II.7 Normalschwingungen

gegeben: System N Massenpunkten
unter Einfluss konservativer Kräfte
und holonom-skleronome Zwangsbedingungen

⟹ Es gibt Potential $V(\underline{r}_1, \ldots, \underline{r}_N)$
und die Transformationsgleichungen $\underline{r}_i = \underline{r}_i(\{q_k\})$
enthalten keine explizite Zeitabhängigkeit

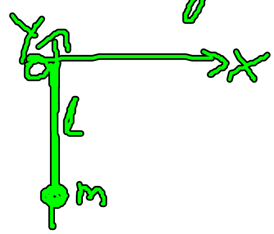
Satz der generalisierten Koordinaten $k=1,\ldots,f$

Annahme: Es gibt eine Gleichgewichtskonfiguration
beschrieben durch $q_1^\circ, q_2^\circ, \ldots, q_f^\circ$

Gleichgewicht: Hier ~~der~~ verschwinden die
generalisierten Kräfte: $Q_k\Big|_{\{q_k^\circ\}} = -\dfrac{\partial V}{\partial q_k}\Big|_{\{q_k^\circ\}} = 0$

anders ausgedrückt: Im Gleichgewicht
wird das Potential extremal

stabiles Gleichgewicht
⟺ kleine Auslenkungen aus der
Gleichgewichtskonfiguration (Ruhelage)
führen wieder ins Gleichgewicht

Pendel 

(instabiles Gleichgewicht: „Ei, das auf dem Kopf steht"
kleine Auslenkung führen aus dem
Gleichgewicht heraus

Wir interessieren uns jetzt für die Dynamik des Gesamtsystems in der <u>Nähe</u> der Gleichgewichtskonfiguration $\{q_k^0\}$ ⟵ Anwendung: Gitterschwingungen

$\Rightarrow$ Entwickle V um die Gleichgewichtslage

sei $\Delta q_k = q_k - q_k^0$ kleine Auslenkung

$$\rightarrow V(q_1, \dots, q_f) = V(\{q_k^0\}) + \sum_{k=1}^{f} \frac{\partial V}{\partial q_k}\bigg|_{\{q_k^0\}} \Delta q_k + \frac{1}{2}\sum_{k,l} \frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_l}\bigg|_{\{q_k^0\}} \Delta q_k \Delta q_l$$

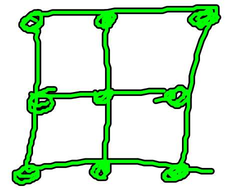
$+$ Terme höherer Ordnung

- setze $V(\{q_k^0\}) = 0$ (da Konstanten keine Rolle für die Dynamik spielen)
- Lineare Term: verschwindet, da nach Voraussetzung $Q_k = -\frac{\partial V}{\partial q_k} = 0$ im Gleichgewicht

$$\Rightarrow V(q_1, \dots, q_f) = \frac{1}{2}\sum_{k,l} \frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_l}\bigg|_{\{q_k^0\}} \Delta q_k \Delta q_l \cancel{+ \mathcal{O}((\Delta q)^3)}$$

Gitterschwingungen:

Atome sind an die Plätze des Kristallgitters „gebunden";



sie schwingen aber aufgrund von thermischer Energie etwas um die Plätze herum

---

stabiles Gleichgewicht: Die Matrix $V_{kl} = \frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_l}\Big|_{\{q_k^0\}}$ muß positiv definit sein

Konstruiere die volle Lagrangefunktion

$L = T - V$

betrachte jetzt die kinetische Energie

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} m_i \underline{v}_i^2 \quad \text{mit} \quad \underline{v}_i = \dot{\underline{r}}_i = \frac{d}{dt} \underline{r}_i(q_1, \dots, q_f)$$

$$\Rightarrow \dot{\underline{r}}_i = \sum_{k=1}^{f} \frac{\partial \underline{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k$$

$$\Rightarrow T = \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i}{2} \sum_{k,l} \frac{\partial r_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial r_i}{\partial q_l} \dot{q}_k \dot{q}_l$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k,l} \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{N} m_i \frac{\partial r_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial r_i}{\partial q_l} \right)} \dot{q}_k \dot{q}_l$$

Matrix, die im Prinzip noch von q_k und q_l abhängt

Für kleine Auslenkungen kann man die Klammer (...) durch ihren Wert an der Stelle $\{q_k^0\}$ ersetzen

$$T_{kl} = \sum_{i=1}^{N} m_i \left.\frac{\partial r_i}{\partial q_k}\right|_{\{q_k^0\}} \cdot \left.\frac{\partial r_i}{\partial q_l}\right|_{\{q_k^0\}}$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{2} \sum_{k,l} T_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l$$

benutze noch: $\dot{q}_k = \Delta\dot{q}_k$

weil $\Delta q_k = q_k - q_k^0$

und $\frac{d}{dt} q_k^0 = 0$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{2} \sum_{k,l} T_{kl} \Delta\dot{q}_k \Delta\dot{q}_l$$

Lagrangefunktion:

$$L = T - V = \frac{1}{2} \sum_{k,l} \left(T_{kl} \Delta\dot{q}_k \Delta\dot{q}_l - V_{kl} \Delta q_k \Delta q_l \right)$$

quadratisch in den generalisierte Geschwindigkeiten $\Delta\dot{q}_k$ bzw $\dot{q}_k$ und in den Koordinaten

Lagrange-Gleichungen 2. Art: $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_m} - \frac{\partial L}{\partial q_m} = 0 \quad \forall m=1,...,f$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_m} = \frac{1}{2}\sum_{kl} T_{kl}\left(\delta_{km}\Delta\dot{q}_l + \Delta\dot{q}_k\delta_{ml}\right)$$

benutze $\Delta\dot{q}_k = \dot{q}_k$

$$= \frac{1}{2}\sum_l T_{ml}\Delta\dot{q}_l + \frac{1}{2}\sum_k T_{km}\Delta\dot{q}_k$$

$$= \sum_k T_{km}\Delta\dot{q}_k$$

analog: $\displaystyle\frac{\partial L}{\partial q_m} = -\sum_{k=1}^{f} V_{km}\Delta q_k$

$\Rightarrow$ Lagrange-Gleichungen:

$$\boxed{\sum_{k=1}^{f}\left(T_{mk}\Delta\ddot{q}_k + V_{mk}\Delta q_k\right) = 0} \quad \forall m=1,\dots,f$$

Das ist ein System von f gekoppelten Differentialgleichungen für die Funktionen $\Delta q_k(t)$!

Ziel: Entkopplung durch Einführung von Normalschwingungen

benutze dazu:

Lagrange-Gleichungen 2. Art sind linear
$\underbrace{}_{\text{für dieses System}}$

$\Rightarrow$ Lösungsansatz $\Delta q_k(t) = A_k e^{i\omega t}$

Amplitude, i.A. komplex

es folgt: $\Delta \dot{q}_k(t) = -i\omega A_k e^{i\omega t} = -i\omega \Delta q_k(t)$

$\Delta \ddot{q}_k(t) = -\omega^2 \Delta q_k(t)$

Einsetzen in die Lagrange-Gleichungen:

$$\sum_k \underbrace{(V_{mk} - \omega^2 T_{mk})}_{f \times f \text{ Matrix}} A_k = 0$$

aus der Linearen Algebra:

Eine nicht-triviale Lösung dieses Gleichungssystems existiert nur, falls

$$\det(V_{mk} - \omega^2 T_{mk}) = 0$$

bei gegebenen Matrizen V_{mk} und T_{mk} ist dies eine Gleichung f-ten Grades für ω^2

$\Rightarrow$ Die f positiven Lösungen ω_α nennt man „Eigenfrequenzen"

Für bekannte ω_α kann man dann die ~~Größen~~ Koeffizienten $A_k^{(\alpha)}$ bestimmen

$\rightarrow$ Eigenvektoren $\left(\begin{array}{l} k=1,\dots,f \\ \alpha=1,\dots,f \end{array}\right)$

Einführung von Normalkoordinaten

Zeige zunächst: Die Größen $A_k^{(\alpha)}$ diagonalisieren sowohl die Matrix T_{mk} ~~und~~ als auch die Matrix V_{mk}

Betrachte dazu die BWGL für 2 verschiedene Eigenfrequenzen

$$1)\ \sum_k \left(V_{mk} - \omega_p^2 T_{mk}\right) A_k^{(p)} = 0 \qquad p,q = 1,\dots,f$$

$$2)\ \sum_m \left(V_{km} - \omega_q^2 T_{km}\right) A_m^{(q)} = 0$$

~~[illegible]~~ multipliziere 1) mit $A_m^{(q)}$ und summiere über m

" 2) " $A_k^{(p)}$ und summiere über k

Subtrahiere:

$$\Rightarrow \sum_{k,m} \overbrace{\left(V_{mk} - V_{km}\right)}^{0} A_k^{(p)} A_m^{(q)} - \omega_p^2 T_{mk} A_k^{(p)} A_m^{(q)} + \omega_q^2 T_{km} A_m^{(q)} A_k^{(p)} = 0$$

benutze: $V_{mk} = \frac{\partial^2 V}{\partial q_m \partial q_k}\Big|_{\{q_n^0\}} = V_{km}$ in den relevanten Fälle!

benutze $T_{km} = T_{mk}$

$$\Rightarrow (\omega_p^2 - \omega_q^2) \sum_{k,m} T_{km} A_k^{(p)} A_m^{(q)} = 0$$

Wenn also $\omega_p \neq \omega_q$

$$\Rightarrow \sum_{km} A_k^{(p)} T_{km} A_m^{(q)} = \delta_{pq} \; !$$

ebenso findet man:

$$\sum_{mk} A_m^{(q)} V_{mk} A_k^{(p)} = \omega_p^2 \delta_{pq}$$

$\Rightarrow$ Die Größen $A_k^{(p)}$ diagonalisieren sowohl $\underline{\underline{V}}$ (Matrix) als auch $\underline{\underline{T}}$

neuer Ansatz für die Auslenkung $\Delta q_k(t)$

$$\Delta q_k(t) = \sum_{p=1}^{f} A_k^{(p)} Q_p(t)$$

Normalschwingungen

Formuliere damit die Lagrangefunktion

$$L = T - V = \frac{1}{2} \sum_{k,l} \Big(T_{kl} \, \Delta\dot{q}_k \, \dot{\Delta}_l$$

$$- V_{kl}\, \Delta q_k \Delta_l \Big)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k,l} \Big(T_{kl} \sum_{p,q} A_k^{(p)} A_l^{(q)} \dot{Q}_p(t) \dot{Q}_l(t)$$

$$- V_{kl} \sum_{p,q} A_k^{(p)} A_l^{(q)} Q_p(t) Q_l(t) \Big)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{p,q} \Big[\underbrace{\Big(\sum_{k,l} A_k^{(p)} T_{kl} A_l^{(q)} \Big)}_{\delta_{pq}} \dot{Q}_p(t) \dot{Q}_l(t) - \underbrace{\Big(\sum_{k,l} A_k^{(p)} V_{kl} A_l^{(q)} \Big)}_{\omega_p^2 \delta_{p,q}} Q_p(t) Q_l(t) \Big]$$

$$\Rightarrow L = \frac{1}{2} \sum_p \Big((\dot{Q}_p(t))^2 - \omega_p^2 (Q_p(t))^2 \Big)$$

Zugehörige Lagrange-Gleichung 2. Art

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial Q_\alpha} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\ddot{Q}_\alpha + \omega_\alpha^2 Q_\alpha = 0} \qquad \alpha = 1, \dots, f$$

entkoppelte Bewegungsgleichungen!

Jeder ist die eines harmonischen Oszillators!