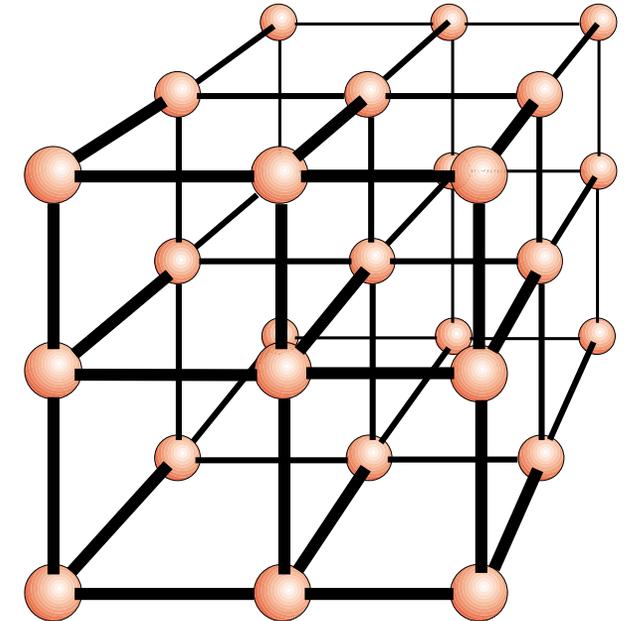


## 2.1.11. Gekoppelte harmonische Oszillatoren

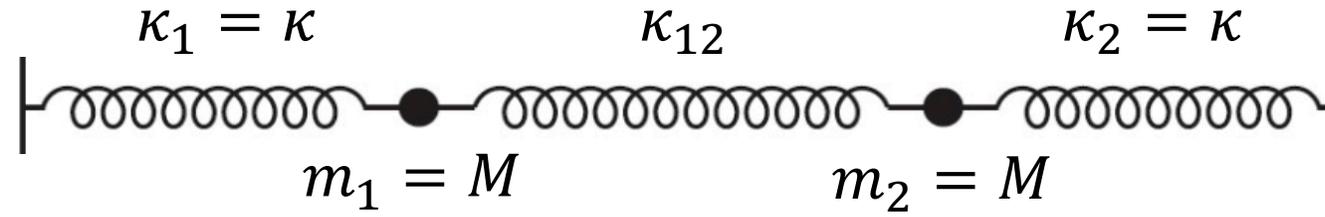
- Gekoppelte Oszillatoren sind Oszillatoren, die so verbunden sind, dass Energie zwischen ihnen übertragen werden kann.
- Viele komplexere physikalische Systeme können phänomenologisch als gekoppelte harmonische Oszillatoren verstanden werden.
- In einem Festkörper, zum Beispiel, schwingen Atome um ihre Gleichgewichtspositionen und die Wechselwirkung zwischen den Atomen ist für die Kopplung verantwortlich.



Schwingungsmoden im  
Festkörper?

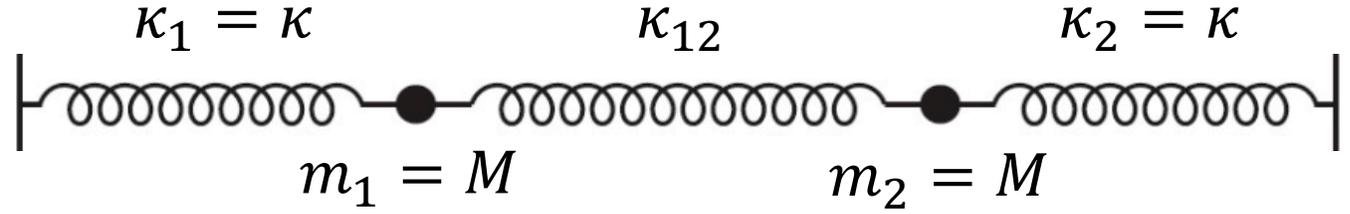
■ Betrachten Problem mit ansteigender Komplexität:

1. Direkte Lösung zweier **identischer** harmonischer Oszillatoren

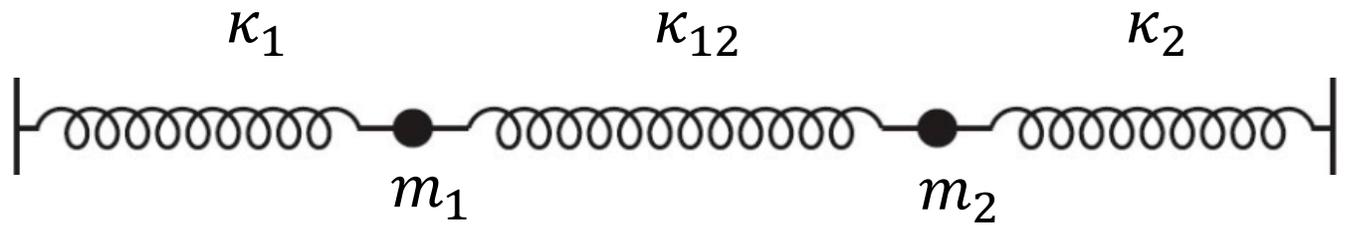


■ Betrachten Problem mit ansteigender Komplexität:

1. Direkte Lösung zweier identischer harmonischer Oszillatoren

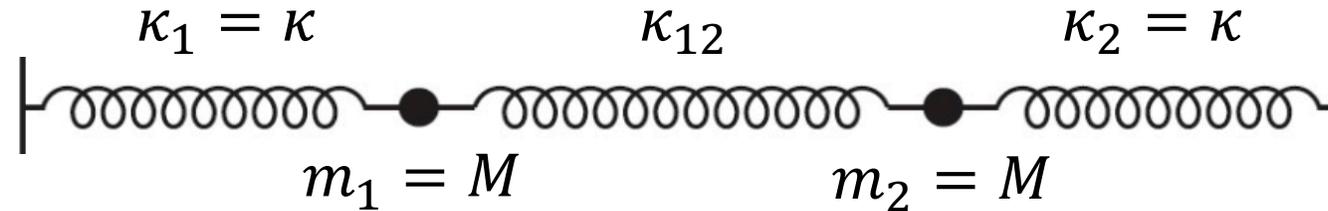


2. Zwei **unterschiedliche** harmonische Oszillatoren als **Eigenwertgleichung**

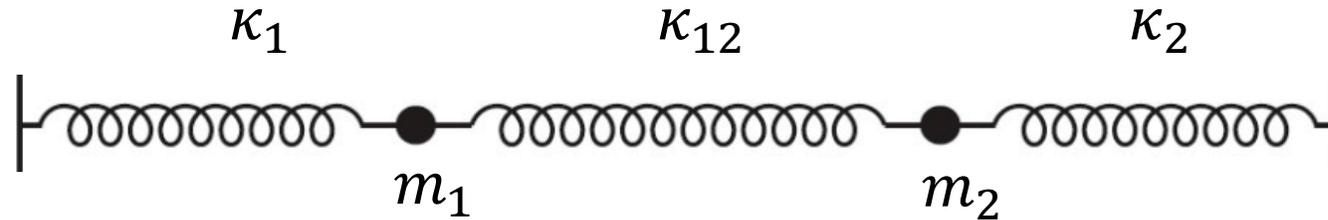


■ Betrachten Problem mit ansteigender Komplexität:

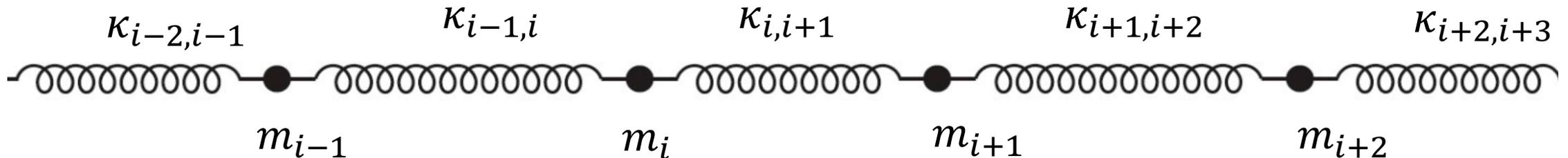
1. Direkte Lösung zweier identischer harmonischer Oszillatoren



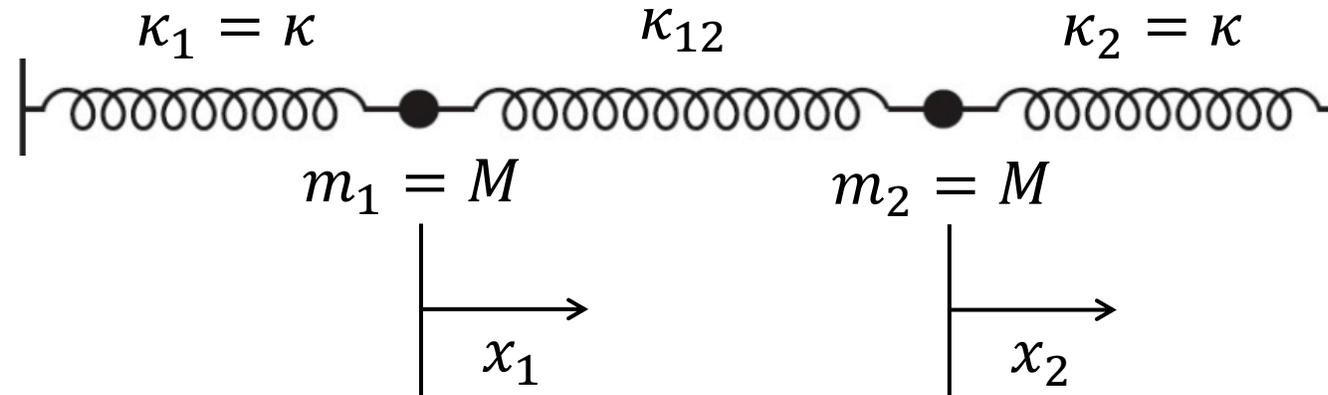
2. Zwei unterschiedliche harmonische Oszillatoren als Eigenwertgleichung



3. Beliebige **viele harmonische Oszillatoren** als Eigenwertgleichung



## 2.1.11.1 Zwei identische gekoppelte harmonische Oszillatoren



- Wenn die Teilchen im Gleichgewicht ( $x_1 = x_2 = 0$ ) sind, wirkt keine Kraft auf sie.
- Bei einer Auslenkung wirkt die folgende Kraft auf jedes der beiden Teilchens:

$$F_1 = -\kappa x_1 + \kappa_{12}(x_2 - x_1) = -(\kappa + \kappa_{12})x_1 + \kappa_{12}x_2 = M\ddot{x}_1$$

$$F_2 = -\kappa x_2 + \kappa_{12}(x_1 - x_2) = -(\kappa + \kappa_{12})x_2 + \kappa_{12}x_1 = M\ddot{x}_2$$

- Daraus ergeben sich die folgenden Bewegungsgleichungen

$$M\ddot{x}_1 + (\kappa + \kappa_{12})x_1 - \kappa_{12}x_2 = 0$$

$$M\ddot{x}_2 + (\kappa + \kappa_{12})x_2 - \kappa_{12}x_1 = 0$$

- Vernünftigerweise ist anzunehmen, dass die **resultierende Bewegung ein oszillierendes Verhalten** hat. Betrachten daher folgende Ansatzfunktion:

$$x_1(t) = B_1 e^{i\omega t}$$

$$x_2(t) = B_2 e^{i\omega t}$$

- Einsetzen dieses Ansatzes in die Bewegungsgleichungen liefert

$$(\kappa + \kappa_{12} - M\omega^2)B_1 - \kappa_{12}B_2 = 0$$

$$-\kappa_{12}B_1 + (\kappa + \kappa_{12} - M\omega^2)B_2 = 0$$

- Wir stellen die zweite Gleichung nach  $B_1$  um

$$B_1 = \frac{(\kappa + \kappa_{12} - M\omega^2)}{\kappa_{12}} B_2$$

- und setzen diese in die erste Gleichung ein

$$[(\kappa + \kappa_{12} - M\omega^2)(\kappa + \kappa_{12} - M\omega^2) - \kappa_{12}^2]B_2 = 0$$

Für eine nichttriviale Lösung ( $B_2 \neq 0$ ), muss der Klammerausdruck verschwinden!

- Lösungen für die charakteristischen Frequenzen (auch Eigenfrequenzen genannt) sind:

$$\omega_1 = \pm \sqrt{\frac{\kappa + 2\kappa_{12}}{M}} \quad \text{und} \quad \omega_2 = \pm \sqrt{\frac{\kappa}{M}}$$

- Für diese beiden Frequenzen können wir nun die Amplitudenverhältnisse ausrechnen:

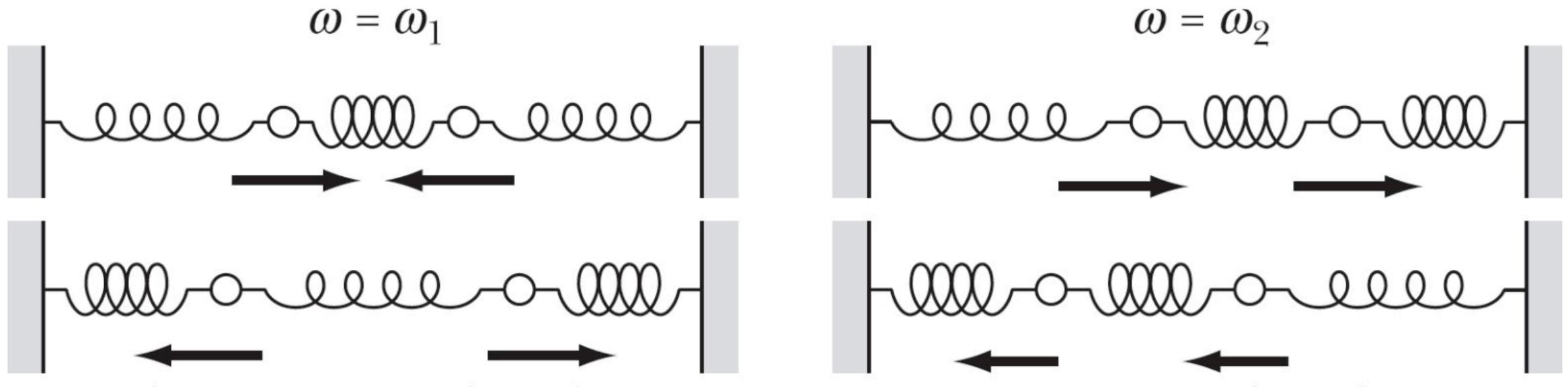
- Für  $\omega_1$ :  $(\kappa + \kappa_{12} - (\kappa + 2\kappa_{12}))B_1 - \kappa_{12}B_2 = -\kappa_{12}B_1 - \kappa_{12}B_2 = -\kappa_{12}(B_1 + B_2) = 0$   
 $\rightarrow B_1 = -B_2$

- Für  $\omega_2$ :  $(\kappa + \kappa_{12} - \kappa)B_1 - \kappa_{12}B_2 = \kappa_{12}B_1 - \kappa_{12}B_2 = \kappa_{12}(B_1 - B_2) = 0$   
 $\rightarrow B_1 = B_2$

■ Allgemeine Lösung:

$$x_1(t) = B_1^+ e^{i\omega_1 t} + B_1^- e^{-i\omega_1 t} + B_2^+ e^{i\omega_2 t} + B_2^- e^{-i\omega_2 t}$$

$$x_2(t) = -B_1^+ e^{i\omega_1 t} - B_1^- e^{-i\omega_1 t} + B_2^+ e^{i\omega_2 t} + B_2^- e^{-i\omega_2 t}$$



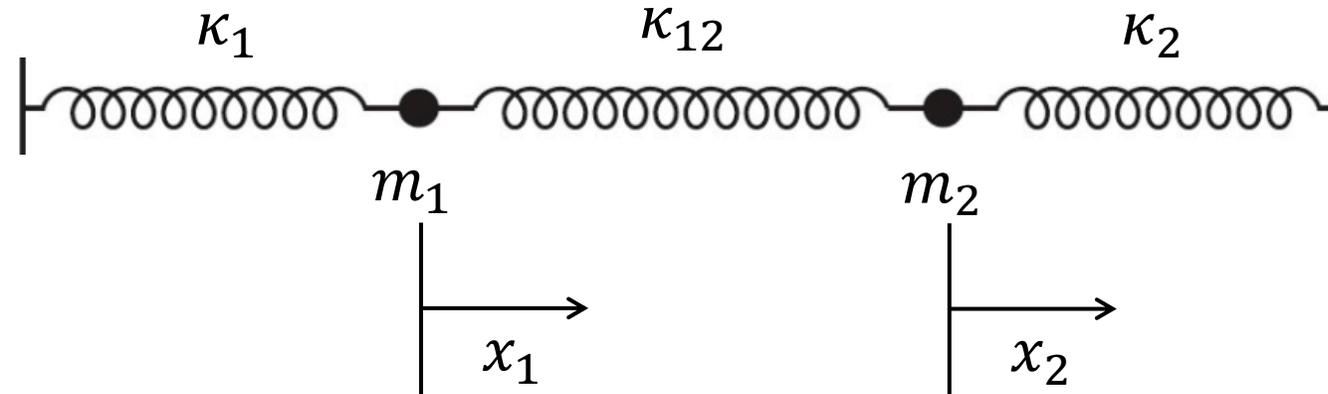
antisymmetrischer Mode

symmetrischer Mode

Anregung außer Phase

Anregung in Phase

## 2.1.11.2 Zwei unterschiedliche gekoppelte harmonische Oszillatoren



- Wenn die Teilchen im Gleichgewicht ( $x_1 = x_2 = 0$ ) sind, wirkt keine Kraft auf sie.
- Bei einer Auslenkung wirkt die folgende Kraft auf jedes der beiden Teilchens:

$$F_1 = -\kappa_1 x_1 + \kappa_{12}(x_2 - x_1) = -(\kappa_1 + \kappa_{12})x_1 + \kappa_{12}x_2 = m_1 \ddot{x}_1$$

$$F_2 = -\kappa_2 x_2 + \kappa_{12}(x_1 - x_2) = -(\kappa_2 + \kappa_{12})x_2 + \kappa_{12}x_1 = m_2 \ddot{x}_2$$

- Wir verwenden wieder einen zeitharmonischen Ansatz für jede Amplitude

$$x_1(t) = B_1 e^{i\omega t} \text{ und } x_2(t) = B_2 e^{i\omega t}$$

- Dann schreiben wir das Gleichungssystem wieder wie folgt auf:

$$-(\kappa_1 + \kappa_{12})B_1 + \kappa_{12}B_2 = -m_1\omega^2 B_1$$

$$-(\kappa_2 + \kappa_{12})B_2 + \kappa_{12}B_1 = -m_2\omega^2 B_2$$

- Wir überführen diese Gleichung in eine **kompakte Matrixnotation**.

- Dafür führen wir einen Vektor für die Verschiebung ein:  $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}$

- Und wir können die Bewegungsgleichung schreiben als

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \frac{-\kappa_1 - \kappa_{12}}{m_1} & \frac{\kappa_{12}}{m_1} \\ \frac{\kappa_{12}}{m_2} & \frac{-\kappa_2 - \kappa_{12}}{m_2} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{B} = -\omega^2 \mathbf{B}$$

Derartige Probleme bezeichnet man als **Eigenwertprobleme**.

# 16. Eigenwertgleichungen

- Eine Matrix  $\mathbf{A}$  der Größe  $n \times n$  hat allgemein  $n$  komplexe oder reelle Eigenwerte  $\lambda_i$ . Diese sind assoziiert mit  $n$  Eigenvektoren  $\mathbf{v}_i$ . Diese erfüllen die Eigenwertgleichung

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$$

- Linke Seite: Matrix-Vektor Produkt. Rechte Seite: Produkt eines Vektors mit Skalar.
- Der Vektor soll unterschiedlich sein zum Nullvektor.
- Matrix-Vektor-Produkt reproduziert den Vektor, der skaliert wird um den Eigenwert.
- Symmetrische Matrizen haben reelle Eigenwert:  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$  ( $a_{ij} = a_{ji}$ )

Viele Anwendungen, besonders in der Quantenmechanik!

- Zur Lösung dieser Eigenwertgleichung formulieren wir diese wie folgt um:

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbb{I}) \cdot \mathbf{v} = 0$$

- Hierbei ist  $\mathbb{I}$  die Einheitsmatrix, bei der auf der Diagonalen Einsen stehen und ansonsten Nullen. Zum Beispiel für  $n = 3$

$$\mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- Im folgenden diskutieren wir die Eigenschaften der Matrix  $(\mathbf{A} - \lambda \mathbb{I})$

- Für die meisten Werte von  $\lambda$ , können wir die inverse dieser Matrix bestimmen. Die Matrix ist dann regulär. Es gilt für eine Matrix  $\mathbf{M}$  multipliziert mit der inversen  $\mathbf{M}^{-1}$  :

$$\mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{M} = \mathbb{1}$$

- Wenn wir das umformulierte Eigenwertproblem mit dessen inverser Matrix multiplizieren, erhalten wir die triviale Lösung

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbb{1})^{-1} \cdot (\mathbf{A} - \lambda \mathbb{1}) \cdot \mathbf{v} = \mathbb{1} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v} = 0$$

- Wir suchen aber **nichttriviale Lösungen**.
- Wann hat eine Matrix keine Inverse, sie singular ist? Aus linearer Algebra ist bekannt, dass **eine Matrix nicht invertierbar ist, wenn ihre Determinante verschwindet!**

- Die Gleichung  $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbb{I}) = 0$  ist eine algebraische Gleichung mit den Eigenwerten  $\lambda_i$  als Lösung. Die Gleichung ist ein Polynom  $n$ 'ten Grades. Sie wird als das charakteristische Polynom bezeichnet.
- Berechnung einer Determinante:

- 2x2 Matrix: 
$$\det \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix} = ad - bc$$

- 3x3 Matrix: 
$$\det \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = a(ei - fh) - b(di - fg) + c(dh - eg)$$

Für größere Matrizen benutzen Sie besser den Rechner.

- Die Eigenvektoren berechnen Sie dann aus dem entsprechenden Gleichungssystem

$$(\mathbf{A} - \lambda_i \mathbb{I}) \cdot \mathbf{v}_i = 0$$

- Die Komponenten des Vektors  $\mathbf{v}_i$  können Sie dann mit Hilfe der  $n$ -Gleichungen lösen, die dieser Ausdruck darstellen. Zum Beispiel für das Problem mit  $n = 2$

$$(A_{11} + \lambda_1)v_1^1 + A_{12}v_1^2 = 0$$

$$(A_{22} + \lambda_2)v_2^2 + A_{21}v_2^1 = 0$$

- Berechnen wir die Eigenwerte der Matrix der Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} 0 = \det(\mathbf{M} + \omega^2 \mathbb{1}) &= \det \begin{pmatrix} \frac{-\kappa_1 - \kappa_{12}}{m_1} + \omega^2 & \frac{\kappa_{12}}{m_1} \\ \frac{\kappa_{12}}{m_2} & \frac{-\kappa_2 - \kappa_{12}}{m_2} + \omega^2 \end{pmatrix} \\ &= \left( \frac{-\kappa_1 - \kappa_{12}}{m_1} + \omega^2 \right) \left( \frac{-\kappa_2 - \kappa_{12}}{m_2} + \omega^2 \right) - \frac{\kappa_{12}^2}{m_1 m_2} \end{aligned}$$

Die Lösung wird unansehnlich aber Sie erhalten wieder genau zwei für  $\omega^2$ .

Die zugehörigen Eigenvektoren sind die Amplituden der Schwingungsamplituden der beiden Massen.

- Fürs Protokoll, die Lösungen sind:

$$\omega_1^2 = \frac{1}{2m_1m_2} \left( -\sqrt{(2\kappa_{12}(m_1 - m_2)(\kappa_2m_1 - \kappa_1m_2) + (\kappa_2m_1 - \kappa_1m_2)^2 + \kappa_{12}^2(m_1 + m_2)^2)} + \kappa_1m_2 + \kappa_{12}(m_1 + m_2) + \kappa_2m_1 \right)$$

$$\omega_2^2 = \frac{1}{2m_1m_2} \left( \sqrt{(2\kappa_{12}(m_1 - m_2)(\kappa_2m_1 - \kappa_1m_2) + (\kappa_2m_1 - \kappa_1m_2)^2 + \kappa_{12}^2(m_1 + m_2)^2)} + \kappa_1m_2 + \kappa_{12}(m_1 + m_2) + \kappa_2m_1 \right)$$

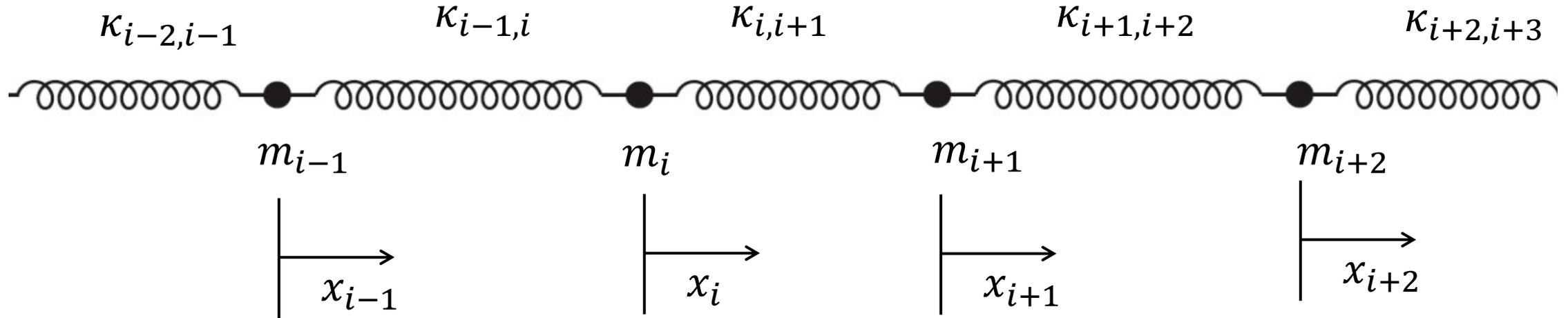
# Jupyter Notebook

- In diesem Beispiel demonstrieren wir, einige Aspekte gekoppelter harmonischer Oszillatoren, die analytisch nicht mehr leicht zu fassen sind.

- Die Kopplung in einem System mit zwei Freiheitsgraden führt zu zwei charakteristischen Frequenzen.
- Die beiden charakteristischen Frequenzen in einem System mit zwei Freiheitsgraden werden im Vergleich zur nicht gekoppelten Frequenz zu niedrigeren und höheren Energien verschoben.

Wir sprechen hier von einer Hybridisierung. In der physikalischen Literatur wird dieses Phänomen mit verschiedenen Worten diskutiert. Man spricht von Renormierung, *dressed states*, symmetrische und antisymmetrische Moden, oder *bonding and antibonding states*.

## 2.1.11.3 Beliebige viele harmonische Oszillatoren



- Bei einer Auslenkung wirkt die folgende Kraft auf jedes Teilchen im allgemeinsten Fall:

$$F_i = -\kappa_i x_i + \sum_{j \neq i} \kappa_{ij} x_j = \sum_j \kappa_{ij} x_j = m_i \ddot{x}_i$$

- Erster Term. in die Ruhelage jeden einzelnen Teilchens bei Auslenkung. Zweiter Term: zusätzliche Kraft die bei Auslenkung eines anderen Teilchens wirkt.
- Beachte Sie bitte, dass viele dieser  $\kappa_i$  und auch der  $\kappa_{ij}$  null sein können und werden.

- Wir verwenden wieder einen zeitharmonischen Ansatz für jede Amplitude

$$x_i(t) = B_i e^{i\omega t}$$

- Dann schreiben wir für jeden einzelnen Oszillator die folgende Bewegungsgleichung im Fourierraum auf:

$$-\kappa_i B_i + \sum_{j \neq i} \kappa_{ij} B_j = \sum_j \kappa_{ij} B_j = -m_i \omega^2 B_i$$

- Beispiel für drei gekoppelte Oszillatoren:

$$\begin{aligned}\frac{\kappa_{11}}{m_1} B_1 + \frac{\kappa_{12}}{m_1} B_2 + \frac{\kappa_{13}}{m_1} B_3 &= -\omega^2 B_1 \\ \frac{\kappa_{21}}{m_2} B_1 + \frac{\kappa_{22}}{m_2} B_2 + \frac{\kappa_{23}}{m_2} B_3 &= -\omega^2 B_2 \\ \frac{\kappa_{31}}{m_3} B_1 + \frac{\kappa_{32}}{m_3} B_2 + \frac{\kappa_{33}}{m_3} B_3 &= -\omega^2 B_3\end{aligned}$$

- Dieses Gleichungssystem können wir wieder als Eigenwertproblem formulieren

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \frac{\kappa_{11}}{m_1} & \frac{\kappa_{12}}{m_1} & \frac{\kappa_{13}}{m_1} \\ \frac{\kappa_{21}}{m_2} & \frac{\kappa_{22}}{m_2} & \frac{\kappa_{23}}{m_2} \\ \frac{\kappa_{31}}{m_3} & \frac{\kappa_{32}}{m_3} & \frac{\kappa_{33}}{m_3} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{B} = -\omega^2 \mathbf{B}$$

- Für beliebig viele Oszillatoren wird dieses Gleichungssystem beliebig groß. Aber die Struktur bleibt immer erhalten.
- Die Kopplung in einem System mit  $N$  Freiheitsgraden führt zu  $N$  charakteristischen Frequenzen.
- Die damit verbundenen Anregungen sind linear unabhängig. Man spricht hier von Moden und die relative Amplitude der Auslenkung eines jeden einzelnen Teilchen in einer Mode ist gerade die Information im dazugehörenden Eigenvektor.
- Die Eigenmoden sind orthogonal zueinander und normiert:

$$\mathbf{B}_i \cdot \mathbf{B}_j = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

- Eine beliebige Anregung der gekoppelten harmonischen Oszillatoren kann man dann immer als eine Superposition der Eigenmoden beschreiben, gewichtet mit einer konkreten Amplitude, die von den Anfangsbedingungen abhängt:

$$\mathbf{x}(t) = \sum_i a_i \mathbf{B}_i e^{i\omega_i t}$$

- Hierbei ist  $\mathbf{x}(t)$  ein Vektor, der die Auslenkung jedes einzelnen Teilchens aus seiner Ruhelage beschreibt.