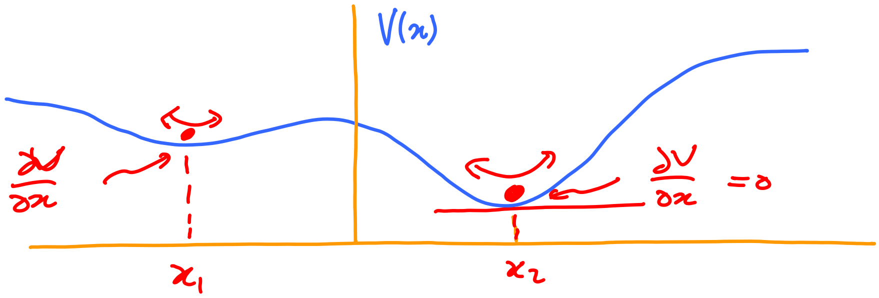
Kleine Schwingungen

$v6$ – 3.5.07 | KSchw1

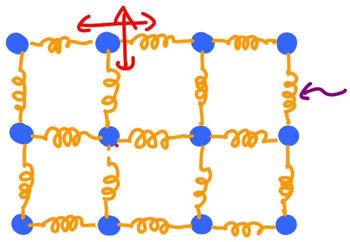
Ziel: generische Beschreibung der Dynamik der Umgebung von stabilen Gleichgewichtslage.

Beispiele:

Teilchen in Potentialminimum:



Atome im Kristalgitter:



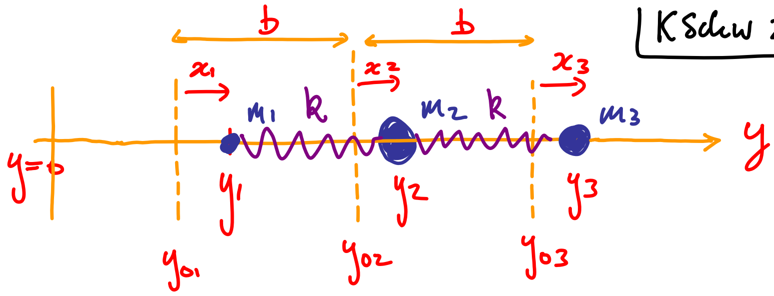
symbolisiert Rückstellkräfte auf Grund von Coulomb. Wechselwirkung

---

Beispiel: Dreiatomiges Molekül

| KSchw 2

3 Atome, (Massen m_i) gekoppelt durch 2 harmonische Federn:



Positionen: $y_i \quad i=1,2,3$ Gleichgewichtspositionen: y_{0i}

Gleichgewichtsabstände: $$y_{02} - y_{01} = y_{03} - y_{02} = b \qquad (1)$$

Auslenkungen um Gleichgewichtslage: $$x_i = y_i - y_{i0} \qquad (2)$$

Potentielle Energie: $$V(y_1, y_2, y_3) = \frac{1}{2} k \left[(y_2 - y_1 - b)^2 + (y_3 - y_2 - b)^2 \right] \qquad (3)$$

$$\overset{(1)}{=} \frac{1}{2} k \left[(y_2 - y_1 - (y_{02} - y_{01}))^2 + ((y_3 - y_2) - (y_{03} - y_{02}))^2 \right] \qquad (4)$$

KSchw 3

Ausgedrückt durch Auslenkungen:

$$V(y_1, y_2, y_3) \overset{(2)}{=} \frac{1}{2} k \left[(x_2 - x_1)^2 + (x_3 - x_2)^2 \right] \quad (1)$$

$$= \tilde{V}(x_1, x_2, x_3)$$

Gleichgewichtsbedingung:

$$\left.\frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_i}\right|_{\{x_1, x_2, x_3\} = \text{Gl. Lage}} = 0 \implies x_1 = x_2 = x_3 = 0$$

Symmetrische Schreibweise mittels einer Matrix $\hat{V}_{ij}$:

$$\tilde{V}(x_1, x_2, x_3) \overset{(1)}{=} \frac{1}{2} k \left[x_1^2 - 2x_1 x_2 + x_2^2 + x_3^2 - 2x_2 x_3 + x_2^2 \right] \quad (2)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} x_i \hat{V}_{ij} x_j , \qquad \hat{V}_{ij} = k \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}_{ij} \quad (3)$$

$$(x_1 \; x_2 \; x_3) \begin{pmatrix} & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \checkmark$$

Analog für Kinetische Energie:

$$T = \frac{1}{2} m_1 \dot{y}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{y}_2^2 + \frac{1}{2} m_3 \dot{y}_3^2 \quad (4)$$

$$\dot{y}_i = \dot{x}_i$$

$$= \frac{1}{2} m_1 \dot{x}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{x}_2^2 + \frac{1}{2} m_3 \dot{x}_3^2 \quad (5)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} \dot{x}_i \hat{T}_{ij} \dot{x}_j , \qquad \hat{T}_{ij} = \begin{pmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & m_3 \end{pmatrix} \quad (6)$$

KSchw 4

Kraft auf Teilchen n: $(n = 1, 2, 3)$

$$F_n = -\frac{\partial V}{\partial y_n} = -\frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_n} \quad (1)$$

$$\hat{V}_{nj} \overset{(3.3)}{=} \hat{V}_{jn}$$

$$\tilde{V} \overset{(3.3)}{=} \frac{1}{2} \sum_{ij} x_i V_{ij} x_j$$

$$\overset{(3.3)}{=} -\frac{1}{2} \underbrace{\sum_{ij} \delta_{in} \hat{V}_{ij} x_j}_{\sum_j V_{nj} x_j} - \frac{1}{2} \sum_j x_j \hat{V}_{jn} = -\sum_j V_{nj} x_j \quad (2)$$

Bewegungsgleichung für Teilchen n:

$$m_n \ddot{y}_n \overset{(2.2)}{=} F_n$$

$$\left(\cdot. \right) \left(\vdots \right) = - \left(\vdots\vdots\vdots \right) \left(\vdots \right) \quad (3)$$

$$\downarrow (2.2) \qquad \downarrow (4.2)$$

$$\vec{x} \overset{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$m_n \ddot{x}_n = -\sum_j \hat{V}_{nj} x_j \qquad (n = 1, 2, 3) \quad (4)$$

Vektorielle Schreibweise:

$$\boxed{\hat{T} \ddot{\vec{x}} = -\hat{V} \vec{x}} \quad \text{(System linearer DGL)} \quad (5)$$

Lösungsansatz: (siehe Vorl. 2, DG 8.3)

$$\vec{x}(t) = \vec{a} e^{i\omega t} \qquad \left(\omega, \vec{a} \text{ sind zu bestimmen} \right) \quad (6)$$

Einsetzen in (4.5)

$$(T_{ij} a_j) \qquad V_{ij} a_j$$

$$(\hat{T} \ddot{\vec{x}})_i = \hat{T} \left(-\omega^2 \cancel{e^{i\omega t}} \right) \vec{a} = -\omega^2 e^{i\omega t} (\hat{T} \vec{a})_i \overset{(5)}{=} -\cancel{e^{i\omega t}} (\hat{V} \vec{a})_i \quad (7)$$

KSchw 5

$(4.7) \Rightarrow \boxed{(\hat{V} - \omega^2 \hat{T})\vec{a} = 0}$ (1)

Verallgemeinertes Eigenwertproblem d. Form $(\hat{M} - \omega^2)\vec{a}' = 0$, mit $\hat{M} = \hat{T}'^{-1}\hat{V}$

(5.1) ist lineares Gl. system. Lsg. mit $\vec{a} \neq 0$ existieren nur, falls die Matrix $\hat{V} - \omega^2 \hat{T}$ nicht invertierbar ist:

$$\Rightarrow \boxed{0 = \det(\hat{V} - \omega^2 \hat{T})} \quad (2)$$

Algebraische Gl., Bedingung für Eigenfrequenzen

Explizit eingesetzt für $m_1 = m_3 = m$, $m_2 = M$:

$$0 = \begin{vmatrix} k - \omega^2 m & -k & 0 \\ -k & 2k - \omega^2 M & -k \\ 0 & -k & k - \omega^2 m \end{vmatrix} \quad (3)$$

$\hat{T} = \begin{pmatrix} m & & \\ & M & \\ & & m \end{pmatrix}$

$$= (k - \omega^2 m)\left[(2k - \omega^2 M)(k - \omega^2 m) - k^2 - k^2\right]$$

$$= (k - \omega^2 m)\,\omega^2\left[\omega^2 m M - k(2m + M)\right] \quad (4)$$

3 Lsg. von (5.4) liefer Eigenwerte:

$$\omega_{(1)}^2 = 0 \qquad \omega_{(2)}^2 = \frac{k}{m} \qquad \omega_{(3)}^2 = \frac{k(2m+M)}{mM} = \frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right) \quad (5)$$

KSchw 6

System hat 3 "Eigenfrequenzen": $\omega_{(1)}$, $\omega_{(2)}$, $\omega_{(3)}$

Dazugehörigen Eigenvektoren = "Normalmoden", $\vec{a}^{(k)}$ für $\omega_{(k)}$

Eigenwertbedingung (5.1): $(\hat{V} - \omega_{(k)}^2 \hat{T})\,\vec{a}^{(k)} = 0$ (1)

Unnormierte Eigenvektoren: (siehe S.7)

$$\vec{a}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2m/M \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Check:

z.B. für $\omega_{(1)} = 0$: $(V - \omega_{(1)}^2 T)\vec{a}^{(1)} = k \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$ ✓

Einschub: Explizite Berechnung der Eigenvektoren durch Lösen von (6.1) KSchw 7

(6.1) für $\omega_{(1)} = 0$:

$$0 = (\hat{V} - 0)\vec{a}^{(1)} = k\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1^{(1)} \\ a_2^{(1)} \\ a_3^{(1)} \end{pmatrix} \Rightarrow \vec{a}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

(6.1) für $\omega_{(2)} = \sqrt{\frac{k}{m}}$:

$$\left(\hat{V} - \frac{k}{m}\hat{T}\right) = k\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} - \frac{k}{m}\begin{bmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{bmatrix}$$

$$0 = \left(\hat{V} - \frac{k}{m}\hat{T}\right)\vec{a}^{(2)} = k\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 2-\frac{M}{m} & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1^{(2)} \\ a_2^{(2)} \\ a_3^{(2)} \end{bmatrix} \Rightarrow \vec{a}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

(6.1) für $\omega_{(3)} = \frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)$:

$$\hat{V} - \frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)\hat{T} = k\begin{bmatrix} -\frac{2m}{M} & -1 & 0 \\ -1 & 2-\frac{M}{m}-2 & -1 \\ 0 & -1 & -\frac{2m}{M} \end{bmatrix}$$

KSchw 8

$$0 = \left(\hat{V} - \frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)\hat{T}\right)\vec{a}^{(3)} \Rightarrow \vec{a}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2\frac{m}{M} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Check:

$$k\begin{bmatrix} -\frac{2m}{M} & -1 & 0 \\ -1 & -\frac{M}{m} & -1 \\ 0 & -1 & -\frac{2m}{M} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ -2\frac{m}{M} \\ 1 \end{bmatrix} = k\begin{bmatrix} -\frac{2m}{M} + \frac{2m}{M} \\ -1 \quad +2 \quad -1 \\ 2\frac{m}{M} - \frac{2m}{M} \end{bmatrix} = 0 \checkmark$$

Ende Einschub

Was ist allg. Lsg v. (4.5)? $\left(\hat{V} - \omega^2 \hat{T}\right) \vec{x}(t) = 0$ (1)

Wir brauchen 6 unabhängige Integrationskonstanten!

1. Versuch: $$\vec{x}(t) = \sum_{k=1}^{3} c^{(k)} \vec{a}^{(k)} \cos\left(\omega^{(k)} t + \phi^{(k)}\right) \quad (2)$$

Aber: $c^{(1)}$ und $\phi^{(1)}$ sind nicht linear unabhängig, weil $\omega^{(1)} = 0$

2. Versuch: $$\vec{x}(t) = \vec{a}^{(1)} \left(c^{(1)} + v^{(1)} t\right) \quad (3a)$$

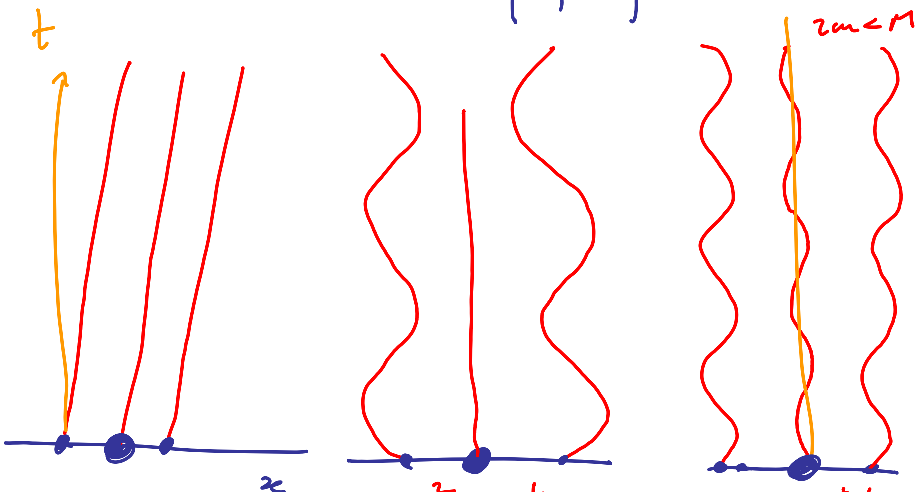
[leicht zu verifizieren durch Einsetzen]

$$+ \sum_{k=2}^{3} c^{(k)} \vec{a}^{(k)} \cos\left(\omega^{(k)} t + \phi^{(k)}\right) \quad (3b)$$

Da die $\vec{a}^{(k)}$ den vollständigen Vektorraum aufspannen, sind beliebige Anfangsbedingungen durch $c^{(1)}, v^{(1)}, c^{(2)}, \phi^{(2)}, c^{(3)}, \phi^{(3)}$ repräsentierbar

Allgemeine Lösung: $$x(t) = \begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}(a_1 t + b_1) + \begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix} A_2 \cos(\omega_2 t + \alpha_2)$$
$$+ \begin{pmatrix}1\\-2m/M\\1\end{pmatrix} A_3 \cos(\omega_3 t + \alpha_3)$$

Visualisierung der drei Eigenschwingungen:



$\omega^2_{(2)} = \frac{k}{m}$ $\qquad$ $\omega^2_{(3)} = \frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)$

www2.ess.ucla.edu/~schauble/molecular_vibrations.htm

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}, \quad A^{(2)} = \begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}, \quad A^{(3)} = \begin{pmatrix}1\\-2m/M\\1\end{pmatrix}$$