

耦合多振子问题

1 耦合多振子问题的求解方法

$$V(q_1, q_2, \dots, q_s) \approx V(q_1^0, q_2^0, \dots, q_s^0) + \frac{1}{2} \underbrace{\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0}_{k_{ij}} x_i x_j \quad (1)$$

其中 q_i^0 表示平衡位置，而 $x_i = q_i - q_i^0$ 表示相对平衡位置的广义坐标的改变量。定义再结合动能项¹ $T = \frac{1}{2} m_{ij} \dot{x}_i \dot{x}_j$ ，得到拉格朗日量

$$L = \frac{1}{2} m_{ij} \dot{x}_i \dot{x}_j - \frac{1}{2} k_{ij} x_i x_j = \frac{1}{2} \dot{X}^t M \dot{X} - \frac{1}{2} X^t K X \quad (2)$$

其中 $k_{ij} = k_{ji}$ ， $m_{ij} = m_{ji}$ ， $X = [x_1, x_2, \dots, x_s]^t$ ， $M_{ij} = m_{ij}$ ， $K_{ij} = k_{ij}$ 。利用拉格朗日方程，可以得到 s 个运动方程（ $i = 1, 2, \dots, s$ ）：

$$m_{ij} \ddot{x}_j + k_{ij} x_j = 0 \quad \text{or} \quad M \ddot{X} + K X = 0 \quad (3)$$

做傅里叶变换（等价于设 $x_i = x_{i0} e^{i\omega t}$ 或 $X = X_0 e^{i\omega t}$ ），得

$$\boxed{(-m_{ij} \omega^2 + k_{ij}) x_{j0} = 0 \quad \text{or} \quad (-\omega^2 M + K) X_0 = 0} \quad (4)$$

若 ω 有解，则

$$\det(-\omega^2 M + K) = 0 \quad (5)$$

解出 $\omega = \omega_k$ 称为简正频率，而 X_0 就是当 $\omega = \omega_k$ 时方程 $(-\omega_k^2 M + K) X_{0k} = 0$ 的解，称为简正坐标，表示简正振动模式。在得到所有的简正频率与简正坐标后，问题的完整解就是

$$x_i = \sum_k \alpha_k X_{0ki} e^{i\omega_k t} \stackrel{\text{Re}}{\equiv} \sum_k a_k X_{0ki} \cos(\omega_k t + \varphi_k) \quad \text{or} \quad X(t) = \sum_k \alpha_k X_{0k} e^{i\omega_k t} \quad (6)$$

- 证明 $\omega^2 > 0$ 。由式4得

$$\omega^2 = \frac{\sum_{ij} x_{i0}^* k_{ij} x_{j0}}{\sum_{ij} x_{i0}^* m_{ij} x_{j0}} = \frac{X_0^\dagger K X_0}{X_0^\dagger M X_0} \quad (7)$$

由于 k 和 m 均对称，可得分子与分母均为实数。进一步，根据势能与动能得正定性质，知 $\omega^2 > 0$ 。这个结果当然是合理的。如果 ω 含有虚数，则会由于 $e^{i\omega t}$ 因子而出现耗散，这将与问题本身的能量守恒相矛盾。

¹如果广义坐标变换不含时，则 $T_1 = T_0 = 0$

- 例：k-m-K-m-k振子。

$$M = \begin{bmatrix} m & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} k+K & -K \\ -K & k+K \end{bmatrix}, \quad (8)$$

令 $\det(-\omega^2 M + K) = 0$ 得

$$\omega_1^2 = \frac{k}{m}, \quad \omega_2^2 = \frac{k+2K}{m} \quad (9)$$

相应得振动模式为

$$\xi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \xi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (10)$$

问题的完整解为

$$\begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} e^{i\omega_1 t} + c_2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} e^{i\omega_2 t} \quad (11)$$

其中 c_1 和 c_2 为两个待定的复数参数，或

$$\begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \cos(\omega_1 t + \varphi_1) + c_2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \cos(\omega_2 t + \varphi_2) \quad (12)$$

其中 $c_{1,2}$ 和 $\varphi_{1,2}$ 为4个待定的实数参数，或

$$\begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} [c_1 \cos(\omega_1 t) + d_1 \sin(\omega_1 t)] + \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} [c_2 \cos(\omega_2 t) + d_2 \sin(\omega_2 t)] \quad (13)$$

其中 $c_{1,2}$ 和 $d_{1,2}$ 为4个待定的实数参数。

事实上，利用 ξ_1 和 ξ_2 ，可以直接将拉格朗日量写成两个独立振动之和

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\xi}_1^2 - \frac{1}{2} k \xi_1^2 + \frac{1}{2} m \dot{\xi}_2^2 - \frac{1}{2} (k+2K) \xi_2^2 = L_1 + L_2 \quad (14)$$

- 宇称或交换对称性。在上一个例子中， ξ_1 和 ξ_2 在1、2互换下， $\xi_1 \rightarrow \xi_1$ ， $\xi_2 \rightarrow -\xi_2$ ，我们称其具有置换对称性。等价的，在镜面变换下， $\xi_1 \rightarrow -\xi_1$ ， $\xi_2 \rightarrow \xi_2$ ，我们称其具有宇称对称性，前者为奇宇称，后者为偶宇称。²

这提示我们，如果我们可以事先知道解的对称性，就可以更简单的得到振动频率。比如对于奇宇称解 $[1, 1]$ ，直接代入特征方程⁴，得

$$(-m\omega^2 + k + K)1 + (-K)1 = 0 \quad (15)$$

直接解出 $\omega^2 = k/m$ 。而对于偶宇称解 $[1, -1]$ ，代入特征方程得

$$(-m\omega^2 + k + K)1 + (-K)(-1) = 0 \quad (16)$$

直接解出 $\omega^2 = (k+2K)/m$ 。当然，我们也可以直接引入广义坐标 $\xi_{1,2}$ ，而写出拉格朗日量¹⁴。

²这里交换对称变换 Z 为 $[x_1, x_2] \rightarrow [x_2, x_1]$ ，而镜面（宇称）变换 P 为 $[x_1, x_2] \rightarrow [-x_2, -x_1]$ ，因此， $P = -Z$ 。因为 $P^2 = Z^2 = 1$ ，其（本征）值只能为 ± 1 。

- 零模。在k-m-K-m-k振子中，令 $k = 0$ ，得到一个 $\omega = 0$ 的解，这对应于整体平移。一般的，如果引入的广义坐标的个数多于振动自由度的数目，我们就会得到一些零模解。这些零模解可以通过引入更少的广义坐标或约束得以消除。

如果零模存在，则相当于在该自由度方向不存在“回复力”，即 $V'' = 0$ 。在这个例子中，当 $k = 0$ ，我们可以看到

$$K = \begin{bmatrix} K & -K \\ -K & K \end{bmatrix} \quad (17)$$

该矩阵有一个零本征值，对应的模式可以通过 $KX_0 = 0$ 解出，即 $X_0 = [1, 1]^t$ 。

- 线性双摆。作业
- m-k-M-k-m振子。

$$M = \begin{bmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} k & -k & 0 \\ -k & 2k & -k \\ 0 & -k & k \end{bmatrix} \quad (18)$$

代入特征方程，可解得

$$\omega_1^2 = \frac{k}{m}, \quad \omega_2^2 = \frac{(2m+M)k}{mM}, \quad \omega_3^2 = 0 \quad (19)$$

对应的振动模式为

$$\xi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \xi_2 = \frac{1}{\sqrt{2 + \frac{4m^2}{M^2}}} \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{2m}{M} \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \xi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

当然，第三个为零模。

如果我们注意到该问题具有宇称对称性和平移对称性，就可以直接写出三个模式（两个振动和一个平移）。这正是对称性的威力！

- 双原子分子。6=3平动+2转动+1振动。
- 线性ABA分子。9=3平动+2转动+4振动。其中两个纵向振动直接由前面的m-k-M-k-m振子给出，而剩下的两个横向振动相当于m-k-M-k-m振子问题中的 ξ_2 解，只不过要将 k 换成相应的 k 。³
- 如何消除平动与转动？可以利用动量与角动量为零。

$$\sum_i m_i \mathbf{r}_i = 0, \quad \sum_i m_i \mathbf{R}_i \times \mathbf{r}_i = 0 \quad (21)$$

其中， \mathbf{R}_i 表示原子位置， \mathbf{r}_i 表示微振动中的小位移。

³对于横向振动，如果将ABA都看成质点且其相互作用仅依赖于其相对距离的话，可以证明 $k = 0$ 。但对于实际的分子，原子都是有结构的，因此其相互作用并非仅仅依赖于其质心相对距离，这时可以存在 $k > 0$ 。

- 非共线的ABA分子。（朗道§24）（直角三角形和等边三角形可以看成是其特例）消除平动与转动：

$$\begin{aligned}
m(x_1 + x_3) + M(x_2) &= 0, \\
m(y_1 + y_3) + M(y_2) &= 0, \\
m(z_1 + z_3) + M(z_2) &= 0, \\
m(x_1 \cos \alpha + x_3 \cos \alpha + y_1 \sin \alpha - y_3 \sin \alpha) &= 0 \\
m(z_1 \cos \alpha + z_3 \cos \alpha) &= 0 \\
m(z_1 \sin \alpha - z_3 \sin \alpha) &= 0
\end{aligned} \tag{22}$$

9个自由度，这里有6个约束条件，因此剩下三个振动自由度。由三、五、六式，我们就得到 $z_1 = z_2 = z_3 = 0$ 。再考虑到宇称对称性，可以设 $x_1 \pm x_3$ ， $y_1 \pm y_3$ 为新的坐标。又因为 $x_1 + x_3$ 与 $y_1 - y_3$ 通过第四个约束条件联系在一起，而 x_2 和 y_2 也可以通过前两个约束条件由 $x_1 + x_3$ 和 $y_1 + y_3$ 得到。因此，我们可以选取广义坐标

$$X = x_1 + x_3, \quad Y = y_1 + y_3, \quad \xi = x_1 - x_3 \tag{23}$$

因为 ξ 和 Y 在镜面操作下为偶，而 X 在镜面操作下为奇，我们就得到 X 为一个简正坐标，而 ξ 和 Y 并无进一步的对称性将其分开，所以需要通过求解特征方程得到简正模式。

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{x}_3^2 + \dot{y}_3^2) + \frac{1}{2}M(\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2) - \frac{1}{2}k(\delta\ell_{12}^2 + \delta\ell_{23}^2) - \frac{1}{2}K\delta\ell_{13}^2 \tag{24}$$

代入

$$\delta_{12} = (x_2 - x_1) \sin \alpha - (y_2 - y_1) \cos \alpha \tag{25}$$

$$\delta_{23} = (x_3 - x_2) \sin \alpha + (y_3 - y_2) \cos \alpha \tag{26}$$

$$\delta_{13} = x_3 - x_1 \tag{27}$$

选取基矢为 $[X, Y, \xi]$ ，得到 M 和 K 矩阵为

$$M = \begin{bmatrix} \frac{m}{2} \left(\frac{1}{\sin^2 \alpha} + \frac{2m}{M} \right) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{m}{2} \left(1 + \frac{2m}{M} \right) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{m}{2} \end{bmatrix} \tag{28}$$

$$K = \begin{bmatrix} \frac{k \sin^2 \alpha}{2} \left(\frac{1}{\sin^2 \alpha} + \frac{2m}{M} \right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{k \cos^2 \alpha}{2} \left(1 + \frac{2m}{M} \right)^2 & -\frac{k \sin \alpha \cos \alpha}{2} \left(1 + \frac{2m}{M} \right) \\ 0 & -\frac{k \sin \alpha \cos \alpha}{2} \left(1 + \frac{2m}{M} \right) & \frac{k \sin^2 \alpha}{2} + K \end{bmatrix} \tag{29}$$

确实， X 自己为一个简正坐标，对应的频率为

$$\sqrt{\frac{k}{m} \left(1 + \frac{2m \sin^2 \alpha}{M} \right)} \tag{30}$$

而 Y 与 ξ 需要重新组合成简正坐标。

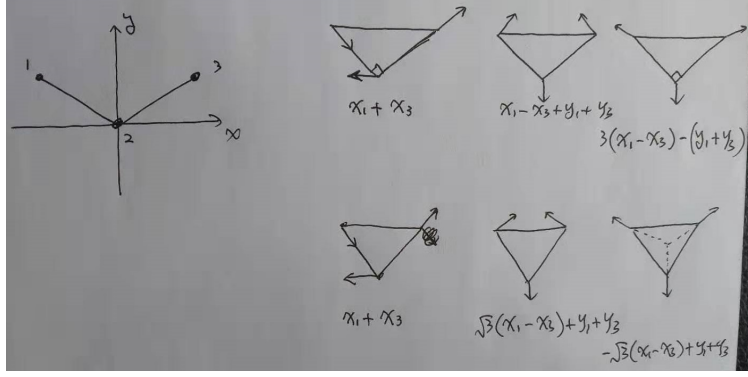


图 1: 三角形分子的振动模式。

考虑两个特例。(1) 等腰三角形: $\alpha = \pi/4$, $K = k$, $m = M$ 。可以解得三个简正频率为

$$\omega^2 = \frac{2k}{m}, \quad \frac{k}{m}, \quad \frac{3k}{m} \quad (31)$$

对应的简正坐标为

$$X_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -3 \end{bmatrix} \quad (32)$$

(2) 等边三角形: $\alpha = \pi/6$, $K = k$, $m = M$ 。解得

$$\omega^2 = \frac{3k}{2m}, \quad \frac{3k}{2m}, \quad \frac{3k}{m} \quad (33)$$

对应的简正坐标为

$$X_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \sqrt{3} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -\sqrt{3} \end{bmatrix} \quad (34)$$

前两个模式简并，这来源于此时的一个额外的对称性：120度旋转对称性。比如 $X_1 + \sqrt{3}X_2$ 得到的模式刚好就是 X_1 旋转120度得到的结果。

2 本征值（对角化）问题

特征方程

$$(-\omega^2 M + K)X_0 = 0 \quad (35)$$

等价于

$$M^{-1}KX_0 = \omega^2 X_0 \quad (36)$$

定义 $U = [X_{01}, X_{02}, \dots]$, $\Omega^2 = \text{diag}[\omega_1^2, \omega_2^2, \dots]$, 则

$$MU\Omega^2 = KU \quad (37)$$

进而

$$U^\dagger MU\Omega^2 = \Omega^2 U^\dagger MU \quad (38)$$

给出

$$(\omega_i^2 - \omega_j^2)(U^\dagger MU)_{ij} = 0 \quad (39)$$

当 $\omega_i \neq \omega_j$, $(U^\dagger MU)_{ij} = 0$; 当 $\omega_i = \omega_j$, 可以通过施密特正交化将 $U^\dagger MU$ 化为对角型。(注意: 这里的正交化是要求 $U^\dagger MU$ 对角, 而非 $U^\dagger U$ 对角!) 因此,

$$L = \frac{1}{2} \dot{X}^t M \dot{X} - \frac{1}{2} X^t K X \quad (40)$$

$$= \frac{1}{2} \dot{X}^t U^{-\dagger} U^\dagger M U U^{-1} \dot{X} - \frac{1}{2} X^t U^{-\dagger} U^\dagger K U U^{-1} X \quad (41)$$

$$= \frac{1}{2} \dot{Y}^\dagger (U^\dagger MU) \dot{Y} - \frac{1}{2} Y^\dagger (U^\dagger K U) Y = \sum_k L_k \quad (42)$$

其中, $Y = U^{-1} X$ 就表示简正模式。

而特征方程变为

$$(-\omega^2 M + K) U U^{-1} X_0 = [-\omega^2 (U^\dagger MU) + (U^\dagger K U)] Y_0 = 0 \quad (43)$$

由于 $U^\dagger MU$ 和 $U^\dagger K U$ 均已对角, 则

$$[-\omega^2 + (\Omega^2)_{kk}] Y_{0k} = 0 \quad (44)$$

解得对于简正模式 Y_{0k} , 振动频率应该为 $\omega^2 = (\Omega^2)_{kk} = \omega_k^2$ 。

- 三点链: 一个施密特正交化的例子。

$$M = \begin{bmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & m \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} 2k & -k & -k \\ -k & 2k & -k \\ -k & -k & 2k \end{bmatrix} \quad (45)$$

令 $\det(-\omega^2 M + K) = 0$, 得

$$\omega^2(-\omega^2 m + 3k)^2 = 0 \quad (46)$$

给出

$$\omega^2 = 0, \quad \frac{3k}{m}, \quad \frac{3k}{m} \quad (47)$$

这里出现了简并频率 $\omega^2 = 3k/m$, 代入特征方程得

$$\begin{bmatrix} -k & -k & -k \\ -k & -k & -k \\ -k & -k & -k \end{bmatrix} X_0 = 0 \quad (48)$$

可以先随便选取一个解，比如 $X_1 = [1, -1, 0]^t$ 。再寻求第二个与 X_1 不同的解，比如 $X_2 = [1, 0, -1]^t$ 。由于 $X_1^\dagger M X_2 \neq 0$ ，需要通过施密特正交化得到与 X_1 正交的解：

$$X_2 \rightarrow X_2 - X_1 \frac{X_1^\dagger M X_2}{X_1^\dagger M X_1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix} \quad (49)$$

3 离散对称性

如果 $PMP^{-1} = M$ 且 $PKP^{-1} = K$ ，我们有

$$0 = (-\omega^2 M + K)X_0 = P(-\omega^2 M + K)P^{-1}PX_0 = (-\omega^2 M + K)PX_0 \quad (50)$$

即 PX_0 也是简正模式。如果该 ω 模式无简并， PX_0 一定还是 X_0 （可能差一个系数），即 X_0 是 P 的本征向量。如果 ω 有简并， PX_0 也一定还属于该子空间。所以，我们可以用 P 的本征向量来表示该简正模式，属于 P 的不同本征值的 X_0 是不会混合在一起的。这可以看成是离散情况下对称性的一种应用。

- 宇称

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (51)$$

其本征值与本征向量为

$$1: \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad -1: \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (52)$$

- ABA分子。如果考虑到

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (53)$$

其本征值与本征向量为

$$1: \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad 1: \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad -1: \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (54)$$

由于前两个本征向量具有相同的 P 本征值，因此可以线性组合。实际上，它们刚好组合成一个平移和一个振动。而最后一个本征向量并无简并，因此可以预期它就是ABA分子的一个解。

- 周期一维链。平移对称性， $P_{i,i+1} = 1$ 。以 $L=4$ 为例

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (55)$$

由于 $P^L = 1$ ，其本征值只能为 $e^{i(2\pi/L)j}$ ，其中 $j = 0, 1, \dots, L-1$ 。相应的本征向量可以求出

$$e^{i\frac{2\pi}{L}j} : \begin{bmatrix} e^{i\frac{2\pi}{L}0j} \\ e^{i\frac{2\pi}{L}1j} \\ e^{i\frac{2\pi}{L}2j} \\ \vdots \\ e^{i\frac{2\pi}{L}(L-1)j} \end{bmatrix} \quad (56)$$

以 $L=4$ 为例：

$$1 : \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad i : \begin{bmatrix} 1 \\ i \\ -1 \\ -i \end{bmatrix}, \quad -1 : \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad -i : \begin{bmatrix} 1 \\ -i \\ -1 \\ i \end{bmatrix} \quad (57)$$

现在，让我们应用该对称性来求解周期一维链。拉格朗日量为

$$L = \sum_j \left[\frac{1}{2} m \dot{x}_j^2 - \frac{1}{2} k (x_j - x_{j+1})^2 \right] = \sum_j \left[\frac{1}{2} m \dot{x}_j^2 - k x_j^2 - \frac{1}{2} k x_j x_{j+1} - \frac{1}{2} k x_j x_{j-1} \right] \quad (58)$$

将 $x_j = e^{i(2\pi/L)\ell j}$ 代入特征方程得

$$(-\omega^2 m + 2k) e^{i\frac{2\pi}{L}\ell j} - k e^{i\frac{2\pi}{L}\ell(j+1)} - k e^{i\frac{2\pi}{L}\ell(j-1)} = 0 \quad (59)$$

解得

$$\omega_\ell^2 = \left(2 - 2 \cos \frac{2\pi\ell}{L} \right) \frac{k}{m} = \frac{4k}{m} \sin^2 \frac{2\pi\ell}{L} \quad (60)$$

当 $\ell = 0$ ， $\omega_\ell = 0$ ，即对应于零模。

- 正方形分子。自由度总共12个，3个平动，3个转动，剩下6个振动。约束条件

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0 \quad (61)$$

$$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 0 \quad (62)$$

$$z_1 + z_2 + z_3 + z_4 = 0 \quad (63)$$

$$y_1 - x_2 - y_3 + x_4 = 0 \quad (64)$$

$$z_1 - z_3 = 0 \quad (65)$$

$$z_2 - z_4 = 0 \quad (66)$$

尝试选取广义坐标： $x_1 + x_3, y_1 + y_3, x_1 - x_3, y_1 - y_3, y_2 - y_4, z_1$ 。（ $x_2 + x_4, y_2 + y_4, x_2 - x_4, z_2, z_3, z_4$ 可以由约束条件得到。）写出这些坐标在对称变换下的本征值，如下表格所示

从对称性分析可以看出，我们发现前2个模式总是混合在一起（无法同时满足 C_4 和 $C_{2y,2x}$ 的对角化），因此构成一个二维的简并振动模式。第3个和第5个可以组合成 $(x_1 - x_3) \pm (y_2 - y_4)$ ，因此分别为一个简正振动模式，第4和第6个直接作为简正模式。

	C_4	C_2	C_{2y}	C_{2x}
$x_1 + x_3$	$-(y_1 + y_3)$	-	-	+
$y_1 + y_3$	$(x_1 + x_3)$	-	+	-
$x_1 - x_3$	$(y_2 - y_4)$	+	+	+
$y_1 - y_3$	-	+	-	-
$y_2 - y_4$	$(x_1 - x_3)$	+	+	+
z_1	-	+	-	-

表 1: C_4 表示绕 z 轴转90度, C_2 表示绕 z 轴转180度, C_{2y} 和 C_{2x} 表示绕 y 和 x 轴转180度。

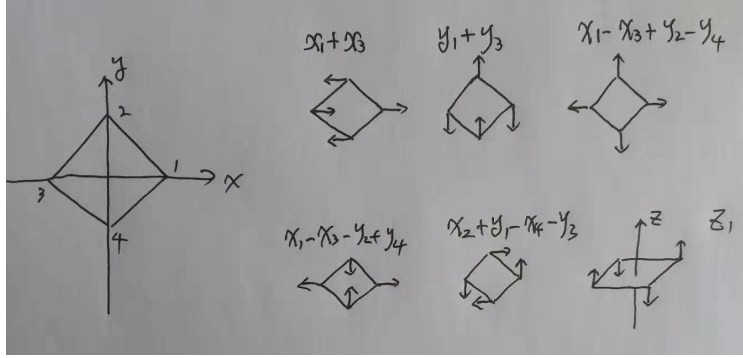


图 2: 正方形分子的6个振动模式。前两个为简并模式。

4 受迫阻尼耦合振子问题

现在, 让我们把 T_1 和 T_0 找回来, 还可以计入势能中的速度依赖项, 最终

$$L = \frac{1}{2} \dot{X}^t M \dot{X} + \frac{1}{2} \dot{X}^t \Gamma X + \frac{1}{2} X^t K X \quad (67)$$

运动方程为

$$M \ddot{X} + \Gamma \dot{X} + K X = 0 \quad (68)$$

计入阻尼函数 $F = \frac{1}{2} \dot{X}^t \Gamma \dot{X}$, 并利用推广的拉格朗日方程, 也可以得到上述运动方程。对 X 做傅里叶变换, 得

$$(-\omega^2 M + i\omega \Gamma + K) X_0 = 0 \quad (69)$$

同样可以利用行列式为零来求解。但此时得到的 ω 可以包含虚数, 对应于耗散的存在。

另外, 我们还可以计入受迫外力项, 将运动方程推广为更一般的形式

$$M \ddot{X} + \Gamma \dot{X} + K X = F \quad (70)$$

从而受迫振动解满足

$$(-\omega^2 M + i\omega \Gamma + K) X_0 = F_0 \quad (71)$$

可得

$$X_0 = (-\omega^2 M + i\omega\Gamma + K)^{-1} F_0 \quad (72)$$

也可以利用Cramer法则将其简化为

$$X_{0i} = \frac{\det D_i}{\det D} \quad (73)$$

其中， $D = -\omega^2 M + i\omega\Gamma + K$ ， D_i 为将 D 的第 i 列替换为 F_0 。