

3 Kleine Schwingungen

Ausgearbeitet von Alexander König und Peter Trelle

3.1 Theorie der kleinen Schwingungen

a) Vorbemerkungen

Wir betrachten hier mechanische Systeme, die sich in einem stabilen Gleichgewicht befinden, d.h. deren Potential für den zu betrachtenden Zustand ein Minimum hat. Im Allgemeinen kann das System um diese Gleichgewichtslage Schwingungen ausführen. Die Bedingung für ein Gleichgewicht ist ein Extremwert des Potentials; man unterscheidet zwischen stabilem und instabilem Gleichgewicht. Das erstere liegt bei einem Minimum, das zweite bei einem Maximum des Potentials vor. Zum Beispiel.

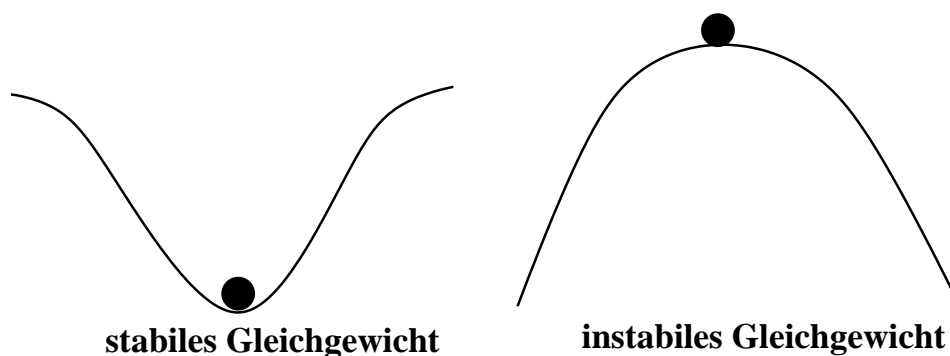


Abbildung 32:

Schwingungen sind nur um stabile Gleichgewichtslagen möglich, bei denen Auslenkungen zum Auftreten einer rücktreibenden Kraft führen, während bei einem labilen Gleichgewicht eine kleine Auslenkung eine unbeschränkte Bewegung zur Folge hat. Beispiele für solche Systeme sind Moleküle wie $C - O$ oder andere zweiatomige Verbindungen. Deren Potential hat etwa folgendes Aussehen:

Im Minimum kann für kleine Auslenkungen das Potential durch einen harmonischen Oszillator angenähert werden. Ein anderes Beispiel sind die Schwingungen in einem kristallinen Festkörper, z.B. $NaCl$.

Im $Na - Cl$ Modell können die Kräfte durch Federn zwischen den nächsten Nachbarionen simuliert werden. Wir wollen uns im Folgenden auf solche Auslenkungen aus der Ruhelage beschränken, bei denen

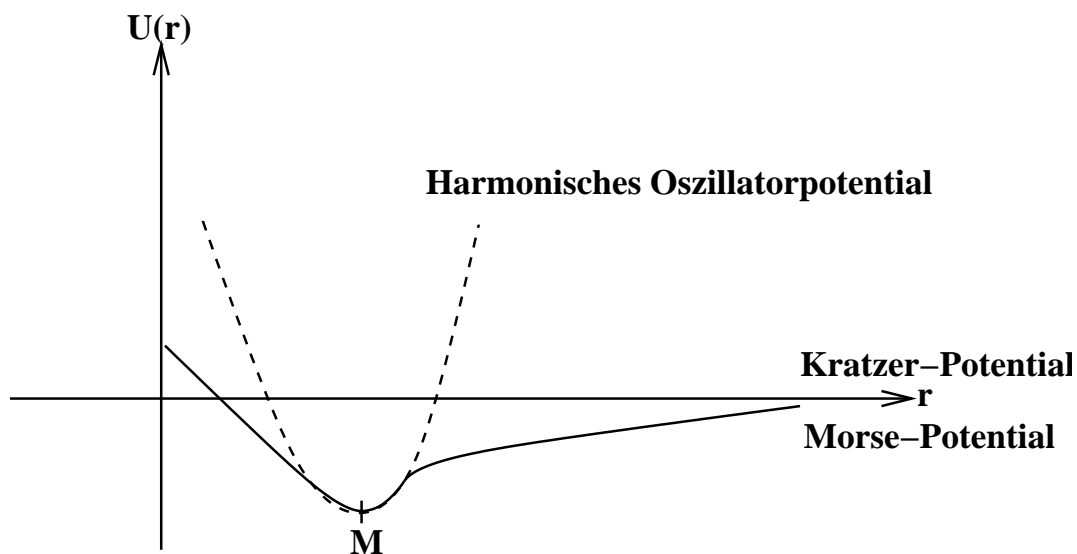


Abbildung 33:

das System mit genügender Genauigkeit durch harmonische Funktionen zweiten Grades beschrieben werden kann.

b) Allgemeine Lagrange-Gleichungen

Wir betrachten ein System von s Freiheitsgrade, welches ein Potential besitzt, das weder von der Zeit noch von den Geschwindigkeiten abhängt, sondern nur von den s verallgemeinerten Koordinaten $q_i (i = 1, \dots, s)$

$$U = U(q_1, q_2, \dots, q_s)$$

Zusätzlich sei vorausgesetzt, dass die kinetische Energie eine homogene Funktion zweiten Grades in den verallgemeinerten Geschwindigkeiten ist.

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s a_{k\ell}(q_1, \dots, q_s) \dot{q}_k \dot{q}_\ell$$

Dies ist für skleronome Zwangsbedingungen erfüllt, d.h. bei Zwangsbedingungen, bei denen die Transformation der Ortskoordinaten auf die generalisierten Koordinaten nicht explizit von der Zeit abhängt. Unter dieser Voraussetzung gilt:

$$r_i = r_i(q_1, \dots, q_s)$$

$$\dot{r}_i = \frac{\partial r_i}{\partial q_1} \dot{q}_1 + \frac{\partial r_i}{\partial q_2} \dot{q}_2 + \dots + \frac{\partial r_i}{\partial q_s} \dot{q}_s = \sum_{k=1}^s \frac{\partial r_i}{\partial q_k} \dot{q}_k$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s m_i \dot{r}_i \cdot \dot{r}_i$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s m_i \left(\sum_{\ell=1}^s \frac{\partial r_i}{\partial q_\ell} \dot{q}_\ell \right) \cdot \left(\sum_{k=1}^s \frac{\partial r_i}{\partial q_k} \dot{q}_k \right)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s m_i \sum_{\ell,k=1}^s \frac{\partial r_i}{\partial q_\ell} \frac{\partial r_i}{\partial q_k} \dot{q}_\ell \dot{q}_k$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\ell,k=1}^s \left(\sum_{i=1}^s m_i \frac{\partial r_i}{\partial q_\ell} \frac{\partial r_i}{\partial q_k} \right) \cdot \dot{q}_\ell \dot{q}_k$$

Hier ist also:

$$a_{k\ell} = \sum_{i=1}^s m_i \frac{\partial r_i}{\partial q_k} \frac{\partial r_i}{\partial q_\ell}$$

Aus dieser Definition sieht man sofort, dass

$$a_{k,\ell} = a_{\ell,k} \text{ für alle } k, \ell = 1, \dots, s$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s \left(\sum_{i=1}^s m_i \frac{\partial r_i}{\partial q_k} \frac{\partial r_i}{\partial q_\ell} \right) \dot{q}_k \dot{q}_\ell$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s a_{k\ell}(q_1, \dots, q_s) \dot{q}_k \dot{q}_\ell$$

Die zu betrachtende Lagrange-Funktion lautet daher:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s a_{k\ell}(q_1, \dots, q_s) \dot{q}_k \dot{q}_\ell - U(q_1, \dots, q_s)$$

Die Bewegungsgleichungen werden berechnet nach:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad k = 1, \dots, s$$

Um die Lagrange-Gleichung zu berechnen, muss gebildet werden:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \sum_{\ell=1}^s a_{i\ell}(q_1, \dots, q_s) \dot{q}_\ell \quad (67)$$

Da $a_{i\ell}(q_1, \dots, q_s)$ eine von den Koordinaten abhängige Funktion ist und diese wiederum von der Zeit abhängt, gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) &= \frac{d}{dt} \left(\sum_{\ell=1}^s a_{i\ell}(q_1, \dots, q_s) \dot{q}_\ell \right) \\ &= \sum_{\ell=1}^s a_{i\ell}(q_1, \dots, q_s) \ddot{q}_\ell + \sum_{\ell, m=1}^s \frac{\partial a_{i\ell}(q_1, \dots, q_s)}{\partial q_m} \dot{q}_m \dot{q}_\ell \end{aligned}$$

Aus demselben Grund (a_{ik} Funktion der Koordinaten):

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = -\frac{\partial U(q_1, \dots, q_s)}{\partial q_i} + \frac{1}{2} \sum_{k, \ell=1}^s \frac{\partial a_{k\ell}(q_1, \dots, q_s)}{\partial q_i} \dot{q}_k \dot{q}_\ell \quad (68)$$

Damit ergibt sich für die Lagrange-Gleichungen:

$$\begin{aligned} &\sum_{\ell=1}^s a_{i\ell}(q_1, \dots, q_s) \ddot{q}_\ell + \sum_{\ell, m=1}^s \frac{\partial a_{i\ell}(q_1, \dots, q_s)}{\partial q_m} \dot{q}_m \dot{q}_\ell \\ &= -\frac{\partial U(q_1, \dots, q_s)}{\partial q_i} + \frac{1}{2} \sum_{k, \ell=1}^s \frac{\partial a_{k\ell}(q_1, \dots, q_s)}{\partial q_i} \dot{q}_k \dot{q}_\ell \end{aligned}$$

Mit $i = 1, \dots, s$ haben wir nun s Bewegungsgleichungen, für ein System mit s Freiheitsgraden, d.h. s generalisierten Koordinaten, welche prinzipiell die Lösung des Systems liefern. Im Einzelfall wird aber die Berechnung der obigen Gleichungen erhebliche Schwierigkeiten bereiten.

c) Entwicklung um die Ruhelage

Um das Problem zu vereinfachen, betrachten wir hier nur Potentiale, die ein Minimum besitzen. Notwendige Bedingung für ein Minimum an der Stelle $q_i = q_i(0)$ ($i = 1, \dots, s$) ist:

$$\left. \frac{\partial U(q_1, \dots, q_s)}{\partial q_i} \right|_{q_i(0)} = 0 \text{ für alle } i = 1, \dots, s$$

Man kann die Potentialfunktion als s -dimensionale Hyperfläche ansehen. Eine Lösung der obigen Bewegungsgleichungen ist dann:

$$q_i(t) \equiv q_i(0) \quad i = 1, \dots, s$$

Wie man durch Einsetzen sieht, denn:

$$q_i(t) = q_i(0) = \text{const.} \quad \dot{q}_i \equiv 0, \ddot{q}_i \equiv 0, \frac{\partial U}{\partial q_i} = 0$$

Das bedeutet: das System befindet sich in Ruhe, wobei noch zu untersuchen bleibt, ob das Gleichgewicht stabil, labil oder indifferent ist.

$$\left[\frac{\partial U}{\partial q_i} \right]_{q_i(0)} = 0$$

kann auch Maximum, Sattelpunkt oder Konstanz der Potentialfunktion bedeuten.

Um dies zu untersuchen, betrachten wir kleine Abweichungen aus der Gleichgewichtslage. (Wenn wir Oszillationen erhalten, haben wir ein Minimum.) Wir entwickeln $q_i(t)$ um die Ruhelage $q_i(0)$:

$$q_i(t) = q_i(0) + \xi_i(t)$$

Und entwickeln die potentielle Energie bis zur 2. Ordnung in eine Taylorreihe um $q_i(0)$

$$\begin{aligned}
& U(q_1(0) + \xi_1(t), \dots, q_s(0) + \xi_s(t)) \\
= & U(q_1(0), \dots, q_s(0)) + \sum_{i=1}^s \frac{\partial U}{\partial q_i} \Big|_{q_i(0)} \cdot \xi_i \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s \frac{\partial^2 U}{\partial q_k \partial q_\ell} \Big|_{q_k=q_k(0) \& q_\ell=q_\ell(0)} \cdot \xi_k \xi_\ell \\
& + \text{Terme h\"oherer Ordnung}
\end{aligned}$$

$$U(q_1(0), \dots, q_s(0)) = V_0 = \text{const.}$$

$$\sum_{i=1}^s \frac{\partial U}{\partial q_i} \Big|_{q_i(0)} \cdot \xi_i = 0 \quad \text{nach Voraussetzung (Extremum)}$$

Die kinetische Energie ist schon eine Funktion 2. Ordnung in den Abweichungen:

$$\begin{aligned}
\dot{q}_i(t) &= \dot{\xi}_i(t) \quad i = 1, \dots, s \\
T &= \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s a_{k\ell}(q_1, \dots, q_s) \dot{q}_k \dot{q}_\ell = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s a_{k\ell}(q_1, \dots, q_s) \dot{\xi}_k \dot{\xi}_\ell
\end{aligned}$$

Entwicklung um $q_i(0)$:

$$\frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s a_{k,\ell}(q_1, \dots, q_s) \dot{\xi}_k \dot{\xi}_\ell = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s a_{k,\ell}(q_1(0), \dots, q_s(0)) \dot{\xi}_k \dot{\xi}_\ell$$

+ Terme h\"oherer Ordnung

d) Aufstellen der Bewegungsgleichungen

Wir haben nun also sowohl kinetische wie auch potentielle Energie durch Funktionen 2. Grades in den Auslenkungen angen\"ahert. Diese beschreiben f\"ur gen\"ugend kleine ξ unser System mit hinreichender Genauigkeit. Wir benutzen nun folgende Abk\"urzungen:

$$m_{k\ell} = a_{k\ell}(q_1(0), \dots, q_s(0)) \quad \text{bez. Massentensor}$$

$$k_{k\ell} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial q_k \partial q_\ell} \right|_{q_k=q_k(0), q_\ell=q_\ell(0)} \quad \text{bez. Kraftkonstantentensor}$$

Beide Ausdrücke sind symmetrisch in den Indizes k und ℓ aufgrund der Definition.

$$\left(a_{k\ell} = \sum_{i=1}^s \frac{\partial r_i}{\partial q_k} \frac{\partial r_i}{\partial q_\ell} m_i \right)$$

Damit lautet die Lagrange-Funktion:

$$L(\xi_k, \dot{\xi}_k) = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} \dot{\xi}_\ell \dot{\xi}_k - \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s k_{\ell k} \xi_\ell \xi_k$$

$$\left. \begin{matrix} m_{\ell k} \\ k_{\ell k} \end{matrix} \right\} = \text{Konstante}$$

In Matrixschreibweise:

$$L = \frac{1}{2} (\dot{\xi}_1, \dot{\xi}_2, \dots, \dot{\xi}_s) \cdot \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1s} \\ m_{21} & \dots & \dots & m_{2s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ m_{s1} & m_{s2} & & m_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \dot{\xi}_1 \\ \dot{\xi}_2 \\ \vdots \\ \dot{\xi}_s \end{pmatrix}$$

$$- \frac{1}{2} (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_s) \cdot \begin{pmatrix} k_{11} & k_{12} & \dots & k_{1s} \\ k_{21} & k_{22} & & k_{2s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ k_{s1} & k_{s2} & & k_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_s \end{pmatrix}$$

Und die Lagrange'schen Bewegungsgleichungen lauten:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}_i} \right) + \frac{\partial L}{\partial \xi_i} = 0 \quad i = 1, \dots, s$$

$$\sum_{k=1}^s m_{ik} \ddot{\xi}_k + k_{ik} \xi_k = 0 \quad i = 1, \dots, s$$

Als Matrix:

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1s} \\ m_{21} & m_{22} & \dots & m_{2s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ m_{s1} & m_{s2} & \dots & m_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \ddot{\xi}_1 \\ \ddot{\xi}_2 \\ \vdots \\ \ddot{\xi}_s \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k_{11} & \dots & k_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ k_{s1} & \dots & k_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_s \end{pmatrix} = 0$$

Falls m_{ik} und k_{ik} diagonal sind, d.h.

$$m_{ik} = m_i \delta_{ik} \text{ und } k_{ik} = \delta_{ik} \cdot k_i$$

haben wir hier s ungekoppelte Gleichungen für s harmonische Oszillatoren. Wenn aber (k_{ik}) und (m_{ik}) auch außerdiagonale Elemente enthalten, liegen s gekoppelte Gleichungen vom Charakter harmonischer Schwingungen vor. Wir machen den Ansatz:

$$\xi_j = A_j \cdot e^{i\omega t}$$

A_j ist im Allgemeinen komplex:

$$A_j = \alpha_j + i\beta_j$$

Real- und Imaginärteil sind dann die beiden Lösungen, die prinzipiell gleich sind und sich nur um einen Phasenwinkel unterscheiden.

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}\xi_k &= \alpha_k \cos \omega t - \beta_k \sin \omega t = a \cos(\omega t + \delta) \\ \operatorname{Im}\xi_k &= \alpha_k \sin \omega t + \beta_k \cos \omega t = a \cos(\omega t + \delta) \end{aligned}$$

Bei komplexen Koordinaten gehen die Ausdrücke für potentielle und kinetische Energie über in:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} \dot{\xi}_\ell^* \dot{\xi}_k \\ \xi_\ell^* &: \text{ das konjugiert Komplexe von } \xi_\ell \\ U &= \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s k_{\ell k} \xi_\ell^* \xi_k \end{aligned}$$

In Matrizen:

$$T = \frac{1}{2}(\dot{\xi}_1^*, \dots, \dot{\xi}_s^*) \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ m_{s1} & m_{s2} & \dots & m_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\xi}_1 \\ \vdots \\ \dot{\xi}_s \end{pmatrix}$$

$$U = \frac{1}{2}(\xi_1^*, \dots, \xi_s^*) \begin{pmatrix} k_{11} & \dots & k_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ k_{s1} & & k_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_s \end{pmatrix}$$

Die kinetische und potentielle Energie müssen so geschrieben werden, damit beide Ausdrücke reell bleiben. Sind \dot{a}_ℓ , \dot{b}_ℓ Real- bzw. Imaginärteil der generalisierten Geschwindigkeit $\dot{\xi}_\ell$:

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_\ell &= \dot{a}_\ell + i\dot{b}_\ell & \ell = 1, \dots, s \\ \dot{\xi}_\ell^* &= \dot{a}_\ell - i\dot{b}_\ell & \ell = 1, \dots, s \end{aligned}$$

So gilt:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} \dot{\xi}_\ell^* \dot{\xi}_k = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} (\dot{a}_\ell - i\dot{b}_\ell) \cdot (\dot{a}_k + i\dot{b}_k) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s \left[m_{\ell k} \dot{a}_\ell \dot{a}_k + m_{\ell k} \dot{b}_\ell \dot{b}_k + i \cdot m_{\ell k} (\dot{a}_\ell \dot{b}_k - \dot{a}_k \dot{b}_\ell) \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} \dot{a}_\ell \dot{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} \dot{b}_\ell \dot{b}_k + i \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} (\dot{a}_\ell \dot{b}_k - \dot{a}_k \dot{b}_\ell) \end{aligned}$$

Wegen der Symmetrie von $(m_{\ell k})$ gilt:

$$i \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} (\dot{a}_\ell \dot{b}_k - \dot{a}_k \dot{b}_\ell) = 0$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} \dot{a}_\ell \dot{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s m_{\ell k} \dot{b}_\ell \dot{b}_k$$

Mit derselben Rechnung für potentielle Energie ergibt sich:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s k_{\ell k} a_{\ell} a_k + \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s k_{\ell k} b_{\ell} b_k$$

Damit haben wir gezeigt, dass mit der obigen Schreibweise auch im Fall von komplexen Lösungsansätzen ξ_{ℓ} , T und U reell sind.

- e) Lösen der Bewegungsgleichungen
 Durch Einsetzen des Ansatzes

$$\xi_j = A_j \cdot e^{i\omega t}$$

in die Bewegungsgleichungen

$$\sum_{k=1}^s m_{ik} \ddot{\xi}_k + k_{ik} \xi_k = 0 \quad i = 1, \dots, s$$

ergibt sich:

$$e^{i\omega t} \sum_{j=1}^s \{-\omega^2 m_{ij} + k_{ij}\} A_j = 0 \quad i = 1, \dots, s$$

Wir haben also ein System von s linearen homogenen algebraischen Gleichungen erhalten, das als Matrix folgendermaßen zu schreiben ist:

$$\otimes e^{i\omega t} \begin{pmatrix} k_{11} - \omega^2 m_{11} & k_{12} - \omega^2 m_{12} & \dots & k_{1s} - \omega^2 m_{1s} \\ k_{21} - \omega^2 m_{21} & k_{22} - \omega^2 m_{22} & \dots & k_{2s} - \omega^2 m_{2s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ k_{s1} - \omega^2 m_{s1} & k_{s2} - \omega^2 m_{s2} & \dots & k_{ss} - \omega^2 m_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \vdots \\ A_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dies ist ein Eigenwertproblem im verallgemeinerten Sinne. Gesucht ist ein Vektor $A = (A_1, \dots, A_s)$, für den gilt:

$$\begin{pmatrix} k_{11} & k_{12} & \dots & k_{1s} \\ k_{21} & k_{22} & \dots & k_{2s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ k_{s1} & k_{s2} & \dots & k_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_s \end{pmatrix} = \omega^2 \cdot \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1s} \\ m_{21} & m_{22} & \dots & m_{2s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ m_{s1} & m_{s2} & \dots & m_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_s \end{pmatrix}$$

Für den Fall, dass $(m_{ik}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ - also die Einheitsmatrix ist - liegt ein Eigenwertproblem vor, wie es aus der Vorlesung "Lineare Algebra" bekannt ist. Unser Gleichungssystem \otimes ist genau dann eindeutig lösbar, d.h. es hat eine und nur eine Lösung, wenn die Koeffizientenmatrix $(k_{ij} - \omega^2 m_{ij})$ maximalen Rang, d.h. in unserem Fall den Rang s hat. Ein homogenes System hat aber immer die triviale Lösung $(A_1, \dots, A_s) = (0, \dots, 0)$, bei maximalem Rang also nur die triviale Lösung.

Um Gleichungssysteme mit nicht trivialen Lösungen zu erhalten, suchen wir Konstanten ω , $[(k_{ij})$ und (m_{ij}) sind fest] für die die Koeffizientenmatrix nicht maximalen Rang hat. Das ist genau dann der Fall, wenn ihre Determinante Null wird. Wir erhalten somit:

$$\begin{vmatrix} k_{11} - \omega^2 m_{11} & k_{12} - \omega^2 m_{12} & \dots & k_{1s} - \omega^2 m_{1s} \\ k_{21} - \omega^2 m_{21} & k_{22} - \omega^2 m_{22} & \dots & k_{2s} - \omega^2 m_{2s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ k_{s1} - \omega^2 m_{s1} & k_{s2} - \omega^2 m_{s2} & \dots & k_{ss} - \omega^2 m_{ss} \end{vmatrix} = 0$$

Dies ist eine algebraische Gleichung vom Grade s für ω^2 . Sie hat s reelle Lösungen ω_α , nämlich die Eigenfrequenzen des Systems, wenn die potentielle Energie an der Stelle $q_i = q_i(0)$ ($i = 1, \dots, s$) nicht nur ein Extremum, sondern ein Minimum besitzt. Dies sieht man so ein: Wir multiplizieren das Gleichungssystem mit A_i^* und summieren über i :

$$\sum_{i,j=1}^s (-\omega^2 m_{ij} + k_{ij}) A_i^* A_j = 0$$

$$\omega^2 = \frac{\sum_{i,j=1}^s k_{ij} A_i^* A_j}{\sum_{i,j=1}^s m_{ij} A_i^* A_j}$$

Nach derselben Rechnung wie bei der Einführung der komplexen Koordinaten in kinetische und potentielle Energie (Abschnitt d)) sieht man, dass sowohl Zähler als auch Nenner reell sind. Die kinetische Energie ist aber eine positiv definierte Größe, daher muss der Nenner notwendigerweise positiv sein, da $\omega^2 \sum_{i,j=1}^s m_{ij} A_i^* A_j$ gerade zwei Mal die kinetische Energie ist. Falls wir also nur positive Frequenzen ω^2 fordern, sind alle Eigenfrequenzen reell und wir haben ein stabiles Gleichgewicht. Damit muss der Zähler positiv sein. Da dies für alle $A_i^{(k)}$ (Lösung zum Eigenwert ω_k) gelten muss, folgt:

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_j} \right|_{q_k = q_k(0)} = k_{ij} > 0$$

Also hat U an der Stelle $q_i = q_i(0)$ ein echtes Minimum. Andererseits folgt umgekehrt aus einem echten Minimum der potentiellen Energie, dass ω^2 positiv ist und somit die Frequenzen ω reell sind. Die Teilchen des mechanischen Systems führen also Schwingungen um die Ruhelage aus. Aus der Bedingung $\det(k_{j\ell} - \omega^2 m_{j\ell}) = 0$ erhalten wir die Lösungen (Eigenwerte) ω_α^2 . Wir wollen annehmen, dass alle s Werte verschieden sind. Partikuläre Lösungen des Gleichungssystems erhalten wir, indem wir die verschiedenen Frequenzen ω_α^2 einsetzen.

$$\sum_{j=1}^s \{k_{ij} - \omega_\alpha^2 m_{ij}\} A_j^\alpha = 0 \quad i = 1, \dots, s$$

Um Werte A_j^α zu finden, die die s Gleichungen erfüllen, entwickeln wir die Determinante der Koeffizientenmatrix nach der n -ten Zeile. ($a \leq n \leq s$ ist beliebig, aber fest zu wählen.) Die Unterdeterminante (Minor), die durch Streichen der n -ten Zeile und der j -ten Spalte der Determinante entsteht, in die für $\omega = \omega_\alpha$ eingesetzt wurde, sei mit Δ_{jn}^α bezeichnet, die bei der Entwicklung auftretenden wechselnden Vorzeichen $((-1)^{j+n})$ seien im jeweiligen Δ enthalten. Weil wir die n -te Zeile bei der Entwicklung fest wählen, kann der Index n weggelassen werden, und wir definieren:

$$\begin{aligned}
\Delta_{jn}^\alpha &\equiv \Delta_{j\alpha} \\
0 &= \begin{pmatrix} k_{11} - \omega_\alpha^2 m_{11} & \dots & k_{1s} - \omega_\alpha^2 m_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ k_{n1} - \omega_\alpha^2 m_{n1} & \dots & k_{ns} - \omega_\alpha^2 m_{ns} \\ \vdots & & \vdots \\ k_{s1} - \omega_\alpha^2 m_{s1} & \dots & k_{ss} - \omega_\alpha^2 m_{ss} \end{pmatrix} \\
&= (k_{n1} - \omega_\alpha^2 m_{n1})\Delta_{1\alpha} + (k_{n2} - \omega_\alpha^2 m_{n2})\Delta_{2\alpha} + \dots + (k_{ns} - \omega_\alpha^2 m_{ns})\Delta_{s\alpha} \\
&\curvearrowright \sum_{i=1}^s (k_{ni} - \omega_\alpha^2 m_{ni})\Delta_{i\alpha} = 0
\end{aligned}$$

Die $\Delta_{i\alpha}$ ($i = 1, \dots, s$) erfüllen also die n -te Gleichung unseres Gleichungssystems; sie erfüllen aber auch alle übrigen Gleichungen, denn: Für alle $i \neq n$ lässt sich

$$\sum_{\ell=1}^s (k_{i\ell} - \omega_\alpha^2 m_{i\ell})\Delta_{\ell\alpha} = (k_{i1} - \omega_\alpha^2 m_{i1})\Delta_{1\alpha} + \dots + (k_{is} - \omega_\alpha^2 m_{is})\Delta_{s\alpha}$$

als Determinante schreiben, die unserer Koeffizientendeterminante gleicht, bis auf den Unterschied, dass die n -te Zeile durch die i -te Zeile ersetzt wurde. Das bedeutet, sie hat zwei gleiche Zeilen und ist somit gleich Null. Wir erhalten so für jede Lösung ω_α^2 der Determinantengleichung einen Satz A_j^α mit:

$$A_j^\alpha = \Delta_{j\alpha} \quad j = 1, \dots, s$$

Eine partikuläre Lösung der Differentialgleichung hat somit die Form:

$$\xi_j = \Delta_{j\alpha} C_\alpha e^{i\omega_\alpha t} \quad j = 1, \dots, s$$

wobei C_α eine beliebige komplexe Konstante ist. Denn wenn ξ Eigenvektor ist, ist auch jeder zu ihm proportionale Vektor Eigenvektor mit demselben Eigenwert. Abkürzung:

$$\Theta_\alpha(t) = \operatorname{Re}\{C_\alpha e^{i\omega_\alpha t}\}$$

Die allgemeine Lösung ist dann eine Linearkombination aller partikulären Lösungen.

$$\xi_j(t) = \sum_{\alpha=1}^s \Delta_{j\alpha} \Theta_\alpha(t) \quad j = 1, \dots, s$$

Sie ist eine Überlagerung von s gewöhnlichen periodischen Oszillationen mit beliebigen Amplituden und Phase, aber wohl bestimmten Frequenzen.

f) Normalkoordinaten

Die Frage liegt nahe, ob wir nicht verallgemeinerte Koordinaten so wählen können, dass jede von ihnen nur eine einfache Schwingung ausführt. Die Antwort ist ja; die $\Theta_\alpha(t)$ sind diese Schwingungen bzw. Koordinaten; wir nennen sie Normalkoordinaten und die ω_α sind die Normalschwingungen. Aufgrund der Definition erfüllen die $\Theta_\alpha(t)$ die folgenden Bewegungsgleichungen:

$$\ddot{\Theta}_\alpha + \omega_\alpha^2 \Theta_\alpha = 0 \quad \alpha = 1, \dots, s$$

Die Normalkoordinaten sind vollkommen unabhängig voneinander (sie sind entkoppelt). Die Θ folgen aus der Definition durch Umkehrung der Transformation:

$$\xi_j(t) = \sum_{\alpha=1}^s \Delta_{j\alpha} \Theta_\alpha(t) \quad j = 1, \dots, s$$

In Matrizen:

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta_{11} & \dots & \Delta_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ \Delta_{s1} & & \Delta_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Theta_1 \\ \vdots \\ \Theta_s \end{pmatrix}$$

Wenn $(\Delta^{-1})_{j\alpha}$ die Elemente der zu $(\Delta_{j\alpha})$ inversen Matrix sind, d.h.

$$\begin{pmatrix} \Delta_{11} & \dots & \Delta_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ \Delta_{s1} & \dots & \Delta_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\Delta^{-1})_{11} & \dots & (\Delta^{-1})_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ (\Delta^{-1})_{s1} & \dots & (\Delta^{-1})_{ss} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ 0 & & \ddots \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

oder

$$\sum_{\ell=1}^s \Delta_{k\ell} (\Delta^{-1})_{\ell i} = \delta_{ik} \quad k, i = 1, \dots, s$$

gilt:

$$\begin{pmatrix} (\Delta^{-1})_{11} & \dots & (\Delta^{-1})_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ (\Delta^{-1})_{s1} & \dots & (\Delta^{-1})_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Theta_1 \\ \vdots \\ \Theta_s \end{pmatrix}$$

oder

$$\Theta_\alpha(t) = \sum_{k=1}^s (\Delta^{-1})_{\alpha k} \xi_k \quad \alpha = 1, \dots, s$$

Die angegebenen Bewegungsgleichungen kann man aus folgender Lagrange-Funktion herleiten:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^s m_\alpha [\dot{\Theta}_\alpha^* \dot{\Theta}_\alpha - \omega_\alpha^2 \Theta_\alpha^* \Theta_\alpha] \quad (69)$$

Andererseits beschreibt unsere vorherige Lagrange-Funktion dasselbe System:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^s \left\{ \underbrace{\dot{\xi}_\ell^* m_{\ell k} \dot{\xi}_k}_I - \underbrace{\xi_\ell^* k_{\ell k} \xi_k}_II \right\} \quad (70)$$

Beide Funktionen als Matrix:

$$(69) \quad L = \frac{1}{2}(\dot{\Theta}_1^* \dots \dot{\Theta}_s^*) \begin{pmatrix} m_1 & & 0 \\ & m_2 & \\ 0 & & m_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\Theta}_1 \\ \vdots \\ \dot{\Theta}_s \end{pmatrix} \\ - \frac{1}{2}(\Theta_1^* \omega_1 \dots \Theta_s^* \omega_s) \begin{pmatrix} m_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & m_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Theta_1 \omega_1 \\ \Theta_2 \omega_2 \\ \vdots \\ \Theta_s \omega_s \end{pmatrix}$$

$$(70) \quad L = \frac{1}{2}(\dot{\xi}_1^* \dots \dot{\xi}_s^*) \begin{pmatrix} m_{11} & \dots & m_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ m_{s1} & \dots & m_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\xi}_1 \\ \vdots \\ \dot{\xi}_s \end{pmatrix} \\ - \frac{1}{2}(\xi_1^* \dots \xi_s^*) \begin{pmatrix} k_{11} & \dots & k_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ k_{s1} & \dots & k_{ss} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_s \end{pmatrix}$$

Die Frage ist nun, wie man die komplizierte Funktion (70) in die einfache Form (69) bringen, d.h. auf Hauptachsen transformieren kann. Der Zusammenhang zwischen ξ und Θ lautet:

$$\xi_j = \sum_{\alpha=1}^s \Delta_{j\alpha} \Theta_\alpha; \quad \xi_j^* = \sum_{\alpha=1}^s \Theta_\alpha^* \Delta_{j\alpha}^*$$

Da wir von links mit der transponierten Matrix von ξ^* bzw. $\dot{\xi}^*$ multiplizieren müssen, definieren wir:

$$\Delta_{\alpha j}^+ \equiv \Delta_{j\alpha}^*$$

die zu $(\Delta_{j\alpha})$ adjungierte (hermitesche) Matrix. (Dies ist die Verallgemeinerung der Transposition für komplexe Matrizen)

$$\xi_j^* = \sum_{\alpha=1}^s \Theta_\alpha^* \Delta_{\alpha j}^+$$

Durch Einsetzen in (70) erhalten wir:

$$\begin{aligned}
I &= \sum_{\alpha, \alpha'=1}^s \dot{\Theta}_\alpha^* \sum_{k, \ell=1}^s \Delta_{\alpha\ell}^+ m_{\ell k} \Delta_{k\alpha'} \dot{\Theta}_{\alpha'} \\
II &= \sum_{\alpha, \alpha'=1}^s \Theta_\alpha^* \sum_{k, \ell=1}^s \Delta_{\alpha\ell}^+ k_{\ell k} \Delta_{k\alpha'} \Theta_{\alpha'}
\end{aligned}$$

Zu beweisen ist nun, dass die außerdiagonalen Matrixelemente $\alpha \neq \alpha'$ verschwinden:

$$\begin{aligned}
I &\neq 0 && \text{nur für } \alpha = \alpha' \\
II &\neq 0 && \text{nur für } \alpha = \alpha'
\end{aligned}$$

Das heißt:

$$\begin{aligned}
\sum_{k, \ell=1}^s \Delta_{\alpha\ell}^+ m_{\ell k} \Delta_{k\alpha'} &= m_\alpha \delta_{\alpha\alpha'} && (71) \\
\sum_{k, \ell=1}^s \Delta_{\alpha\ell}^+ k_{\ell k} \Delta_{k\alpha'} &= m_\alpha \omega_\alpha^2 \delta_{\alpha\alpha'}
\end{aligned}$$

Wenn dies gilt, ist (70) durch (Δ_{ij}) auf die Form (69) transformiert.

Beweis:

In Abschnitt e) wurde durch Entwickeln der Determinante gezeigt:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^s \{-\omega_\alpha^2 m_{ij} + k_{ij}\} \Delta_{j\alpha} &= 0 \quad i = 1, \dots, s \\
\sum_{i=1}^s \Delta_{\alpha'i}^+ \sum_{j=1}^s \{-\omega_\alpha^2 m_{ij} + k_{ij}\} \Delta_{j\alpha} &= 0 \\
\sum_{i, j=1}^s \Delta_{\alpha'i}^+ \{-\omega_\alpha^2 m_{ij} + k_{ij}\} \Delta_{j\alpha} &= 0 \\
\sum_{i, j=1}^s \{\Delta_{\alpha'i}^+ (-\omega_\alpha^2 m_{ij}) \Delta_{j\alpha} + \Delta_{\alpha'i}^+ k_{ij} \Delta_{j\alpha}\} &= 0 && (72)
\end{aligned}$$

Ebenso gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^s \{-\omega_{\alpha'}^2 m_{ij} + k_{ij}\} \Delta_{j\alpha'} &= \\ \sum_{i=1}^s \Delta_{\alpha'i}^+ \{-\omega_{\alpha'}^2 m_{ji} + k_{ji}\} &= 0 \end{aligned}$$

(Multiplikationssatz für transponierte Matrizen; und $\omega_{\alpha}^2 m_{ij}$, k_{ij} sind reell.)

$$\sum_{i,j=1}^s \Delta_{\alpha'i}^+ \{-\omega_{\alpha'}^2 m_{ji} + k_{ji}\} \Delta_{j\alpha} = 0$$

Wegen der Symmetrie von m_{ij} und k_{ij} gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^s \Delta_{\alpha'i}^+ \{-\omega_{\alpha'}^2 m_{ij} + k_{ij}\} \Delta_{j\alpha} &= 0 \\ \sum_{i,j=1}^s \{ \Delta_{\alpha'i}^+ (-\omega_{\alpha'}^2 m_{ij}) \Delta_{j\alpha} + \Delta_{\alpha'i}^+ k_{ij} \Delta_{j\alpha} \} &= 0 \quad (73) \end{aligned}$$

Wir bilden nun die Differenz (73) - (72):

$$(\omega_{\alpha}^2 - \omega_{\alpha'}^2) \sum_{i,j=1}^s \Delta_{\alpha'i}^+ m_{ij} \Delta_{j\alpha} = 0$$

Für $\alpha \neq \alpha'$ (wir haben angenommen $\alpha \neq \alpha' \curvearrowright \omega_{\alpha} \neq \omega_{\alpha'}$) gilt:

$$\sum_{i,j=1}^s \Delta_{\alpha'i}^+ m_{ij} \Delta_{j\alpha} = 0$$

Wir definieren nun:

$$\sum_{i,j=1}^s \Delta_{\alpha i}^+ m_{ij} \Delta_{j\alpha} = m_{\alpha}$$

Somit haben wir den ersten Teil der Behauptung:

$$\sum_{i,j=1}^s \Delta_{\alpha' i}^+ m_{ij} \Delta_{j\alpha} = m_{\alpha} \delta_{\alpha\alpha'}$$

Um den zweiten Teil zu beweisen, bilden wir die Summe (73) + (72):

$$\begin{aligned} (\omega_{\alpha}^2 + \omega_{\alpha'}^2) \underbrace{\sum_{i,j=1}^s \{\Delta_{\alpha' i}^+ m_{ij} \Delta_{\alpha j}\}}_{m_{\alpha} \delta_{\alpha\alpha'}} - 2 \sum_{i,j=1}^s \{\Delta_{\alpha' i}^+ k_{ij} \Delta_{\alpha j}\} &= 0 \\ 2\omega_{\alpha}^2 m_{\alpha} \delta_{\alpha\alpha'} &= 2 \sum_{i,j=1}^s \{\Delta_{\alpha' i}^+ k_{ij} \Delta_{\alpha j}\} \end{aligned}$$

Damit ist der zweite Teil der Behauptung gezeigt:

$$\sum_{i,j=1}^s \Delta_{\alpha' i}^+ k_{ij} \Delta_{j\alpha} = \omega_{\alpha}^2 m_{\alpha} \delta_{\alpha\alpha'}$$

Wir können also durch die Matrix (Δ_{ij}) , die wir durch Entwickeln der Koeffizientendeterminante erhalten, prinzipiell jede Lagrange-Funktion der Form (70) auf die einfache Form (69) transformieren, die als Lösung ungekoppelte gewöhnliche periodische Oszillationen hat. Dies kann man dann ohne Schwierigkeiten in die alten Koordinaten

$$\xi_j(t) = \sum_{\alpha=1}^s \Delta_{j\alpha} \Theta_{\alpha}(t) \quad j = 1, \dots, s$$

zurücktransformieren.

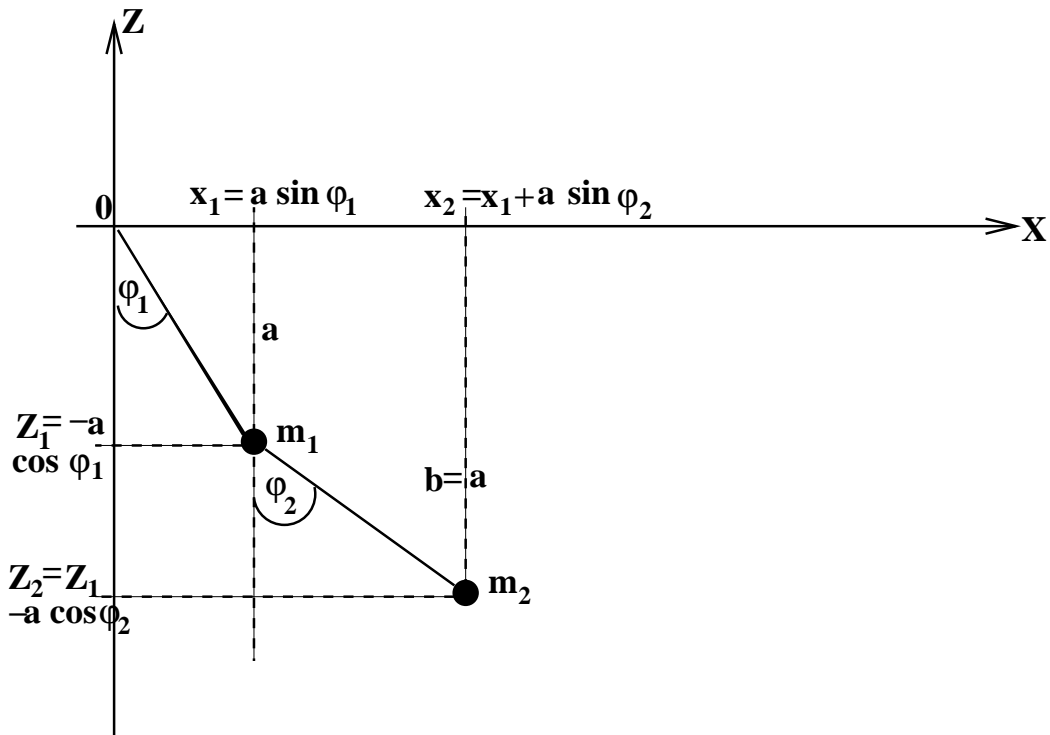


Abbildung 34:

3.2 Das Doppelpendel

$$U = C - m_1 g a \cos \phi_1 - m_2 g a (\cos \phi_1 + \cos \phi_2)$$

Man setze $M = m_1 + m_2$:

$$\Rightarrow U = C - M g a \cos \phi_1 - m_2 g a \cos \phi_2$$

$$\begin{array}{ll} z_1 = -a \cos \phi_1 & z_2 = -a \cos \phi_1 - a \cos \phi_2 \\ x_1 = a \sin \phi_1 & \dot{z}_2 = a \dot{\phi}_1 \sin \phi_1 + a \dot{\phi}_2 \sin \phi_2 \\ \dot{z}_1 = a \dot{\phi}_1 \sin \phi_1 & x_2 = a \sin \phi_1 + a \sin \phi_2 \\ \dot{x}_1 = a \dot{\phi}_1 \cos \phi_1 & \dot{x}_2 = a \dot{\phi}_1 \cos \phi_1 + a \dot{\phi}_2 \cos \phi_2 \end{array}$$

Für die kinetische Energie T gilt:

$$\begin{aligned}
T &= \frac{1}{2}m_1(\dot{x}_1^2 + \dot{z}_1^2) + \frac{1}{2}m_2(\dot{x}_2^2 + \dot{z}_2^2) \\
\Rightarrow T &= \frac{1}{2}m_1a^2\dot{\phi}_1^2 + \frac{1}{2}m_2a^2(\dot{\phi}_1^2 + \dot{\phi}_2^2) \\
&\quad + m_2a^2\dot{\phi}_1\dot{\phi}_2 \underbrace{\{\cos\phi_1 \cos\phi_2 + \sin\phi_1 \sin\phi_2\}}_{\cos(\phi_1 - \phi_2)}
\end{aligned}$$

Die Gleichgewichtslagen befinden sich an den Stellen $\frac{\partial U}{\partial q_\ell} = 0$, also:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U}{\partial \phi_1} &= M \cdot g \cdot a \sin \phi_1 = 0 \\
\frac{\partial U}{\partial \phi_2} &= m_2ga \sin \phi_2 = 0 \\
\Rightarrow \phi_1 &= \phi_2 = 0 \text{ stabiles Gleichgewicht} \quad (74)
\end{aligned}$$

Bei anderen Lösungen

$$\phi_1 = 0, \phi_2 = \pi \mid \phi_1 = \pi, \phi_2 = 0 \mid \phi_1 = \pi, \phi_2 = \pi$$

sind Sattelpunkte oder instabile Gleichgewichtslagen. Wir entwickeln die Lagrange-Funktion $L = T - U$, um das stabile Gleichgewicht. Die Entwicklung von $\cos \phi$ lautet:

$$\cos \phi = 1 - \frac{1}{2!}\phi^2 + \frac{1}{4!}\phi^4 \pm \dots$$

Da wir uns auf kleine Schwingungen beschränken, berücksichtigen wir nur Glieder bei maximal 2. Ordnung in ϕ .

$$\begin{aligned}
\Rightarrow T &= \frac{1}{2}Ma^2\dot{\phi}_1^2 + \frac{1}{2}m_2a^2\dot{\phi}_2^2 + m_2a^2\dot{\phi}_1\dot{\phi}_2 \\
U &= C - Mga\left(1 - \frac{1}{2}\phi_1^2\right) - m_2ga\left(1 - \frac{1}{2}\phi_2^2\right)
\end{aligned}$$

Da sich die Konstante C so wählen lässt, dass $U(o) = 0$ ist, folgt für U :

$$\begin{aligned}
U &= \frac{1}{2}Mga\phi_1^2 + \frac{1}{2}m_2ga\phi_2^2 \\
L &= \frac{1}{2}Ma^2\dot{\phi}_1^2 + \frac{1}{2}m_2a^2\dot{\phi}_2^2 + m_2a^2\dot{\phi}_1\dot{\phi}_2 - \frac{1}{2}Mga\phi_1^2 - \frac{1}{2}m_2ga\phi_2^2
\end{aligned}$$

Wir bringen unsere Lagrange-Gleichung auf die allgemeine Form:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{k\ell} \{ \dot{\xi}_\ell^* m_{\ell k} \dot{\xi}_k - \xi_\ell^* k_{\ell k} \xi_k \} \left| \begin{array}{l} \xi_k = \sum_\alpha \Delta_{k\alpha} \Theta_\alpha \\ \Theta_\alpha = C_\alpha e^{i\omega_\alpha t} \end{array} \right.$$

Wir erhalten:

$$m_{\ell k} = a^2 \begin{pmatrix} M & m_2 \\ m_2 & m_2 \end{pmatrix} \quad k_{\ell k} = ga \begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & m_2 \end{pmatrix}$$

Wir erhalten für die Determinante

$$\begin{aligned} \det(-\omega^2 m_{\ell k} + k_{\ell k}) &= 0 \\ \det \begin{pmatrix} -\omega^2 aM + gM & -\omega^2 a m_2 \\ -\omega^2 a m_2 & -\omega^2 a m_2 + g m_2 \end{pmatrix} &= 0 \end{aligned}$$

Daraus erhalten wir das charakterische Polynom

$$\begin{aligned} (\omega^2 aM - gM)(\omega^2 a m_2 - g m_2) - \omega^4 a^2 m_2^2 &= 0 \\ \omega^4 a^2 M m_2 - g a m_2 M \omega^2 - g a m_2 M \omega^2 + g^2 M m_2 - \omega^4 a^2 m_2^2 &= 0 \\ a^2 m_1 m_2 \omega^4 - 2M \omega^2 a m_2 g + M m_2 g^2 &= 0 \\ \omega_{1/2}^2 &= \frac{Mg}{m_1 a} \left[1 \pm \sqrt{\frac{m_2}{M}} \right] \end{aligned}$$

Die allgemeinen Lösungen sind Linearkombinationen der Normalkoordinaten

$$\begin{aligned} \Theta_\alpha &= C_\alpha e^{i\omega_\alpha t} \\ \xi_j &= \sum_\alpha \Delta_{j\alpha} \Theta_\alpha \\ \phi_1 &= \Delta_{11} \Theta_1 + \Delta_{12} \Theta_2 \\ \phi_2 &= \Delta_{21} \Theta_1 + \Delta_{22} \Theta_2 \end{aligned}$$

mit

$$\Delta_{j\alpha} = (-1)^{j+n} \times \det \left(\begin{array}{c|c} j & \\ \hline & n \end{array} \right)$$

(entstanden durch Streichung der n -ten Zeile und der j -ten Spalte)

Außerdem setzen wir $\omega^2 = \omega_\alpha^2$

$$\det \begin{pmatrix} -\omega^2 a(m_1 + m_2) + gM & -\omega^2 a m_2 \\ -\omega^2 a m_2 & -\omega^2 a m_2 + g m_2 \end{pmatrix} = 0$$

Subtraktion der 2. Zeile von der ersten

$$\omega_{1/2}^2 = \frac{Mg}{m_1 a} \left[1 \pm \sqrt{\frac{m_2}{M}} \right]$$

Damit erhalten wir folgende Matrix:

$$(\Delta_{j\alpha}) = \begin{pmatrix} -gm_2 & -gm_2 \\ g\sqrt{Mm_2} & -g\sqrt{Mm_2} \end{pmatrix} = -g\sqrt{m_2} \begin{pmatrix} \sqrt{m_2} & \sqrt{m_2} \\ -\sqrt{M} & \sqrt{M} \end{pmatrix}$$

Die allgemeinen Lösungen lauten daher

$$\begin{aligned} \phi_1 &= -gm_2(\Theta_1 + \Theta_2) \\ \phi_2 &= +g\sqrt{m_2 M}(\Theta_1 - \Theta_2) \end{aligned}$$

Durch Umkehrung der Transformation erhält man

$$\begin{aligned} \Theta_1 &= C_1 [\sqrt{M} \phi_1 - \sqrt{m_2} \phi_2] \\ \Theta_2 &= C_2 [\sqrt{M} \phi_1 + \sqrt{m_2} \phi_2] \end{aligned}$$

Wenn wir unsere Lösungen ϕ_1 und ϕ_2 in die Lagrangefunktion einsetzen, sehen wir, dass sie tatsächlich diagonal ist. D.h. es gibt keine Kreuzterme $\dot{\Theta}_1 \dot{\Theta}_2$ bzw. $\Theta_1 \Theta_2$. Außerdem kann man leicht zeigen, dass $\Delta_{j\alpha}$ den Massentensor auf Diagonalform bringt.

$$\begin{aligned} \Delta^+ M \Delta &= g^2 m_2 \begin{pmatrix} \sqrt{m_2} & -\sqrt{M} \\ \sqrt{m_2} & \sqrt{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M & m_2 \\ m_2 & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{m_2} & \sqrt{m_2} \\ -\sqrt{M} & \sqrt{M} \end{pmatrix} \\ &= \frac{2g^2 m_2 a^2}{2} \begin{pmatrix} Mm_2 - m_2 \sqrt{m_2 M} & 0 \\ 0 & Mm_2 + m_2 \sqrt{m_2 M} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Analog dazu:

$$\Delta + k\Delta = g^2 m_2 \begin{pmatrix} m_2 M a g & 0 \\ 0 & m_2 M a g \end{pmatrix}$$

Somit lautet die Determinante:

$$\det \begin{pmatrix} -a\omega^2(Mm_2 - m_2\sqrt{m_2M}) + m_2 M a g & 0 \\ 0 & -a\omega^2(Mm_2 + m_2\sqrt{m_2M}) + m_2 M a g \end{pmatrix}$$

Daraus folgen die bereits bekannten Eigenwerte.

3.3 Der lineare Schwinger

Wir wollen ein besonders einfaches Beispiel eines Moleküls betrachten, das aus drei Atomen besteht, die linear angeordnet sind.

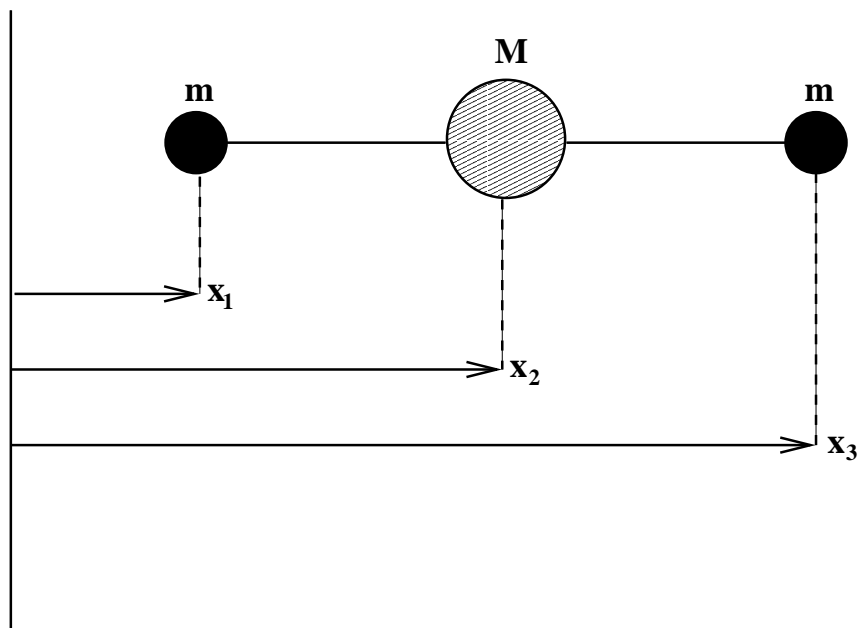


Abbildung 35:

Außerdem nehmen wir an, dass nur lineare Schwingungen möglich sind. Die Ruhelage sei $x_1^{(0)}$, $x_2^{(0)}$ und $x_3^{(0)}$.

$$\begin{aligned}\rightsquigarrow x_1 &= x_1^{(0)} + \xi_1 \\ x_2 &= x_2^{(0)} + \xi_2 \\ x_3 &= x_3^{(0)} + \xi_3\end{aligned}$$

Da unser Molekül nicht in einem äußeren Kraftfeld ist, haben wir zwei Schwingungsfreiheitsgrade und die Translation als zusätzlichen 3. Freiheitsgrad. Die Translation können wir abseparieren, indem wir fordern, dass der Gesamtimpuls des Moleküls Null ist.

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^3 m_i \dot{x}_i &= 0 \\ \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^3 x_i m_i &= 0 \text{ (Impulssatz)} \\ \rightsquigarrow \sum_i x_i m_i = \text{const.} &= \sum_i x_i^{(0)} \cdot m_i \\ \text{da Schwerpunkt festliegen soll.} &= \sum_i (x_i^{(0)} + \xi_i) m_i \\ \text{daraus folgt aber } \sum_i m_i \xi_i &= 0\end{aligned}$$

Diese Gleichung erlaubt uns, eine der Unbekannten im Prinzip zu eliminieren. Im allgemeinen Fall kann man die Rotationsfreiheitsgrade nicht in dieser simplen Weise abseparieren. Nur im Fall der kleinen Schwingungen ist dies möglich. Um die Rotationen des Moleküls auszuschließen, muss der Gesamtdrehimpuls Null sein.

Im Allgemeinen ist der Drehimpuls nicht die totale zeitliche Ableitung irgendeiner Koordinatenfunktion, durch deren Nullsetzen man ihn zum Verschwinden bringen kann.

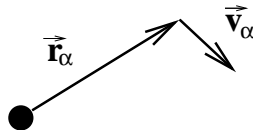


Abbildung 36:

$$\begin{aligned} \vec{M} &= \sum_i m_i [\vec{r}_i \times \vec{v}_i] = \sum_i m_i [(\vec{r}_i^{(0)} + \vec{\xi}_i) \times \dot{\vec{\xi}}_i] \\ &\quad \vec{\xi}_i \times \dot{\vec{\xi}}_i \text{ (klein von 2. Ordnung)} \\ \vec{r}_i &= \vec{r}_i^{(0)} + \vec{\xi}_i \text{ (kleine Schwingungen)} \\ \vec{M} &= \sum_i m_i [\vec{r}_i^{(0)} \times \dot{\vec{\xi}}_i] = \frac{d}{dt} \sum_i m_i [\vec{r}_i^{(0)} \times \vec{\xi}_i] \end{aligned}$$

Damit \vec{M} verschwindet, muss gelten:

$$\sum_i m_i [\vec{r}_i^{(0)} \times \xi_i] = \text{const}$$

Eine neue Bedingung, um eine weitere Koordinate zu eliminieren, jedoch ohne Bedeutung für unsere linearen Schwingungen.

Aufstellung der Lagrange-Funktion:

$$\begin{array}{ll} \text{kin. Energie} & T = \frac{m}{2}(\dot{\xi}_1^2 + \dot{\xi}_3^2) + \frac{M}{2}\dot{\xi}_2^2 \\ \text{pot. Energie} & U \end{array}$$

Für unser Beispiel nehmen wir den folgenden Potentialverlauf zwischen dem Atom 2 und Atom 1 bzw. Atom 3 ($\tilde{U}(x_3 - x_1)$ wird vernachlässigt).

$$\begin{aligned} U &= U(x_2 - x_1) + U(x_3 - x_2) \\ a &\equiv x_2^{(0)} - x_1^{(0)} \equiv x_3^{(0)} - x_2^{(0)} \end{aligned}$$

Wir entwickeln um die Gleichgewichtslage a .

$$\begin{aligned} b &= \left. \frac{d^2 U}{dx^2} \right|_{x=a} \\ U &= \underbrace{2U(a)}_{=0} + \frac{b}{2} \left\{ [\xi_2 - \xi_1]^2 + [\xi_3 - \xi_2]^2 \right\} \end{aligned}$$

Damit erhalten wir für die Lagrange-Funktion $L = T - U$:

$$L = \frac{m}{2}(\dot{\xi}_1^2 + \dot{\xi}_3^2) + \frac{M}{2}\dot{\xi}_2^2 - \frac{b}{2} \left\{ [\xi_2 - \xi_1]^2 + [\xi_3 - \xi_2]^2 \right\}$$

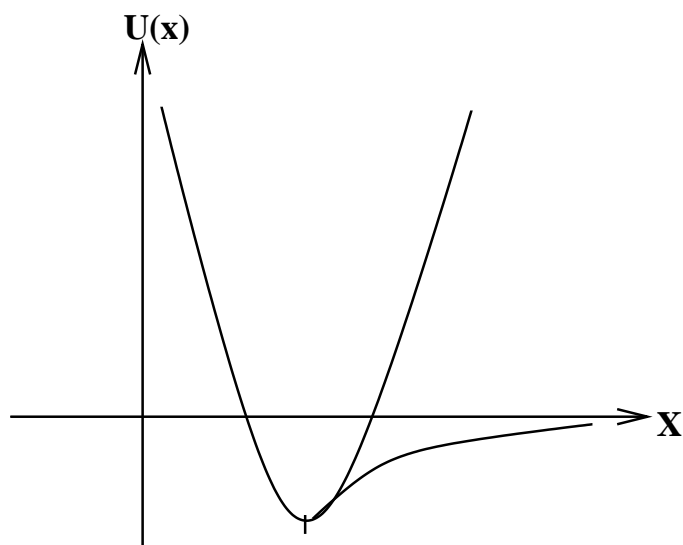


Abbildung 37:

1. Allgemeiner Lösungsweg

a) Säkulargleichung:

$$\det(V_{ij} - \omega_\alpha^2 M_{ij}) = 0$$

Zunächst bestimmen wir den Tensor $V_{ij} = \partial^2 U / (\partial \xi_i \partial \xi_j)$:

$$\begin{aligned} U &= \frac{b}{2}(\xi_2^2 + \xi_1^2 - 2\xi_2\xi_1 + \xi_2^2 + \xi_3^2 - 2\xi_2\xi_3) \\ &= \frac{b}{2}(2\xi_2^2 + \xi_1^2 + \xi_3^2 - 2\xi_1\xi_2 - 2\xi_2\xi_3) \\ \frac{\partial^2 U}{\partial \xi_i \partial \xi_j} &= V_{ij} = \begin{pmatrix} b & -b & 0 \\ -b & 2b & -b \\ 0 & -b & b \end{pmatrix} \\ U &= (\xi_1 \xi_2 \xi_3) \begin{pmatrix} V_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Der Massentensor ist bereits diagonal:

$$M_{ij} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix}$$

Damit lautet unsere Determinante:

$$\det|V_{ij} - \omega^2 M_{ij}| = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} b - m\omega^2 & -b & 0 \\ -b & 2b - M\omega^2 & -b \\ 0 & -b & b - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

Subtraktion Zeile 1 - Zeile 3 und Addition Spalte 1 + Spalte 3, da der Wert der Determinante sich unter diesen Operationen nicht ändert.

$$\begin{aligned} & \begin{vmatrix} b - m\omega^2 & -b & 0 \\ -b & 2b - M\omega^2 & -b \\ 0 & -b & b - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \\ (b - m\omega^2)((2b - M\omega^2)(b - m\omega^2) - 2b^2) &= 0 \\ 2b^2 - M\omega^2 b - 2bm\omega^2 + Mm\omega^4 - 2b^2 &= 0 \\ (b - m\omega^2)\omega^2(b(M + 2m) - Mm\omega^2) &= 0 \end{aligned}$$

(a)

$$\omega = 0$$

Translation des Schwerpunktes, Lösung da dieser nicht abgepalten wurde.

$$\eta_0 = \frac{m(x_1 + x_3) + Mx_2}{2m + M} \text{ (Schwerpunktskoordinate)}$$

(b)

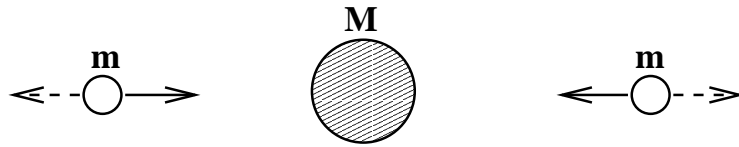
$$\omega_s = \sqrt{\frac{b}{m}}$$

Schwerpunkt in M ruht, die kleinen Massen schwingen symmetrisch zu M .

(c)

$$\omega_\alpha = \sqrt{\frac{b(M + 2m)}{Mm}}$$

m und M schwingen in Gegenphase, aber so, dass der Schwerpunkt ruht.



$$\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$$

Abbildung 38:

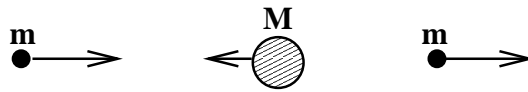


Abbildung 39:

2. Lösungsmethode (Abseparation der Schwerpunktsbewegung)
 Ausgangspunkt ist die Lagrange-Funktion:

$$L = \frac{m}{2}(\dot{\xi}_1^2 + \dot{\xi}_3^2) + \frac{M}{2}\dot{\xi}_2^2 - \frac{b}{2} \left\{ [\xi_2 - \xi_1]^2 + [\xi_3 - \xi_2]^2 \right\}$$

Schwerpunkt:

$$\sum_i m_i \xi_i = 0 \rightsquigarrow \xi_2 = -\frac{m}{M}(\xi_1 + \xi_3)$$

Damit eliminieren wir eine Variable in der Lagrange-Funktion.

$$\begin{aligned} L &= \frac{m}{2}(\dot{\xi}_1^2 + \dot{\xi}_3^2) - \frac{M}{2} \frac{m^2}{M^2} (\dot{\xi}_1 + \dot{\xi}_3)^2 - \frac{b}{2} \left\{ \left[\frac{m}{M}(\xi_1 + \xi_3) + \xi_1 \right]^2 \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{m}{M}(\xi_1 + \xi_3) + \xi_3 \right]^2 \right\} \\ &= \frac{m}{2}(\dot{\xi}_1 - \dot{\xi}_3)^2 + m\dot{\xi}_1\dot{\xi}_3 + \frac{M}{2} \frac{m^2}{M^2} (\dot{\xi}_1 + \dot{\xi}_3)^2 \\ &\quad - \frac{b}{2} \left\{ \left[\frac{m}{M}(\xi_1 + \xi_3) - \xi_1 \right]^2 + \left[\frac{m}{M}(\xi_1 + \xi_3) + \xi_3 \right]^2 \right\} \end{aligned}$$

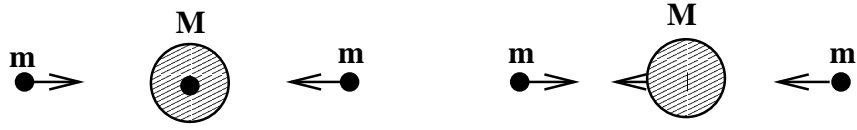


Abbildung 40:

Da wir nur zwei Koordinaten haben, ergeben sich aus Symmetriegründen eine symmetrische und eine antisymmetrische Lösung. Lösung:
Ansatz:

$$\begin{aligned}
 \Theta_s &= \xi_1 - \xi_3; & \Theta_a &= \xi_1 + \xi_3 \text{ (Schwerpunkt ruht)} \\
 \rightsquigarrow \xi_1 &= \frac{\Theta_s + \Theta_a}{2}; & \xi_3 &= \frac{\Theta_a - \Theta_s}{2}; & \xi_1 \cdot \xi_3 &= \frac{\Theta_a^2 - \Theta_s^2}{4} \\
 \rightsquigarrow L &= \frac{m}{2} \dot{\Theta}_s^2 + \frac{m^2}{2M} \dot{\Theta}_a^2 + \frac{m}{4} (\dot{\Theta}_a^2 - \dot{\Theta}_s^2) \\
 &\quad - \frac{b}{2} \left\{ \left[\frac{m}{M} \Theta_a + \frac{\Theta_s + \Theta_a}{2} \right]^2 + \left[\frac{m}{M} \Theta_a + \frac{\Theta_a + \Theta_s}{2} \right]^2 \right\}
 \end{aligned}$$

Mit der Definition $\mu = 2m + M$ folgt:

$$\begin{aligned}
 \rightsquigarrow L &= \frac{m}{4} \dot{\Theta}_s^2 + \frac{m}{4} \cdot \frac{\mu}{M} \dot{\Theta}_a^2 + \left(\frac{b}{4} \left(\frac{\mu}{M} \right)^2 \Theta_a^2 + \frac{b}{4} \Theta_s^2 \right) \\
 L &= \frac{m}{4} \dot{\Theta}_s^2 - \frac{b}{4} \Theta_s^2 + \frac{m}{4} \cdot \frac{\mu}{M} \dot{\Theta}_a^2 - \frac{b}{4} \left(\frac{\mu}{M} \right)^2 \Theta_a^2
 \end{aligned}$$

Damit kann man sofort die Eigenfrequenzen ablesen, da wir zwei entkoppelte harmonische Oszillatoren erhalten.

$$\omega_s^2 = \frac{b}{m}; \quad \omega_a^2 = \frac{b}{m} \frac{\mu}{M} = \frac{b(2m + M)}{mM}$$

mit den Normalkoordinaten

$$\Theta_s = \xi_1 - \xi_3; \quad \Theta_a = \xi_1 + \xi_3$$

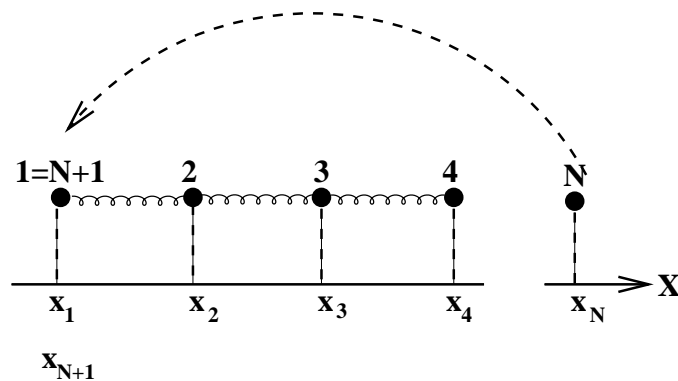


Abbildung 41:

3.4 Modell des Festkörpers: Die lineare Kette

Wir betrachten ein Kristallgitter, wie z.B. $NaCl$. Dabei interessieren wir uns für die longitudinalen Schwingungen.

Der Abstand der einzelnen Atome in Ruhelage sei a . Aus Gründen, die später klar werden, identifizieren wir das $n + 1$ Atom mit dem 1., d.h. wir schließen die Kette zu einem Ring. Wir vereinfachen das Problem, indem wir gleiche Massen annehmen. Außerdem betrachten wir nur Wechselwirkungen zwischen den nächsten Nachbarn. Die potentielle Energie ist proportional zum Quadrat der Abstandänderung, höhere Terme (Anharmonizitäten) werden vernachlässigt. Wir führen nun die Ruhelage $x_1^{(0)}$ und die Auslenkung $\xi_1(t)$ ein:

$$x_1 = x_1^{(0)} + \xi_1(t); \quad x_2 = x_2^{(0)} + \xi_2(t) \dots x_n = x_n^{(0)} + \xi_n(t)$$

Das Potential zwischen zwei benachbarten Atomen lässt sich damit darstellen:

$$U_{n,n+1} = \frac{\chi}{2}(x_{n+1} - x_n - a)^2 = \frac{\chi}{2}(\xi_{n+1} - \xi_n)^2$$

da $(x_{n+1}^{(0)} - x_n^{(0)} - a) = 0$ ist.

Unsere Lagrange-Funktion lautet jetzt:

$$L = \frac{M}{2} \sum_{n=1}^N \dot{x}_n^2 - \frac{\chi}{2} \left\{ (x_2 - x_1 - a)^2 + (x_3 - x_2 - a)^2 \dots (x_{N+1} - x_N - a)^2 \right\}$$

Mit den effektiven Auslenkungen lautet die Lagrange-Funktion:

$$L = \frac{M}{2} \sum_{n=1}^N \dot{\xi}_n^2 - \frac{\chi}{2} \sum_{n=1}^N (\xi_{n+1} - \xi_n)^2$$

Im Prinzip können wir den allgemeinen Weg gehen:

$$L = \frac{1}{2} \sum m_{nk} \dot{\xi}_n \dot{\xi}_k - \frac{1}{2} \sum k_{nk} \xi_n \xi_k$$

Hier gilt jedoch:

$$\begin{aligned} m_{nk} &= M \delta_{nk} \text{ (diagonal)} \\ k_{nk} &= 2\chi \delta_{nk} - \chi \delta_{n,k\pm 1} \end{aligned}$$

D.h. die Matrix k_{nk} besitzt nicht nur Diagonalelemente, sondern auch Elemente eine Reihe über und eine Reihe unter den Diagonalen. Die Eigenfrequenzen ergeben sich aus

$$\det(-\omega^2 m_{nk} + k_{nk}) = 0$$

und die Eigenvektoren zu

$$\xi_k(t) = \sum_{\alpha} \Delta_{k\alpha} C_{\alpha} e^{i\omega_{\alpha} t} = \sum_{\alpha} \Delta_{k\alpha} Q_{\alpha}$$

Das vorliegende Problem kann jedoch vereinfacht werden, da man sich aus Symmetriebetrachtungen die Normalkoordinaten verschaffen kann. Hier wollen wir direkt den Ansatz machen und zeigen, dass dieser Ansatz L in eine diagonale Summe verwandelt. Normalkoordinaten (Ansatz):

$$Q_{\alpha} = \sqrt{\frac{M}{N}} \sum_{n=1}^N e^{2\pi i \alpha n / N} \xi_n$$

Dabei ist N die Zahl der Atome des Gitters (in linearer Kette) und M ist die Masse der einzelnen Atome. Abkürzung:

$$\frac{2\pi\alpha}{Na} a = k_{\alpha} a$$

a ist der Abstand der einzelnen Atome in der Ruhelage. Es lässt sich also eindeutig jedem α ein k_α zuordnen. Deshalb können wir auch nach k_α klassifizieren.

$$Q_k = \sqrt{\frac{M}{N}} \sum_{n=1}^N e^{ik_\alpha a n} \xi_n$$

Falls unser Ansatz richtig ist, muss er die Lagrange-Funktion in eine diagonale Summe verwandeln. Dazu müssen wir die Transformation $Q_k \rightarrow \xi_k$ umkehren. Dazu multiplizieren wir auf beiden Seiten der Gleichung mit

$$\frac{1}{\sqrt{M \cdot N}} \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{+\frac{\pi}{a}} e^{-ikal}$$

$$\frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{+\frac{\pi}{a}} e^{-ikal} Q_k = \frac{1}{N} \sum_{k,n} e^{ika(n-\ell)} \xi_n = \frac{n}{N} \cdot N \xi_\ell + \frac{1}{N} \sum_{n \neq \ell} \sum_k e^{ika(n-\ell)} \xi_n$$

$$\text{da } \frac{1}{N} \sum_{k,n} e^{ika(n-\ell)} \text{ (für } \ell = n) = \frac{1}{N} \sum_{k(n=\ell)} 1 \xi_\ell = \frac{1}{N} \cdot N \cdot \xi_\ell$$

Die Summe α geht von 1 bis N , dagegen läuft k_α von $\frac{2\pi}{Na}$ bis $\frac{2\pi}{a}$. Da es sich bei e^{ika} um eine periodische Funktion mit der Periode $\frac{2\pi}{a}$ handelt, können wir k durch $k + \frac{2\pi}{a}$ ersetzen und erhalten dieselben Q_k . Die Gesamtzahl der Q_k liegt zwischen k und $k + \frac{2\pi}{a}$. Wegen der Symmetrie (da es sich um eine Kette handelt), können wir $\alpha = -\frac{N}{2} + 1$ bis $\alpha = \frac{N}{2}$ (N gerade) summieren. Die zweite Summe verschwindet, da sie auf diskreten Punkten $(n - \ell)$ Werte mit entgegengesetzten Vorzeichen auf äquidistanten Punkten durchläuft. Man summiert dabei Werte auf dem komplexen Einheitskreis für $n - \ell = 1$ einmal über diskrete Punkte über 360 Grad, die sich wegheben. Für $n - \ell > 1$ läuft man $(n - \ell)$ Mal über den Einheitskreis und die Summe verschwindet ebenfalls. Das entspricht im kontinuierlichen Fall, dass

$$\int_0^{2\pi} ds \sin nx$$

verschwindet, für jedes Integral über ein ganzzahliges Vielfaches einer Periode ($2\pi/n$).

$$\sum_{k_\alpha} e^{ik_\alpha a(n-\ell)} = N \delta_{n,\ell} \text{ mit } k_\alpha = \frac{2\pi\alpha}{Na} \text{ und } \alpha = -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}$$

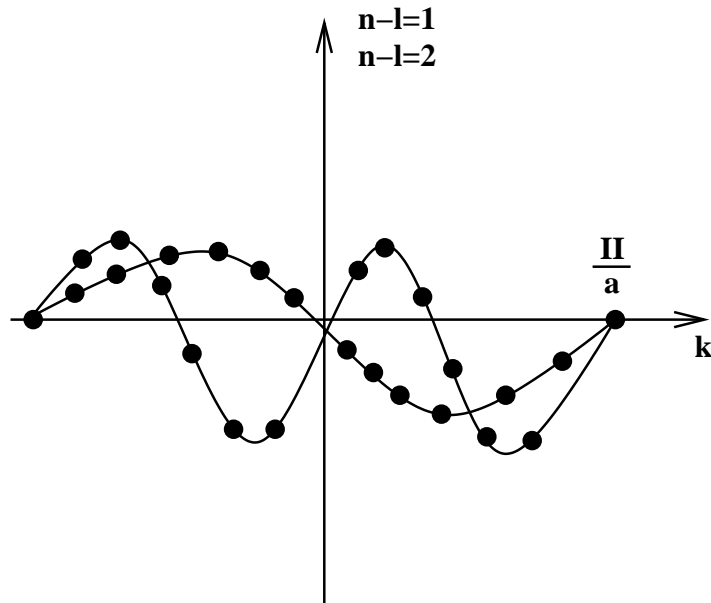


Abbildung 42:

Damit kennen wir die Umkehrung:

$$\xi_\ell = \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{k+\frac{\pi}{a}} e^{-ikal} Q_k$$

$$Q_k = e^{i\omega_k t}$$

ω_k muss noch berechnet werden

Beweis, dass unser Ansatz L diagonal macht:

$$T = \frac{1}{2} M \sum_{n=1}^N \dot{\xi}_n^* \dot{\xi}_n = \frac{1}{2N} \sum_{k,k'} \underbrace{\sum_{n=1}^N e^{i(k-k')na}}_{N\delta_{k,k'}} \dot{Q}_k^* \dot{Q}_{k'}$$

$\sum_{k,k'} \sum_{n=1}^N$ hier haben wir die beiden Summen vertauscht
 $N\delta_{k,k'}$ (aus den gleichen Gründen wie oben)

$$T = \frac{1}{2} \sum_k \dot{Q}_k^* \dot{Q}_k$$

bleibt also diagonal. Die potentielle Energie war gegeben durch

$$\begin{aligned}
U &= \frac{1}{2}\chi \sum_n (\xi_{n+1} - \xi_n)^* (\xi_{n+1} - \xi_n) \\
&= \frac{1}{2}\chi \sum_{n=1}^N \{ \xi_{n+1}^* \xi_{n+1} + \xi_n^* \xi_n - \xi_n^* \xi_{n+1} - \xi_{n+1}^* \xi_n \}
\end{aligned}$$

Die beiden diagonalen Terme ergeben sich wie bei T :

$$\begin{aligned}
U &= \frac{1}{2}\chi \frac{1}{MN} \sum_{n,k,k'} \{ 2e^{i(k-k')na} - e^{i[kn-k'(n+1)]a} - e^{i[k(n+1)-k'n]a} \} Q_k^* Q_{k'} \\
&= \frac{1}{2}\chi \frac{1}{MN} \left\{ \sum_k 2N Q_k^* Q_k - \sum_{n,k,k'} e^{i(k-k')na} \underbrace{(e^{-ik'a} + e^{ika})}_{2 \cos(ka)} Q_k^* Q_{k'} \right\} \\
\Rightarrow U &= \frac{\chi}{M} \sum_k \{ 1 - \cos ka \} Q_k^* Q_k
\end{aligned}$$

und mit der Beziehung $1 - \cos ka = 2 \sin^2 \frac{ka}{2}$ folgt daraus:

$$U = \frac{2\chi}{M} \sum_k \sin^2 \frac{ka}{2} Q_k^* Q_k$$

Das ist ebenfalls diagonal, und damit hat sich der Ansatz als richtig erwiesen. Zur Bestimmung der ω_k benutzen wir die Eigenwertgleichung für Q_k :

$$\det(-\omega_k^2 m_{\alpha\beta} + k_{\alpha\beta}) = 0$$

Da unsere Lagrange-Funktion diagonal ist, lässt sich die Determinante als einfaches Produkt schreiben:

$$\Pi_k \left(\frac{4\chi}{M} \sin^2 \frac{ka}{2} - \omega_k^2 \right) = 0$$

Daraus erhält man die Eigenfrequenzen:

$$\omega_k = 2 \sqrt{\frac{\chi}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$

Und die Normalkoordinaten:

$$Q_k(t) = C_k \exp \left[2i \sqrt{\frac{\chi}{M}} \sin \left(\frac{ka}{2} t \right) \right]$$

Die Gleichung für die Schwingungsamplituden ξ_n lautet:

$$\xi_n = \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{K=-\frac{\pi}{a}}^{+\frac{\pi}{a}} e^{iKan} Q_k(t) \right\} = \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{+\frac{\pi}{a}} e^{i[kan - \omega_k t]} \cdot C_k \right\}$$

Um die Natur der Lösung leichter zu verstehen, setzen wir alle $Q_k = 0$ bis auf eine einzige Normalschwingung ($\omega = \omega_k$). Wir erhalten dann also:

$$\xi_n = \operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{MN}} e^{i(kan - \omega_k t)} = \frac{1}{\sqrt{MN}} \cos \left(k \underbrace{an}_x - \omega_k t \right)$$

Wie man sieht, handelt es sich um sich ausbreitende Wellen. Wir haben jetzt eine anschauliche Bedeutung für die Größe k gefunden. k ist die Wellenzahl.

$$k_\alpha = \frac{2\pi}{\lambda_\alpha}; \quad \lambda_\alpha = \frac{2\pi}{k_\alpha} \text{ mit } k_\alpha = \frac{2\pi\alpha}{NA}; \quad \alpha = -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}$$

Der Zusammenhang zwischen ω_k und k ist nichts anderes als das Dispersionsgesetz für dieses System.

Wenn wir N immer größer machen, werden die Schritte

$$k_\alpha = \frac{2\pi\alpha}{N}$$

immer kleiner und wir können für $N \rightarrow \infty$ zum Kontinuumsimes übergehen.

$$\cos \left\{ k \left(x - \frac{\omega_k}{k} t \right) \right\}$$

Das Maximum des $\cos k(x - \frac{\omega_k}{k} t)$ breitet sich mit der Geschwindigkeit $v_k = \frac{\omega_k}{k}$ in x -Richtung aus. (v_k ist die Phasengeschwindigkeit) Für $t = \text{const.}$ erhalten wir die Auslenkung der einzelnen Atome aus der Ruhelage als Amplitude der Welle. Für kleine Wellenzahlen k , d.h. also für große Wellenlängen können wir ω_k entwickeln:

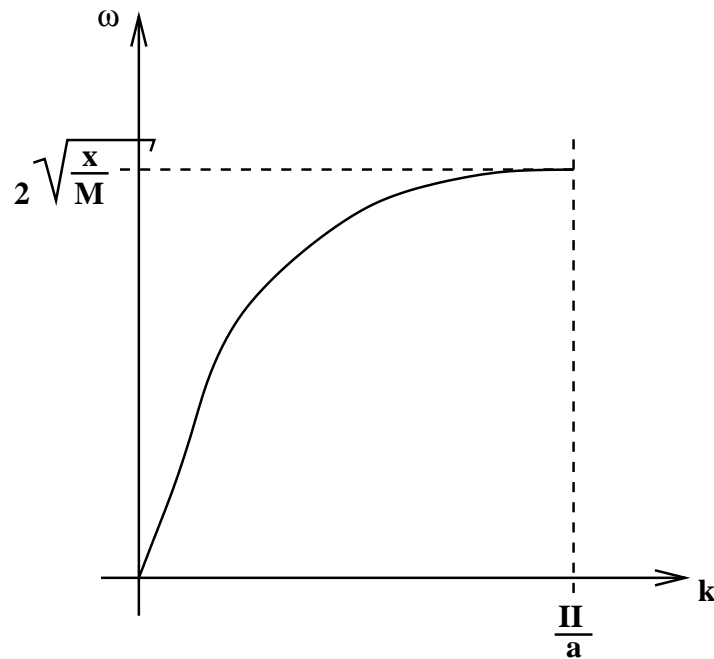


Abbildung 43:

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{\chi}{M}} \left(\frac{ka}{2} - \frac{1}{3!} \left(\frac{ka}{2} \right)^3 + \dots \right)$$

In erster Näherung erhalten wir also:

$$\omega_k = \sqrt{\frac{\chi}{M}} a \cdot k$$

Wir sehen, die Wellengeschwindigkeit hängt linear von der Wellenzahl ab (z.B. elastische Wellen, Akustik). Es gibt dann keine Dispersion, die Phasengeschwindigkeit ist unabhängig von der Wellenzahl (genauer: sie ist eine Konstante).

$$v_k = \frac{\omega_k}{k} = \sqrt{\frac{\chi}{M}} a$$

Bei elastischen Wellen gilt nach der Kontinuumstheorie $\omega = c \cdot k$. Bei sehr langen Wellen $\lambda \gg a$ erhält man hier dasselbe Resultat. Bei kurzen Wellen $\lambda = a$ ergeben sich Abweichungen, sobald λ in die Größenordnung der Gitterkonstanten kommt. Hier wird die Trägheit des Mediums größer, ω_k also kleiner.

3.5 Lineare Kette mit verschiedenen Massen

Ein realistischeres Modell für den Festkörper, z.B. ein $NaCl$ -Kristall, ist eine lineare Kette mit zwei unterschiedlichen Massen.

$$T = \frac{1}{2}M \sum_{n=1}^{N/2} \dot{\xi}_{2n}^2 + \frac{1}{2}m \sum_{n=0}^{(N-2)/2} \dot{\xi}_{2n+1}^2$$

$$U = \frac{1}{2}\chi \sum_{n=1}^{N/2} [(\xi_{2n} - \xi_{2n+1})^2 + (\xi_{2n} - \xi_{2n-1})^2]$$

Auch hier ist nur das Potential zwischen den nächsten Nachbarn berücksichtigt. Zur Vereinfachung führen wir neue generalisierte Koordinaten ein.

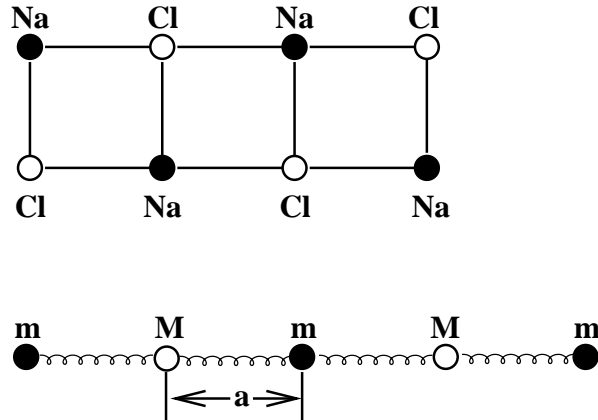


Abbildung 44:

Hier sind es im Gegensatz zu vorhin noch nicht die Normalkoordinaten. Wir definieren zwei verschiedene Klassen von Koordinaten:

$$\xi_{2n} = \sqrt{\frac{2}{N \cdot M}} \sum_{k=-\frac{\pi}{2a}}^{+\frac{\pi}{2a}} e^{-ika2n} Q_k$$

$$\xi_{2n+1} = \sqrt{\frac{2}{N \cdot m}} \sum_{k=-\frac{\pi}{2a}}^{+\frac{\pi}{2a}} e^{-ika(2n+1)} R_k$$

Dieser Ansatz reduziert das Problem der Lösung von N gekoppelten Differentialgleichungen mit N Unbekannten auf die Lösung von N Differentialgleichungen, von denen jeweils 2 gekoppelt sind, mit jeweils 2 Unbekannten.

Unser Eigenwertproblem reduziert sich also auf 2×2 Matrizen. Ganz allgemein: Sind in einer Zelle des Kristalls s -Freiheitsgrade gekoppelt, so haben wir ein $s \times s$ Problem zu lösen. Das Problem ist ganz analog zu 3.4:

$$T = \frac{1}{2} \sum_k (\dot{Q}_k^* \dot{Q}_k + \dot{R}_k^* \dot{R}_k)$$

$$U = \frac{1}{2} \chi \sum_k \left[\frac{2}{M} Q_k^* Q_k + \frac{2}{m} R_k^* R_k - \frac{2}{\sqrt{mM}} (Q_k^* R_k + R_k^* Q_k) \cos ka \right]$$

Die Determinanten unserer $\frac{N}{2}$ Matrizen haben jeweils die Form

$$\det |k_{ij} - m_{ij} \omega_\alpha^2| = 0$$

Diese Determinante lautet

- a) Massentensor m_{ij} ist diagonal
- b) Kraftkonstantentensor

$$k_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{2\chi}{M} & -\frac{2\chi}{\sqrt{mM}} \cos ka \\ \frac{-2\chi}{\sqrt{mM}} \cos ka & \frac{2\chi}{m} \end{pmatrix}$$

$$k = -\frac{\pi}{2a} \cdots + \frac{\pi}{2a}$$

$$\det \begin{vmatrix} \frac{2\chi}{M} - \omega^2 & -\frac{2\chi}{\sqrt{mM}} \cos ka \\ \frac{-2\chi}{\sqrt{mM}} \cos ka & \frac{2\chi}{m} - \omega^2 \end{vmatrix}$$

$$\frac{4\chi^2}{Mm} - \omega^2 \left(\frac{2\chi}{M} + \frac{2\chi}{m} \right) + \omega^4 - \frac{4\chi^2}{mM} \cos^2 ka = 0$$

$$\omega_{1/2}^2 = \frac{\chi}{mM} \left\{ m + M \pm \sqrt{(m + M)^2 - 4mM \sin^2 ka} \right\}$$

Wir erhalten also für jedes k zwei verschiedene Eigenfrequenzen, d.h. das Frequenzband wird aufgespalten. Beispiel: $M = 2m$.

Gemäß der obigen Dispersionsrelation für die 2-atomige Kette, spaltet sich das Frequenzband in zwei Bänder auf. Das untere reicht von $\omega = 0$ bis $\omega = \frac{2\chi}{M}$, das obere von $\omega = \frac{2\chi}{m}$ bis $\omega = s\chi \frac{m+M}{mM}$. Das untere ist das akustische, das obere wegen der höheren, auf optischem Wege anzuregenden Frequenzen das optische Band. Im realen 3-dimensionalen Gitter gibt es mehrere optische

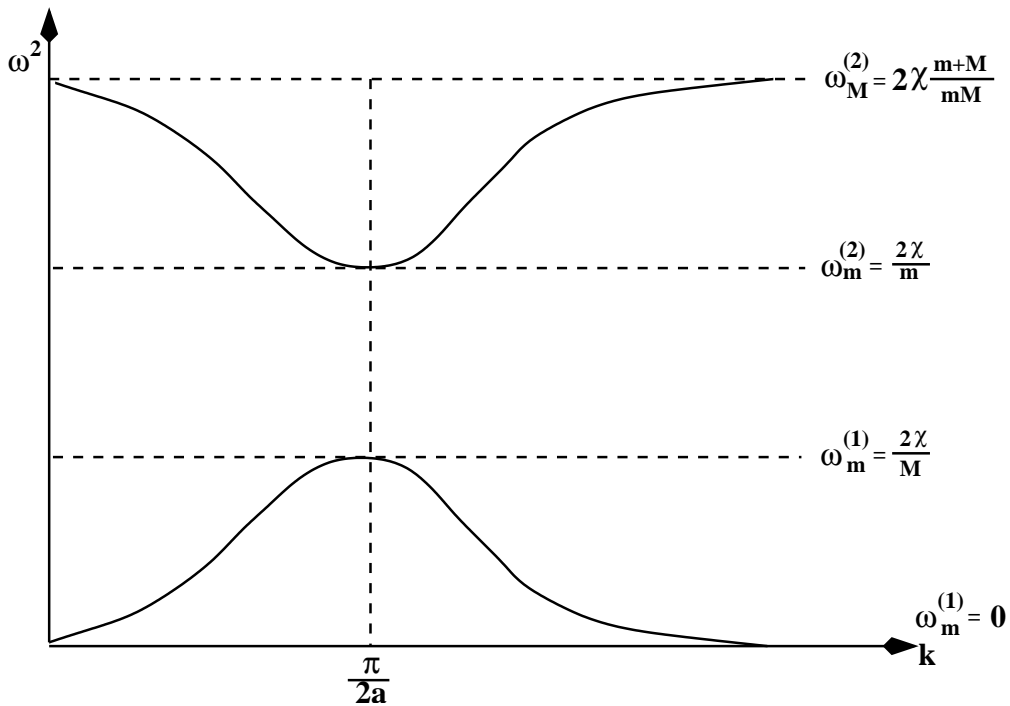


Abbildung 45:

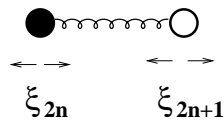


Abbildung 46:

und akustische Bänder. Physikalische Bedeutung der beiden Normalschwingungen:

$$\xi_{2n} = \sqrt{\frac{2}{NM}} \sum_k e^{-ika2n} Q_k$$

$$\xi_{2n+1} = \sqrt{\frac{2}{Nm}} \sum_k e^{-ika2n} R_k$$

Wir berechnen das Verhältnis $\frac{Q_k}{R_k}$ aus der Gleichung

$$\sum_{j=1}^s \{-\omega^2 m_{ij} + k_{ij}\} A_j = 0; \quad Q_\alpha = A_j e^{i\omega t}; \quad Q_1 = Q_k; \quad Q_2 = R_k$$

Für eine vorgegebene Frequenz erhalten wir zwei homogene Gleichungen für $A_j \sim \frac{Q}{R}$:

$$\frac{Q_k}{R_k} = \sqrt{\frac{M}{m}} \frac{x \cos k_a}{x - \frac{1}{2}M\omega_k^2} = \sqrt{\frac{M}{m}} \frac{x - \frac{1}{2}m\omega_k^2}{x \cos k_a}$$

Wenn wir den unteren Ast nehmen, dann ist $\omega_k^2 < \frac{2\chi}{M}$ und $< \frac{2\chi}{m}$. Damit haben Q_k und R_k dasselbe Vorzeichen, d.h. die beiden benachbarten Massen schwingen in Phase. Auch wenn die beiden Ionen geladen sind, wird kein Dipolmoment erzeugt (Schallwellen). Im oberen Zweig hat

$$\omega_k^2 > \frac{2\chi}{m}$$

Daher haben hier Q_k und R_k verschiedene Vorzeichen, die benachbarten Atome schwingen gegeneinander. Im Fall von *NaCl* haben sie entgegengesetzte Ladungen und es wird daher ein Dipolmoment erzeugt, welches schwingt. Dies ist daher der optische Zweig.