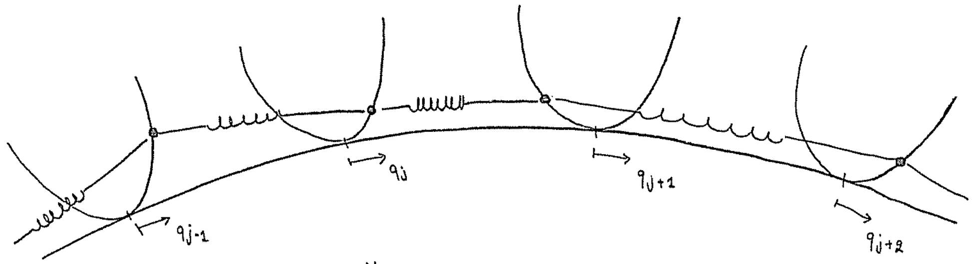
Wie findet man Normalkoordinaten in der Praxis?

Beispiel:



$$V := \sum_{j=1}^{N} \left\{ \tfrac{1}{2}\,\omega_0^2\, q_j^2 + \tfrac{1}{2}\,\omega^2 (q_{j+1} - q_j)^2 \right\}_{q_{N+1} := q_1}$$

Methode: Eine angemessene Methode kann als Spezialfall von Fourier-Analyse (Kap. 3.2-3) gefunden werden. Wir betrachten den Ansatz

$$q_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^{N} e^{ijkr}\, Q_k \quad ; \quad i = \text{Imaginäreinheit}\, ; \quad r \in \mathbb{R}\,.$$

Bestimmung von r:

$$q_{N+1} = q_1 \quad \Rightarrow \quad e^{i(N+1)kr} = e^{ikr} \quad \forall\, k$$

$$\Rightarrow \quad Nkr = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z} \quad \forall\, k$$

$$\Rightarrow \quad \text{wähle } \boxed{r := \frac{2\pi}{N}}\,.$$

Behauptung:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} e^{\frac{2\pi i (j-j')k}{N}} = \begin{cases} 1, & j = j' \mod N \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \qquad \text{„Orthonormierung"}$$

Beweis:

(i) $j = j' \mod N \;\Rightarrow\; \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} 1 = 1\,.$

(ii) $j \neq j' \mod N \;\Rightarrow\; z := e^{\frac{2\pi i (j-j')}{N}} \neq 1\,,$ aber $z^N = 1\,!$

$$\Rightarrow \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} z^k = \frac{1}{N}\left(z + z^2 + \dots + z^N\right) \stackrel{!}{=} \frac{z(1 - \overset{1}{\overbrace{z^N}})}{N(1-z)} = 0 \Rightarrow \square\,.$$

Folgen:

(i)
$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{-\frac{2\pi i j k}{N}}\, q_j = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \sum_{k'=1}^{N} e^{\frac{2\pi i j (k'-k)}{N}}\, Q_{k'}$$

$$= \sum_{k'=1}^{N} \delta_{k', k \bmod N}\, Q_{k'}$$

$$= Q_k \qquad \text{„Inverse Transformation"}$$

(ii)
$$\sum_{j=1}^{N} q_j^2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \sum_{k'=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} e^{\frac{2\pi i j (k+k')}{N}}\, Q_k Q_{k'}$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \sum_{k'=1}^{N} \delta_{k', -k+N}\, Q_k Q_{k'}$$

$$= \sum_{k=1}^{N} Q_k Q_{N-k}$$

(iii)
$$\sum_{j=1}^{N} (q_{j+1} - q_j)^2 = 2 \sum_{j=1}^{N} q_j (q_j - q_{j+1})$$

$$= \frac{2}{N} \sum_{k=1}^{N} \sum_{k'=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} e^{\frac{2\pi i j (k+k')}{N}}\, Q_k Q_{k'} \left(1 - e^{\frac{2\pi i k'}{N}}\right)$$

$$\stackrel{k' = N-k}{=} 2 \sum_{k=1}^{N} Q_k Q_{N-k} \left(1 - e^{-\frac{2\pi i k}{N}}\right).$$

Hier gibt der Term mit $k = N$ keinen Beitrag! (1-1)

Die Summe kann vereinfacht werden:

$$2\sum_{k=1}^{N-1} f(k) = \sum_{k=1}^{N-1} f(k) + \sum_{k=1}^{N-1} f(N-k)$$

$$\Rightarrow 2\sum_{k=1}^{N-1} Q_k Q_{N-k}\left(1-e^{-\frac{2\pi i k}{N}}\right) = \sum_{k=1}^{N-1} Q_k Q_{N-k}\left(2-e^{-\frac{2\pi i k}{N}}-e^{-\frac{2\pi i (N-k)}{N}}\right)$$

$$= \sum_{k=1}^{N-1} Q_k Q_{N-k}\underbrace{\left(2-e^{-\frac{2\pi i k}{N}}-e^{\frac{2\pi i k}{N}}\right)}_{2\left(1-\cos\frac{2\pi k}{N}\right) = 4\sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right)}.$$

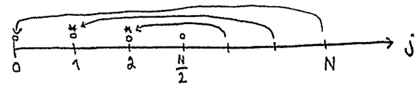
Außerdem muß man darauf beachten, daß die q_j's reelle Variablen sind:

$$q_j \in \mathbb{R} \Rightarrow q_j^* = q_j \Rightarrow Q_k^* = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{\frac{2\pi i j k}{N}} q_j^*$$

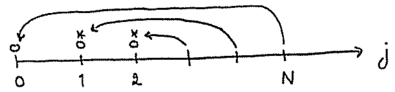
$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{-\frac{2\pi i j (N-k)}{N}} q_j \overset{!}{=} Q_{N-k}$$

D.h. Q_k und Q_{N-k} sind nicht unabhängig voneinander.

N gerade:



N ungerade:



Summiert man nur über die unabhängigen Indizes, erhält man für das Potential [wenn man auch bemerkt, dass $\sin^2\left(\frac{\pi(N-k)}{N}\right) = \sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right)$]:

$$V = \frac{1}{2}\omega_0^2 Q_N Q_0 + \sum_{0<k<\frac{N}{2}}\left(\omega_0^2 + 4\omega^2\sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right)\right)Q_k^* Q_k + \frac{1}{2}\left(\omega_0^2+4\omega^2\right)Q_{\frac{N}{2}}^* Q_{\frac{N}{2}}$$

$$= \frac{1}{2}\omega_0^2 Q_0^2 + \sum_{0<k<\frac{N}{2}}\underbrace{\left[\omega_0^2+\omega^2\left(2\sin\frac{\pi k}{N}\right)^2\right]}_{=:\,\omega_k^2} Q_k^* Q_k + \frac{1}{2}\left(\omega_0^2+4\omega^2\right)Q_{\frac{N}{2}}^2$$

$Q_N = Q_0^* \overset{!}{=} Q_0$
$Q_{\frac{N}{2}}^* \overset{!}{=} Q_{\frac{N}{2}}$

Dieses ist tatsächlich „diagonal"!
[Die komplexen Q_k's zählen zweimal.]

Interpretation:

Die Normalkoordinaten stellen „kollektive" Schwingungen dar; viele q_j's bewegen sich „kohärent":

$$q_j(t) = \frac{1}{\sqrt{N}}\left\{Q_0(t) + \sum_{0<k<\frac{N}{2}}\left[Q_k(t)e^{\frac{2\pi i j k}{N}} + Q_k^*(t)e^{-\frac{2\pi i j k}{N}}\right] + Q_{\frac{N}{2}}(t)\,(-1)^j\right\}.$$

Ursprünglich $k=N;\ k\to N-k$

Ursprünglich $k>\frac{N}{2};\ k\to N-k$

nur für gerades N

$e^{\frac{2\pi i j \frac{N}{2}}{N}} = e^{i\pi j} = (-1)^j$