在上面的解中，每个广义坐标都可能包含所有频率的振动，是否存在一组特殊的广义坐标，使得每个广义坐标都以单一的频率振动呢?我们可以换一种构造简正坐标的思路：小振动问题中，T和V的系数矩阵都是正定的实对称二次型矩阵，由线性代数理论，一定存在线性变换，使这两个矩阵同时对角化，即：

$$\begin{cases} T = \dfrac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{s}\dot{\xi}_\alpha^2 \\ V = \dfrac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{s}\lambda_\alpha^2\,\xi_\alpha^2 \end{cases}$$

把此时的拉格朗日函数：

$$L = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{s}(\dot{\xi}_\alpha^2 - \lambda_\alpha^2\,\xi_\alpha^2)$$

代人拉格朗日方程，得运动微分方程：

$$\ddot{\xi}_\alpha + \lambda_\alpha^2\,\xi_\alpha = 0, \qquad \alpha = 1, 2, \ldots, s$$

上述方程组中的每一个方程仅与一个ξ_α有关，这将导致每个简正坐标仅以单一频率振动，即：

$$\xi_\alpha = c_\alpha\cos(\omega_\alpha t + \varphi_\alpha), \qquad \alpha = 1, 2, \ldots, s$$

其中$\omega_\alpha = \lambda_\alpha$，振幅系数$c_\alpha$和初相位$\varphi_\alpha$可由初始条件决定。