwindigkeit ablaufen. Im allgemeinen Fall wird man aber Startbedingungen haben,

²Für den einfacheren Fall des normalen Eigenwertproblems, bei dem M die Eins-Matrix ist, bedeutet dies natürlich, dass die Eigenvektoren orthogonal sind.

die nicht einer Normalschwingung entsprechen. Vielmehr definieren diese Startbedingungen eine spezielle Überlagerung von Normalschwingungen. Da diese Normalschwingungen verschiedenen Frequenzen besitzen, wird die Bewegung im Allgemeinen nicht periodisch ablaufen.

Wir müssen also Koeffizienten x_α finden, so dass die Starbedingungen für die Auslenkungen

$$\begin{aligned}\eta_j(t=0) &= \Re \left\{ \sum_{\alpha} x_{\alpha} A_{j\alpha} \exp(i\omega_{\alpha} t) \right\} \\ &= \sum_{\alpha} \Re\{x_{\alpha}\} A_{j\alpha} \quad \text{und} \\ \dot{\eta}_j(t=0) &= \Re \left\{ \sum_{\alpha} i\omega_{\alpha} x_{\alpha} A_{j\alpha} \exp(i\omega_{\alpha} t) \right\} \\ &= - \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} \Im\{x_{\alpha}\} A_{j\alpha} \quad \text{für } j = 1 \dots n .\end{aligned}\tag{1.142}$$

Dabei steht \Re für den Realteil und \Im für den Imaginärteil des Ausdruckes im Argument der Funktion. Nehmen wir z.B. an, dass das System zur Startzeit in Ruhe sein soll, also $\dot{\eta}_j(t=0) = 0$ so können wir reelle Werte für die Koeffizienten x_α annehmen und müssen lediglich das erste Gleichungssystem lösen. Sind dies x_α bestimmt, so ergibt sich dann in diesem Fall die Zeitabhängigkeit der Auslenkungen durch

$$\eta_j(t) = \sum_{\alpha} \Re\{x_{\alpha}\} A_{j\alpha} \cos(\omega_{\alpha} t) .\tag{1.143}$$

1.8.2 Beispiel: Modell des Wassermoleküls

Als Beispiel für die Anwendung der Techniken, die wir gerade entwickelt haben, betrachten wir das eindimensionale Modell des Wassermoleküls, das im rechten Teil der Abb. 1.1 skizziert ist. Als generalisierte Koordinaten bieten sich natürlich die x Koordinaten des Systems an. Die potenzielle Energie des Kraftfeldes, das durch die beiden Federn dargestellt ist ergibt sich dann als

$$V(x_i) = \frac{k}{2} (x_2 - x_1 - r_0)^2 + \frac{k}{2} (x_3 - x_2 - r_0)^2 ,$$

wobei r_0 den Abstand der Atompaaire bezeichnet bei denen das Potenzial minimal ist. Bezeichnen wir wie vorher die Abweichung der generalisierten Koordinaten x_i von der Ruhelage bei der das Potenzial verschwindet mit

$$\eta_i = x_i - x_{i0} ,$$

so ergibt sich für die potenzielle Energie

$$\begin{aligned}V(\eta_j) &= \frac{k}{2} (\eta_2 - \eta_1)^2 + \frac{k}{2} (\eta_3 - \eta_2)^2 \\ &= \frac{k}{2} (\eta_1^2 + 2\eta_2^2 + \eta_3^2 - \eta_1\eta_2 - \eta_2\eta_1 - \eta_2\eta_3 - \eta_3\eta_2) \\ &= \sum_{i,j} \frac{1}{2} K_{ij} \eta_i \eta_j\end{aligned}$$

mit einem Kraftkonstantentensor

$$K = \begin{pmatrix} k & -k & 0 \\ -k & 2k & -k \\ 0 & -k & k \end{pmatrix}. \quad (1.144)$$

In diesem Fall müssen wir also den Kraftkonstantentensor nicht als Näherung (vergl. (1.124)) bestimmen sondern erhalten ihn wegen der Einfachheit des Potentials direkt.

Die kinetische Energie berechnet sich zu

$$\begin{aligned} T &= \frac{m}{2}\dot{x}_1^2 + \frac{M}{2}\dot{x}_2^2 + \frac{m}{2}\dot{x}_3^2 \\ &= \frac{m}{2}\dot{\eta}_1^2 + \frac{M}{2}\dot{\eta}_2^2 + \frac{m}{2}\dot{\eta}_3^2 \\ &= \text{sum}_{i,j} \frac{1}{2} M_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j, \end{aligned}$$

mit einem Massentensor

$$M = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix}. \quad (1.145)$$

Auch die Darstellung der kinetischen Energie über den Massentensor ergibt sich also in diesem Fall ohne weiter Näherung. Daraus erhalten wir dann das charakteristische Polynom (vergleiche (1.134) und die Berechnung mit MAPLE im nächsten Abschnitt)

$$\begin{aligned} \det(K - \omega^2 M) &= \det \begin{pmatrix} k - \omega^2 m & -k & 0 \\ -k & 2k - \omega^2 M & -k \\ 0 & -k & k - \omega^2 m \end{pmatrix} \\ &= -\omega^6 m^2 M + 2k\omega^4(m^2 + Mm) - \omega^2 k^2(m + M) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (1.146)$$

mit den Nullstellen

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= 0 \\ \omega_2^2 &= \frac{k}{m} \\ \omega_3^2 &= \frac{k(2m + M)}{Mm}. \end{aligned} \quad (1.147)$$

Betrachten wir zunächst einmal die Lösung $\omega_1^2 = 0$. Entsprechend (1.136) ergibt sich der entsprechende Eigenvektor aus

$$K \vec{\eta}_{10} = \begin{pmatrix} k & -k & 0 \\ -k & 2k & -k \\ 0 & -k & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \\ A_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Man findet dass alle Vektoren

$$\vec{\eta}_{10} = \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \\ A_{31} \end{pmatrix} = \chi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1.148)$$

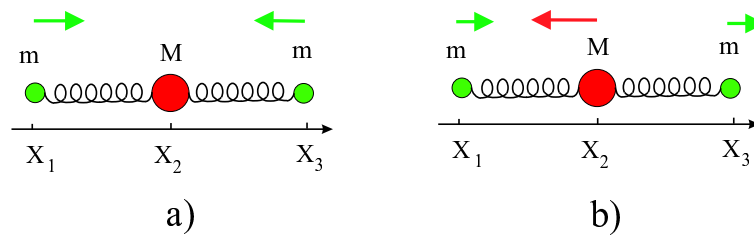


Abbildung 1.2: Normalschwingungen des eindimensionalen Wassermoleküls

mit beliebigem Wert für χ eine Lösung darstellen. Bei dieser Lösung werden also alle 3 Massenpunkte des Systems immer um den gleichen Betrag verschoben. Es handelt sich also um eine Verschiebung des Gesamtsystems, des gesamten Moleküls. In unserem Modell gibt es keine Kraft, die versucht das Molekül auf seinen Platz zu halten. Die Rückstellkraft ist also identisch Null und deshalb ist auch die Frequenz dieser Bewegung des Gesamtsystems gleich Null.

Für die zweite Frequenz einer Normalschwingung in ($\omega_2^2 = k/m$ in (1.147) ergibt sich der Lösungsvektor aus

$$\left(K - \frac{k}{m} M \right) \vec{\eta}_{20} = 0,$$

zu

$$\vec{\eta}_{20} = \begin{pmatrix} A_{12} \\ A_{22} \\ A_{32} \end{pmatrix} = \chi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (1.149)$$

Bei dieser Schwingung bleibt also das mittlere Atom der Masse M in Ruhe und die beiden äusseren Atome schwingen mit entgegengesetzter Richtung, so wie das in dem linken Teil der Abb. 1.2 dargestellt ist. Der Schwerpunkt des Systems bleibt dabei unverändert. Diese Normalschwingung ist also vollkommen entkoppelt von der Bewegung des Schwerpunktes, die wir bei der ersten Normalschwingung vorliegen hatten.

Für die dritte Normalschwingung mit der Frequenz ω_3 aus (1.147) ergibt sich der Lösungsvektor zu

$$\vec{\eta}_{30} = \begin{pmatrix} A_{13} \\ A_{23} \\ A_{33} \end{pmatrix} = \chi \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{2m}{M} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.150)$$

Die äusseren Atome werden in die gleiche Richtung ausgelenkt, das mittlere Atome in die Gegenrichtung (siehe rechter Teil der Abb. 1.2).

Zur weiteren Konkretisierung wird in den Rechnungen zum dem Beispiel mit Maple angenommen, dass

$$\frac{k}{m} = 1 \quad \text{und} \quad M = 2m. \quad (1.151)$$

Insbesondere wird für diesen Fall die explizite Lösung bestimmt für Starbedingungen, bei denen die drei Teilchen zur Zeit $t = 0$ ruhen und das Teilchen 1 um eine Längeneinheit aus der optimalen Lagen verschoben ist. Daraus ergeben sich entsprechend der Nomenklatur von (1.142) Koeffizienten $x_\alpha = (1/4, -1/2, 1/4)$ für $\alpha = 1, 2, 3$. Die Auslenkungen der 3 Teilchen als Funktion der Zeit ist dann in der Abbildung am Ende dieses gesamten Abschnittes dargestellt.

1.8.3 Die Lösung des Beispiels mit Maple

```
> with(linalg):
```

```
Warning, new definition for norm
```

```
Warning, new definition for trace
```

```
> assume(k>0);
```

```
> assume(m>0);
```

```
> assume(M>0);
```

Definition der Tensoren K und M (siehe (1.144) und (1.144))

```
> m1:=matrix([[k,-k,0],[-k,2*k,-k],[0,-k,k]]);
```

$$m1 := \begin{bmatrix} k^{\sim} & -k^{\sim} & 0 \\ -k^{\sim} & 2k^{\sim} & -k^{\sim} \\ 0 & -k^{\sim} & k^{\sim} \end{bmatrix}$$

```
> m2:=matrix([[m,0,0],[0,M,0],[0,0,m]]);
```

$$m2 := \begin{bmatrix} m^{\sim} & 0 & 0 \\ 0 & M^{\sim} & 0 \\ 0 & 0 & m^{\sim} \end{bmatrix}$$

```
> m3:=m1-x*m2;
```

$$m3 := m1 - x m2$$

Berechnung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms (1.146)

```
> det(m3);
```

$$-2k^{\sim 2} x m^{\sim} - x M^{\sim} k^{\sim 2} + 2k^{\sim} x^2 M^{\sim} m^{\sim} + 2x^2 m^{\sim 2} k^{\sim} - x^3 m^{\sim 2} M^{\sim}$$

```
> solve(det(m3)=0,x);
```

$$0, \frac{k^{\sim}}{m^{\sim}}, \frac{k^{\sim}(2m^{\sim} + M^{\sim})}{M^{\sim} m^{\sim}}$$

Bestimmung der Normalschwingungen nach (1.136)

```
> b:=vector([0,0,0]);
```

$$b := [0, 0, 0]$$

```
> n1:=linsolve(m1,b);
```

$$n1 := [t_1, -t_1, -t_1]$$

```
> n2:=linsolve(m1-k/m*m2,b);
```

$$n2 := [-t_1, 0, -t_1]$$

```
> n3:=linsolve(m1-k*(2*m+M)/(M*m)*m2,b);
```

$$n3 := \left[t_1, -2 \frac{-t_1 m^{\sim}}{M^{\sim}}, -t_1 \right]$$

```
> m4:=transpose(matrix([n1,n2,n3]));
```

$$m4 := \begin{bmatrix} -t_1 & -t_1 & -t_1 \\ -t_1 & 0 & -2 \frac{-t_1 m^{\sim}}{M^{\sim}} \\ -t_1 & -t_1 & -t_1 \end{bmatrix}$$

```
> start:=vector([1,0,0]);
```

$$start := [1, 0, 0]$$

> s1:=linsolve(m4,start);

$$s1 := \left[\frac{m\tilde{}}{-t_1(2m\tilde{}} + M\tilde{)}, -\frac{1}{2} \frac{1}{-t_1}, \frac{1}{2} \frac{M\tilde{}}{-t_1(2m\tilde{}} + M\tilde{)} \right]$$

Konkretisierung des Beispiels nach (1.151)

> m:=1;

$$m := 1$$

> M:=2;

$$M := 2$$

> k:=1;

$$k := 1$$

> m1:=matrix([[k,-k,0],[-k,2*k,-k],[0,-k,k]]);

$$m1 := \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

> m2:=matrix([[m,0,0],[0,M,0],[0,0,m]]);

$$m2 := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

> m3:=m1-x*m2;

$$m3 := m1 - x m2$$

> det(m3);

$$-4x + 6x^2 - 2x^3$$

> solve(det(m3)=0,x);

$$0, 1, 2$$

> b:=vector([0,0,0]);

$$b := [0, 0, 0]$$

> n1:=linsolve(m1,b);

$$n1 := [-t_1, -t_1, -t_1]$$

> n2:=linsolve(m1-k/m*m2,b);

$$n2 := [-t_1, 0, -t_1]$$

> n3:=linsolve(m1-k*(2*m+M)/(M*m)*m2,b);

$$n3 := [t_1, -t_1, -t_1]$$

> m4:=transpose(matrix([n1,n2,n3]));

$$m4 := \begin{bmatrix} -t_1 & -t_1 & -t_1 \\ -t_1 & 0 & -t_1 \\ -t_1 & -t_1 & -t_1 \end{bmatrix}$$

> start:=vector([1,0,0]);

$$start := [1, 0, 0]$$

> s1:=linsolve(m4,start);

$$s1 := \left[\frac{1}{4} \frac{1}{-t_1}, -\frac{1}{2} \frac{1}{-t_1}, \frac{1}{4} \frac{1}{-t_1} \right]$$

Darstellung der Auslenkungen der einzelnen Teilchen aus der Ruhelage als Funktion der Zeit

```
> plot(
> {s1[1]*n1[1]+s1[2]*n2[1]*cos(t)+s1[3]*n3[1]*cos(sqrt(2)*t),s1[1]*n1[2]
> ]+s1[2]*n2[2]*cos(t)+s1[3]*n3[2]*cos(sqrt(2)*t),s1[1]*n1[3]+s1[2]*n2[3]
> ]*cos(t)+s1[3]*n3[3]*cos(sqrt(2)*t)},t=0..8);
```

