

Kleine Schwingungen

(25) 28.4.08

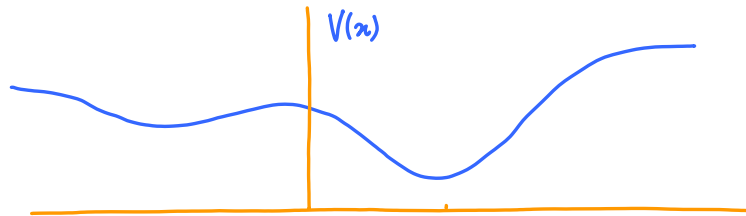
KSchw1

Motivations applett: www2.ess.ucla.edu/~schauble/molecular_vibrations.htm

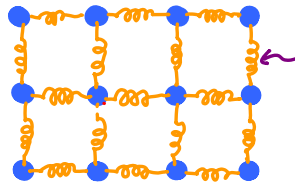
Ziel: generische Beschreibung der Dynamik der Umgebung von stabilen Gleichgewichtslage.

Beispiele:

Teilchen in Potentialminimum:



Atome im Kristallgitter:



symbolisiert Rückstellkräfte auf Grund von Coulomb Wechselwirkung

Beispiel: Dreiatomiges Molekül

3 Atome (Massen m_i)
gekoppelt durch
2 harmonische Federn
(Federkonstante k)

Positionen:

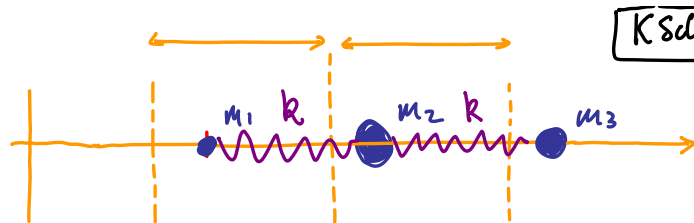
Gleichgewichtsabstände:

Auslenkungen um Gleichgewichtslage:

Potentielle Energie: $V(y_1, y_2, y_3) =$

$$= \frac{1}{2} k \left[(y_2 - y_1)^2 + (y_3 - y_2)^2 \right] \quad (3)$$

(4)



KSchw 2

Gleichgewichtspositionen:

(1)

Auslenkungen in Gleichgewichtslage:

(2)

Ausgedrückt durch
Auslenkungen:

$$V(y_1, y_2, y_3) = \frac{1}{2} k \left[\right]$$

KSchw 3

(1)

Gleichgewichtsbedingung:

$$\tilde{V}(x_1, x_2, x_3) \stackrel{(1)}{=} \frac{1}{2} k [x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2 + x_3^2 - 2x_2x_3 + x_3^2]$$

(2)

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

=

(3)

Analog für
Kinetische Energie:

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

(4)

$$= \frac{1}{2} m_1 + \frac{1}{2} m_2 + \frac{1}{2} m_3$$

(5)

=

(6)

KSchw 4

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

$$F_n =$$

(1)

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

$$\stackrel{(3.3)}{=}$$

(2)

Bewegungsgleichung
für Teilchen n :

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

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

(3)

=

(4)

$$\begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

Vektorielle Schreibweise:



(System linearer DGL)

(5)

Bewegungsgl:

$$\hat{T} \ddot{\vec{x}} \stackrel{(4.5)}{=} - \hat{V} \vec{x}$$

Klausur 5a

(1)

Lösungsansatz:
(siehe Vorl. 2, Dg 8.3)

$$\vec{x}(t) =$$

(2)

$$\dot{\vec{x}}(t) =$$

(3)

Einsetzen in (1):

$$\hat{V} \vec{x} + \hat{T} \ddot{\vec{x}} = 0$$

(4)

Bemerkung: (4) ist "verallgemeinertes Eigenwertproblem", denn
[$\hat{T}^{-1}(4)$ bringt es in die Form eines üblichen Eigenwertproblems:]

(5)

Wir erwarten 3 Eigenwerte, mit dazugehörigen Eigenvektoren.

Lsg. mit existieren nur, falls Matrix nicht invertierbar ist:

⇒

= Polynom d. Ordnung 3 in ω^2 (6)

Explizit:

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

(1)

Klausur 5b

für $m_1 = m_3 =$,
 $m_2 =$:

$$0 = \begin{vmatrix} k & -k & 0 \\ -k & 2k & -k \\ 0 & -k & k \end{vmatrix}$$

(2)

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

(3)

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

(4)

3 Lsg. von (4) liefern Eigenwerte:

$$\omega_{(1)}^2 =$$

(5a)

$$\omega_{(2)}^2 =$$

(5b)

$$\omega_{(3)}^2 =$$

(5c)

System hat 3 "Eigenfrequenzen":

(i) KSchw 6

Dazugehörigen Eigenvektoren =

(2)

Eigenwertbedingung (S.1): $(\hat{V} - \omega^2 \hat{T}) \vec{a} = 0$

(3)

Einfache Rechnung (siehe S.7) liefert:

Unnormierte
Eigenvektoren:

$$\vec{a}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2m/M \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Check:

z.B. für $\omega_{(1)} = 0$:

$$(\hat{V} - \omega_{(1)}^2 \hat{T}) \vec{a}^{(1)} = k \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Einschub: Explizite Berechnung der Eigenvektoren durch Lösen von (6.3)

KSchw 7

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

(6.3) für $\omega_{(2)} = \sqrt{\frac{k}{m}}$: $\left(\hat{V} - \frac{k}{m} \hat{T}\right) = k \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} - \frac{k}{m} \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix} \quad (2)$

$$0 = \left(\hat{V} - \frac{k}{m} \hat{T}\right) \vec{a}^{(2)} = k \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 2 - \frac{M}{m} & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^{(2)} \\ a_2^{(2)} \\ a_3^{(2)} \end{pmatrix} \Rightarrow \vec{a}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

(6.3) für $\omega_{(3)} = \frac{k}{m} \left(1 + \frac{2m}{M}\right)$: $\hat{V} - \frac{k}{m} \left(1 + \frac{2m}{M}\right) \hat{T} = k \begin{pmatrix} -\frac{2m}{M} & -1 & 0 \\ -1 & 2 - \frac{M}{m} - 2 & -1 \\ 0 & -1 & -\frac{2m}{M} \end{pmatrix} \quad (4)$

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

(1)

Check:

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

Ende Einschw

Was ist allgemeine Lsg v. (6.5)?

$$(\hat{V} - \omega^2 \hat{T}) \vec{x}(t) = 0$$

(1) KSchw 9

Wir brauchen unabhängige Integrationskonstanten!

1. Versuch:

$$\vec{x}(t) = \quad (2)$$

Aber:

und sind nicht linear unabhängig, weil

2. Versuch:

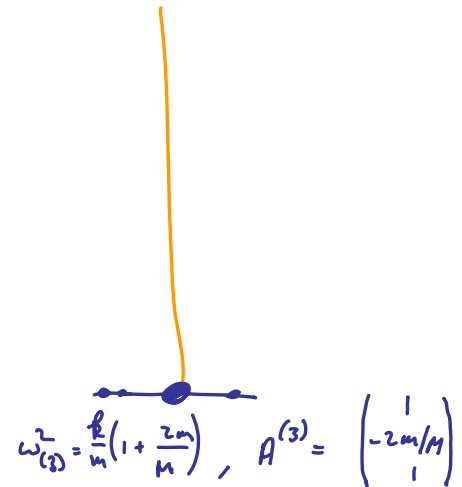
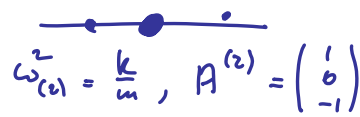
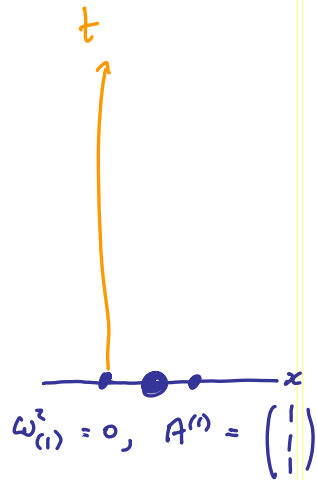
$$\vec{x}(t) = \vec{a}^{(1)} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{leicht zu verifizieren} \\ \text{durch Einsetzen} \end{array} \right. \quad (3a)$$

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

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

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

Visualisierung der drei Eigenschwingungen:



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