1 **a)** Lagrangefunktion:

$$\mathcal{L}(u_k, \dot{u}_k) = \frac{1}{2}m(\dot{u}_1^2 + \dot{u}_3^2) + \frac{1}{2}M\,\dot{u}_2^2 - \underbrace{\frac{1}{2}C[\,(u_2-u_1)^2 + (u_3-u_2)^2\,]}_{=V(u_1,u_2,u_3)}$$

Impulse: $p_k = \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_k} = m_k\,\dot{u}_k \quad \Rightarrow$ Hamiltonfunktion:

$$\mathcal{H}(u_k, p_k) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2M} + \frac{p_3^2}{2m} + V(u_1,u_2,u_3)$$

Bewegungsgleichung: Über Lagrange,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_k} = -\frac{\partial V}{\partial u_k}$$

ergibt sich

$$\boxed{\begin{array}{ccccc} \ddot{u}_1 & + & \frac{C}{m}(u_1-u_2) & = & 0 \\ \ddot{u}_2 & + & \frac{C}{M}(2u_2-u_1-u_3) & = & 0 \\ \ddot{u}_3 & + & \frac{C}{m}(u_3-u_2) & = & 0 \end{array}} \tag{1}$$

b) Wie üblich (Theorie A) bestimmen wir die Lösung zunächst im Komplexen und bilden hinterher den Realteil. Ansatz

$$u_k(t) = \frac{1}{\sqrt{m_k}}\,a_k\,e^{-i\omega t} \quad \Rightarrow \quad \ddot{u}_k = -\frac{1}{\sqrt{m_k}}\,a_k\,\omega^2\,e^{-i\omega t} \tag{2}$$

mit $m_1 = m_3 = m\,,\ m_2 = M$. Die a_k sind also komplex, ω eigentlich auch, es werden aber nur reelle ω herauskommen. Für die Rechnung spielt es zunächst keine Rolle, ob a_k komplex ist oder nicht.

Den Ansatz in (1) einsetzen und die drei Zeilen mit $\sqrt{m}$, $\sqrt{M}$, $\sqrt{m}$ durchmultiplizieren ergibt

$$\begin{aligned} a_1\,\omega^2 &= \tfrac{C}{m}a_1 - \tfrac{C}{\sqrt{m\,M}}a_2 \\ a_2\,\omega^2 &= 2\tfrac{C}{M}a_2 - \tfrac{C}{\sqrt{m\,M}}(a_1+a_3) \\ a_3\,\omega^2 &= \tfrac{C}{m}a_3 - \tfrac{C}{\sqrt{m\,M}}a_2 \end{aligned}$$

Dies läßt sich in Matrixform schreiben,

$$\boxed{\begin{pmatrix} k^2 & -kK & 0 \\ -kK & 2K^2 & -kK \\ 0 & -kK & k^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \omega^2\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \qquad \text{mit} \qquad k = \sqrt{\frac{C}{m}}\,,\quad K = \sqrt{\frac{C}{M}}} \tag{3}$$

Dies ist eine Eigenwertgleichung der Form $\mathbf{D}\,\mathbf{a} = \lambda\,\mathbf{a}$ bzw. ein homogenes Gleichungssystem $(\mathbf{D} - \lambda\,\mathbf{1})\mathbf{a} = 0$. Aus der Bedingung für eine nichttriviale Lösung $\mathbf{a}$,

$$\det(\mathbf{D} - \lambda\,\mathbf{1}) = \det\begin{pmatrix} (k^2-\lambda) & -kK & 0 \\ -kK & (2K^2-\lambda) & -kK \\ 0 & -kK & (k^2-\lambda) \end{pmatrix} = 0$$

ergeben sich die Eigenwerte $\boxed{\lambda \equiv \omega^2}$ und damit die möglichen Eigenfrequenzen ω. Aus det()$= 0$ folgt

$$(k^2-\lambda)^2(2K^2-\lambda) - 2k^2K^2(k^2-\lambda) = 0 \quad \Rightarrow \quad (k^2-\lambda)[\,\lambda^2 - \lambda(k^2+2K^2)\,] = 0$$

Diese Gleichung hat drei Lösungen, die drei Eigenwerte

$$\lambda_1 = k^2 \;\;,\quad \lambda_0 = 0 \;\;,\quad \lambda_2 = k^2 + 2K^2$$

Die Amplituden a_k werden nun durch Lösen des Gleichungssystems (3) für jedes λ bestimmt, was die Eigenvektoren der Matrix $\mathbf{D}$ bestimmt:

$\underline{\lambda_0 = 0 \;\rightarrow\; \omega = 0}$: Gl. (3) hat die Lösung

$$a_1 = \frac{K}{k}a_2 \;\;,\quad a_3 = \frac{K}{k}a_2$$

wobei a_2 unbestimmt bleibt. Der Eigenvektor und die zugehörige Lösung lauten also

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} K/k \\ 1 \\ K/k \end{pmatrix}\mathbf{a}_2 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{u}(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{m}}\frac{K}{k} \\ \frac{1}{\sqrt{M}} \\ \frac{1}{\sqrt{m}}\frac{K}{k} \end{pmatrix} a_2 = \frac{1}{\sqrt{M}}a_2\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv A_0\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Diese “Mode” korrespondiert offenbar zu einem ruhenden Molekül, die Integrationskonstante $\mathrm{Re}(A_0)$ (siehe unten) bestimmt die Position auf der x-Achse.

$\underline{\lambda_1 = k^2 \;\rightarrow\; \omega_1 = k}$: Gl. (3) hat nun die Lösung

$$a_2 = 0 \;\;,\quad a_1 = -a_3$$

wobei a_1 oder a_3 unbestimmt bleiben. Wenn wir a_3 vorgeben (Integrationskonstante), lauten Eigenvektor und Lösung

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} a_3 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{u}(t) = \frac{1}{\sqrt{m}}a_3\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\omega_1 t} \equiv A_1\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\omega_1 t}$$

Hier schwingen die Außenatome gegenphasig mit gleicher Frequenz, während das Zentralatom in Ruhe bleibt.

$\underline{\lambda_2 = k^2 + 2K^2 \;\rightarrow\; \omega_2 = \sqrt{k^2+2K^2}}$: Gl. (3) hat nun die Lösung

$$a_1 = -\frac{k}{2K}a_2 \;\;,\quad a_3 = -\frac{k}{2K}a_2$$

und a_2 bleibt als Integrationskonstante unbestimmt. Eigenvektor und zugehörige Lösung von (1):

$$\mathbf{a} = a_2 \begin{pmatrix} -\frac{k}{2K} \\ 1 \\ -\frac{k}{2K} \end{pmatrix} \quad \Rightarrow$$

$$\mathbf{u}(t) = a_2 \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{m}}\frac{k}{2K} \\ \frac{1}{\sqrt{M}} \\ -\frac{1}{\sqrt{m}}\frac{k}{2K} \end{pmatrix} e^{-i\omega_2 t} = -\frac{\sqrt{M}}{2m}\, a_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -2\frac{m}{M} \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\omega_2 t} \equiv A_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -2\frac{m}{M} \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\omega_2 t}$$

Hier schwingen die äußeren Atome gleichphasig (mit gleicher Amplitude), und das Zentralatom schwingt dagegen, so daß der Schwerpunkt unverändert bleibt (siehe unten).

c) Die physikalische Lösung ist der Realteil der allgemeinen komplexen Lösung,

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}(\mathbf{u}(t)) &= \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} [\,\mathrm{Re}(A_1)\, \cos(\omega_1 t) + \mathrm{Im}(A_1)\, \sin(\omega_1 t)\,] + \\ &\quad + \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{2m}{M} \\ 1 \end{pmatrix} [\,\mathrm{Re}(A_2)\, \cos(\omega_2 t) + \mathrm{Im}(A_2)\, \sin(\omega_2 t)\,] + \\ &\quad + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \mathrm{Re}(A_0) \qquad \text{mit} \qquad \omega_1 = \sqrt{\frac{C}{m}}\ , \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{C}{m} + \frac{2C}{M}} \end{aligned}$$

Diese besitzt offensichtlich 5 reelle Integrationskonstanten. Die Frequenzen ω_1, ω_2 sind positiv gewählt worden; negative Frequenzen (es war ja $\omega = \pm\sqrt{\lambda}$) führen auf dieselbe Lösung, da das Vorzeichen in die Integrationskonstanten absorbiert werden kann.

Anzahl der Konstanten: Die Bewegungsgleichungen bestehen aus drei DGL 2. Ordnung, also brauchen wir 6 Konstanten, eine fehlt. Im Ansatz (2) fehlt die gleichförmige Bewegung des Schwerpunktes auf der x-Achse. Die Gl.en (1) werden auch gelöst durch

$$\mathbf{u}(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} [\, v_0\, t + u_0\,]$$

Diese Lösung kann man zum Ansatz (2) addieren (genauer: nur für den Fall $\omega = 0$, so daß die Ansätze für verschiedene ω linear unabhängig bleiben). Zu $\mathrm{Re}(A_0) = u_0$ kommt dann die Schwerpunktgeschwindigkeit v_0 als 6. Konstante hinzu. Die vollständige allgemeine Lösung lautet also

$$\boxed{\begin{aligned} \mathrm{Re}(\mathbf{u}(t)) &= \mathbf{e}_1 [\,\mathrm{Re}(A_1)\, \cos(\omega_1 t) + \mathrm{Im}(A_1)\, \sin(\omega_1 t)\,] + \\ &\quad + \mathbf{e}_2 [\,\mathrm{Re}(A_2)\, \cos(\omega_2 t) + \mathrm{Im}(A_2)\, \sin(\omega_2 t)\,] + \\ &\quad + \mathbf{e}_0 [\, v_0\, t + u_0\,] \end{aligned}} \tag{4}$$

mit den “Polarisationsvektoren”

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \;,\quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{2m}{M} \\ 1 \end{pmatrix} \;,\quad \mathbf{e}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Eigenschwingungen: siehe unter b).
Der Schwerpunkt bewegt sich gleichförmig, d.h., die Eigenschwingungen lassen den SP in Ruhe. Test: (4) einsetzen in die SP-Position

$$U(t) = \frac{m(u_1 + u_3) + M\,u_2}{2m + M} = \ldots = v_0\,t + u_0$$

Die Eigenschwingungen als auch die SP-Bewegung können einzeln angeregt werden, indem man geeignete Anfangsbedingungen vorgibt. Hintergrund: die Vektoren $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_0$ sind paarweise linear unabhängig. (Aber nicht orthogonal. Orthogonalität wird aber auch nur von den Eigenvektoren $\{\mathbf{a}\}$ verlangt.)

$\boxed{\mathbf{2}}$ Teilchen in einem Potential:

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} m(\dot{x})^2 - V(x) \quad , \quad \mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

Die Lagrangefunktion ergab sich hier nach dem üblichen Rezept $\mathcal{L} = T - V$. Wenn eine äußere, zeitabhängige Kraft $F(t)$ dazu kommt, muß ein zusätzliches, zeitabhängiges Potential $W(x,t)$ bestimmt werden, das nach Gradientenbildung die äußere Kraft reproduziert,

$$F(t) = -\frac{\partial W(x,t)}{\partial x}$$

In diesem Beispiel äquivalent dazu, aber im allgemeinen sicherer und universeller ist die Vorschrift, die gesamte Lagrangefunktion so zu bestimmen, daß die Lagrange-Gleichung die Newton-Gleichung reproduziert,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \qquad \Leftrightarrow \qquad m\ddot{x} = F_{total}(x,t)$$

Beide Vorgehensweisen führen für die zus. Kraft $F(t)$ auf die Lagrangefunktion

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} m(\dot{x})^2 - V(x) + x\,F(t) \qquad \Rightarrow \qquad \mathcal{H}(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x) - x\,F(t)$$

Wenn die äußere Kraft ihrerseits ortsabhängig ist, ergibt sich

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} m(\dot{x})^2 - V(x) + \int_{x_0}^{x} \mathrm{d}x'\,F(x',t) \qquad \Rightarrow \qquad \mathcal{H}(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x) - \int_{x_0}^{x} \mathrm{d}x'\,F(x',t)$$

Die Konstante x_0 ist beliebig, da sie in der Bewegungsgleichung rausfällt.