

Kleine Schwingungen

(25) 28.4.08

KSchw1

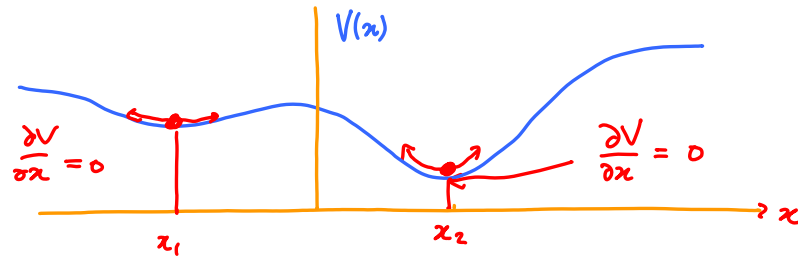
Motivations applett: www2.ess.ucla.edu/~schauble/molecular_vibrations.htm

Ziel:

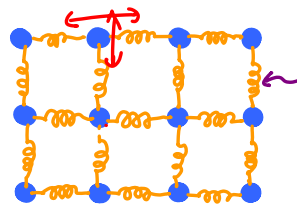
generische Beschreibung der Dynamik der Umgebung von stabilen Gleichgewichtslage.

Beispiele:

Teilchen in Potentialminimum:



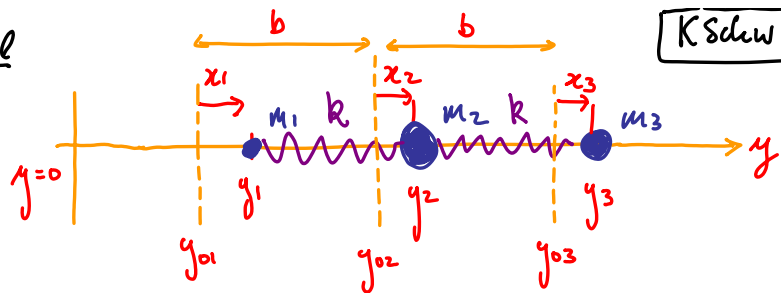
Atome im Kristallgitter:



symbolisiert Rückstellkräfte auf Grund von Coulomb Wechselwirkung

Beispiel: Dreiatomiges Molekül

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



KSchw 2

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

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

Auslenkungen um Gleichgewichtslage: $x_i = y_i - y_{0i}$ Auslenkungen in Gleichgewichtslage: $x_{i0} = 0$ (2)

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

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

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

$$(x_1 \ x_2 \ x_3) \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$= (x_1 \ x_2 \ x_3) \begin{pmatrix} ax_1 + bx_2 + cx_3 \\ dx_1 + ex_2 + fx_3 \\ gx_1 + hx_2 + ix_3 \end{pmatrix}$$

$$= ax_1^2 + bx_1x_2 + cx_1x_3$$

$$+ dx_2x_1 + ex_2^2 + fx_2x_3$$

$$+ gx_3x_1 + hx_3x_2 + ix_3^2$$

Ausgedrückt durch
Auslenkungen:

$$V(y_1, y_2, y_3) \stackrel{(2)}{=} \frac{1}{2} k [(x_2 - x_1)^2 + (x_3 - x_2)^2] = \tilde{V}(x_1, x_2, x_3) \quad \boxed{\text{KSchw 3}} \quad (1)$$

Gleichgewichtsbedingung:

$$\left. \frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_i} \right|_{\{x_1, x_2, x_3\} = \text{Gl. Lage.}} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left(\frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_i} = -k(x_2 - x_1) \right) \quad \{x_i = 0\}$$

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

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

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

$$(x_1, x_2, x_3) \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & \ddots & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} //$$

Analog für
Kinetische Energie:

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

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

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

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

$$\tilde{V}^{(3,3)} = \frac{1}{2} \sum_{ij} x_i V_{ij} x_j$$

Bewegungsgleichung
für Teilchen n :

Vektorielle Schreibweise:

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

$$F_n = - \frac{\partial V}{\partial y_n} = - \frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_n}$$

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_n} = \delta_{in} \quad (1)$$

$$\stackrel{(3,3)}{=} - \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{ij} \delta_{in} \hat{V}_{ij} x_j}_{\sum_j V_{nj} x_j} - \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{ij} x_i \hat{V}_{ij} \delta_{jn}}_{\sum_i x_i V_{in}} = - \sum_j V_{nj} x_j \quad (2)$$

$(\begin{pmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix}) (\begin{pmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix})$

$$m_n \ddot{y}_n \stackrel{(2,2)}{=} F_n \quad (3)$$

$\downarrow (2,2) \quad \downarrow (4,2)$

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

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

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

Bewegungsgl:

$$\hat{T} \ddot{\vec{x}} \stackrel{(4,5)}{=} - \hat{V} \vec{x}$$

($\omega, \vec{a}$ sind zu bestimmen) (1)

Lösungsansatz:
(siehe Vorl. 2, Dg 8.3)

$$\vec{x}(t) = \vec{a} e^{-i\omega t} = \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} e^{-i\omega t} \quad (2)$$

$$\ddot{\vec{x}}(t) = \vec{a} (i\omega)^2 e^{-i\omega t} = -\omega^2 \vec{a} e^{-i\omega t} \quad (3)$$

Einsetzen in (1):
 $\hat{V} \vec{x} + \hat{T} \ddot{\vec{x}} = 0$

$$(\hat{V} - \omega^2 \hat{T}) \vec{a} = 0 \quad (4)$$

Bemerkung: (4) ist "verallgemeinertes Eigenwertproblem", denn
[$\hat{T}^{-1}$ (4) bringt es in die Form eines üblichen Eigenwertproblems: $(\underbrace{\hat{T}^{-1} \hat{V}}_{\hat{M}} - \omega^2 \mathbb{1}) \vec{a} = 0$ (5)]

Wir erwarten 3 Eigenwerte $\omega_{(i)}^2$, $i=1,2,3$ mit dazugehörigen Eigenvektoren $\vec{a}_{(i)}$.

Lsg. mit $\vec{a} \neq 0$ existieren nur, falls Matrix

nicht invertierbar ist:

$$\Rightarrow 0 = \det(\hat{V} - \omega^2 \hat{T}) = \text{Polynom d. Ordnung 3 in } \omega^2 \quad (6)$$

Explizit:

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

(1)

KSchem 5b

für $m_1 = m_3 = m$,
 $m_2 = M$:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix}$$

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

$$= (k - \omega^2 m) \left[(2k - \omega^2 M)(k - \omega^2 m) - k^2 - k^2 \right] \quad (3)$$

$$\left(\text{Polynom d. Ordnung 3 in } \omega^2 \right) = \underbrace{(k - \omega^2 m)}_{\omega^2} \omega^2 \left[\omega^2 m M - k(2m + M) \right] \quad (4)$$

3 Lsg. von (4) liefern Eigenwerte:

$$\Rightarrow \omega_{(1)}^2 = 0 \quad (5a)$$

$$\Rightarrow \omega_{(2)}^2 = k/m \quad (5b)$$

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

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

(1)

KSchem 6

Dazugehörigen Eigenvektoren = "Normalmoden", $\vec{a}^{(k)}$ für $\omega_{(k)}$ (2)

$$\text{Eigenwertbedingung (5a.4): } (\hat{V} - \omega_{(k)}^2 \hat{T}) \vec{a}^{(k)} = 0 \quad (3)$$

Einfache Rechnung (siehe S.7) liefert:

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

Check:

z.B. für $\omega_{(1)} = 0$:

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

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

KSchw 7

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

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

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

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

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

KSchw 8

Check:

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

Ende Einwurf

Was ist allgemeine Lsg v. (4.5)?

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

① KSchw 9

Wir brauchen 6 unabhängige Integrationskonstanten!

$$p \vec{a} e^{-i\omega t} + q \vec{a} e^{i\omega t} = c \cos(\omega t + \phi)$$

1. Versuch:

$$\vec{x}(t) = \sum_{k=1}^3 c^{(k)} \vec{a}^{(k)} \cos(\omega_k t + \phi^{(k)}) \quad (2)$$

$$[k=1: c^{(1)} \cos(0 \cdot t + \phi^{(1)}) = c^{(1)} \cos \phi^{(1)}]$$

Aber:

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

2. Versuch:

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

$$\vec{x}(t=0), \dot{\vec{x}}(t=0)$$

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

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

Allgemeine Lösung: $\vec{x}(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (a_1 t + b_1) + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} A_2 \cos(\omega_2 t + \alpha_2)$

KSchw 10

$$+ \begin{pmatrix} -2m/M \\ 1 \end{pmatrix} A_3 \cos(\omega_3 t + \alpha_3)$$

Visualisierung der drei Eigenschwingungen:

