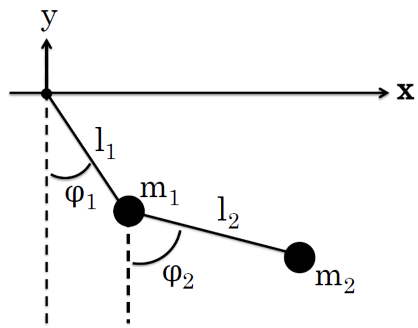
V. 微小振動(多数の自由度)

具体例：以前 (Sect. I) に考えた2重平面振子。簡単のため $\ell_1 = \ell_2 = \ell$ とする。図のように極座標を導入する：



$$
\begin{aligned}
x_1 &= \ell\sin\varphi_1 \qquad y_1 = -\ell\cos\varphi_1 \\
x_2 &= \ell\sin\varphi_1 + \ell\sin\varphi_2\,, \qquad y_2 = -\ell\cos\varphi_1 - \ell\cos\varphi_2
\end{aligned}
$$

Lagrangian: $L = T - U$. ただし、運動エネルギーは

$$
\begin{aligned}
T &= \frac{m_1}{2}\left(\dot{x_1}^2 + \dot{y_1}^2\right) + \frac{m_2}{2}\left(\dot{x_2}^2 + \dot{y_2}^2\right) \\
&= \frac{m_1+m_2}{2}\ell^2\,\dot{\varphi_1}^2 + \frac{m_2}{2}\ell^2\,\dot{\varphi_2}^2 + m_2\ell^2\,\dot{\varphi}_1\dot{\varphi}_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)\,.
\end{aligned}
$$

ポテンシャルエネルギーは

$$
\begin{aligned}
U &= m_1 g y_1 + m_2 g y_2 \\
&= -(m_1+m_2)g\ell\cos\varphi_1 - m_2 g\ell\cos\varphi_2\,.
\end{aligned}
$$

微小振動の場合 [1]： $|\varphi_i| << 1\ \ (i=1,2) \Rightarrow \sin\varphi_i \simeq \varphi_i,\ \cos\varphi_i \simeq 1-\varphi_i^2/2$. そのときに、$\varphi_i$ と $\dot{\varphi}_i$ の2次の項まで取り入れた運動エネルギーとポテンシャルエネルギーが次のようになる：

$$
\begin{aligned}
T &= \frac{m_1+m_2}{2}\ell^2\,\dot{\varphi_1}^2 + \frac{m_2}{2}\ell^2\,\dot{\varphi_2}^2 + m_2\ell^2\,\dot{\varphi}_1\dot{\varphi}_2 \\
U &= \frac{1}{2}(m_1+m_2)g\ell\varphi_1^2 + \frac{1}{2}m_2 g\ell\varphi_2^2\,. \qquad (1)
\end{aligned}
$$

[1] ここで角度 φ_1, φ_2 はラジアン (rad) で表す。微小振動を仮定すれば、三角関数のテーラ展開の2次の項まで取り入れることにする。

(定数を除いた。)ここで次のベクトル $\vec{\varphi}$ と対称行列 $\hat{A}$, $\hat{B}$ を導入する：

$$\vec{\varphi} = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \qquad \hat{A} = \begin{pmatrix} 1+\mu & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{B} = \begin{pmatrix} 1+\mu & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

ただし、$\mu = m_1/m_2$. そのときに、Lagrangian $L = T - U$ は次のように表すことができる：

$$L = \frac{m_2\ell^2}{2}\sum_{i,j=1}^{2}\left(\hat{A}_{ij}\dot{\varphi}_i\dot{\varphi}_j - \omega_0^2\hat{B}_{ij}\varphi_i\,\varphi_j\right). \tag{2}$$

ただし $\omega_0^2 = g/\ell$. 角度 $\varphi_i(t)$ $(i = 1,2)$ の運動方程式 (Euler-Lagrange equation) は次のようになる：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}_i} = \frac{\partial L}{\partial\varphi_i} \qquad (i=1,2) \Rightarrow \tag{3}$$

$$\hat{A}\,\ddot{\vec{\varphi}} + \omega_0^2\,\hat{B}\vec{\varphi} = 0\,. \tag{4}$$

これは**線形同次型微分方程式の組**を表している [2]。

微分方程式 (4) を解くために、次の形を仮定する：

$$\vec{\varphi} = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} e^{i\omega t} \equiv \vec{c}\,e^{i\omega t}\,. \tag{5}$$

ただし、ベクトル $\vec{c} = (c_1, c_2)$ は時間に依存しない。この形を(4)に代入すれば、$\vec{c}$ についての方程式

$$\left(-\omega^2\hat{A} + \omega_0^2\hat{B}\right)\vec{c} = 0 \tag{6}$$

が得られる。それが自明解 $\vec{c} = (0,0)$ と異なる解をもつために、式 (6) の左辺にある行列 $(\ldots)$ の <u>行列式 (determinant)</u> はゼロにならないと行けないので [3]

$$|\omega_0^2\hat{B} - \omega^2\hat{A}| = 0\,. \tag{7}$$

[2]式 (4) では、行列とベクトルの掛け算のルールを使った。例えば2番目の項では、$\hat{B}\vec{\varphi} \equiv \vec{C}$ はベクトルであり、その i 番目の成分 $(i=1,2)$ は $C_i = \sum_{j=1}^{2}\hat{B}_{ij}\,\varphi_j$ である。

[3]線形代数を思い出して見て下さい。ここで行列 $\hat{C}$ の行列式 (determinant) を $|C|$ で表す。

これは**特有方程式** (characteristic equation) と呼ばれ、ω^2 についての 2 次方程式である。その解は **固有振動数** (eigenfrequency) と呼ばれる。二次方程式 (7) の解は次のようになる：

$$\omega_\pm^2 = \frac{\omega_0^2}{\mu}\left(1+\mu \pm \sqrt{1+\mu}\right) . \tag{8}$$

次にそれぞれの固有振動数に対する**固有振動モード** (**基本振動モード**) を求める。先ず $\omega = \omega_+$ のときに、式 (5) から

$$\vec{\varphi}_+ = \vec{c}_+ \, e^{i\omega_+ t}$$

それを (4) に代入して、固有ベクトル $\vec{c}_+ = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_+$ を求める。その結果は

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{1+\mu} \end{pmatrix} . \tag{9}$$

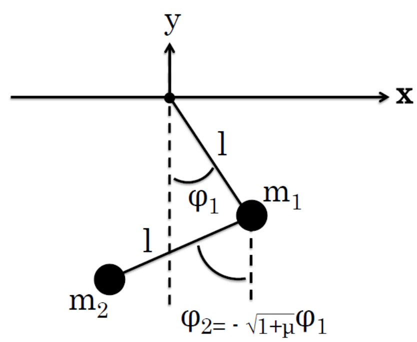
(任意の定数のファクターを除いた。) 同様に $\omega = \omega_-$ のときに、

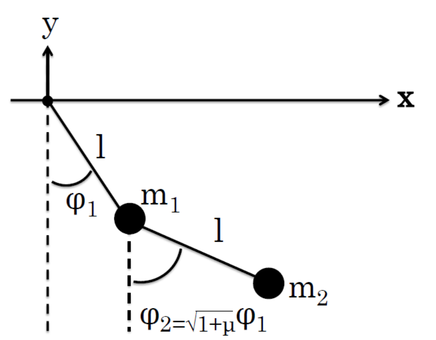
$$\vec{\varphi}_- = \vec{c}_- \, e^{i\omega_- t}$$

を (4) に代入して、固有ベクトル $\vec{c}_- = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_-$ を求めると

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_- = \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{1+\mu} \end{pmatrix} \tag{10}$$

となる。(任意の定数のファクターを除いた。) その2つの基本振動は図のようになる。





結局、微分方程式 (4) の解は 2 つの基本解の組み合わせ（一次結合) で表される：

$$\begin{pmatrix} \varphi_1(t) \\ \varphi_2(t) \end{pmatrix} = k_+ \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_+ e^{i\omega_+ t} + k_- \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_- e^{i\omega_- t}. \tag{11}$$

未定の定数 k_+, k_- は初期条件から決まり、2つの固有ベクトル $\vec{c}_\pm$ は (9), (10)で与えられる。
(11) と別に、もう一つの解は、基本解の複素数共役 $\vec{\varphi}_1^*(t)$, $\vec{\varphi}_2^*(t)$ の一次結合で表される [4]。従って、一般解には4個の未定の定数が現れ、それを実数で表すと次のようになる：

$$\begin{pmatrix} \varphi_1(t) \\ \varphi_2(t) \end{pmatrix} = A_+ \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_+ \cos(\omega_+ t + \delta_+) + A_- \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_- \cos(\omega_- t + \delta_-). \tag{12}$$

[4] その理由：式 (8) から分かるように、$\omega_\pm$ の他に $-\omega_\pm$ も特有方程式の解である。

4個の定数 $A_\pm$, $\delta_\pm$ は $t=0$ のときの φ_1, φ_2 の値、およびそれらの時間微分（初期角速度) の値から決まる。

この具体例を次のように一般化できる：

1. 一般化された座標を $q_1, q_2, \ldots q_s$ とすれば、ポテンシャルエネルギー U は $q_i = q_{i0}$ で極小になるときに、平均値 q_{i0} からの変位
$$x_i = q_i - q_{i0}$$
を導入する。（上記の例では、$\varphi_{10} = \varphi_{20} = 0.$) ポテンシャルエネルギーを x_i についての2次の項まで取り入れた形は
$$U = \frac{1}{2}\sum_{ij} k_{ij} x_i x_j$$
であり、$k_{ij} = k_{ji}$ （対称行列, 以下 $\hat{k}$ とする)。
2. 運動エネルギーは一般に
$$T = \frac{1}{2}\sum_{ij} a_{ij}(q)\dot{q}_i\dot{q}_j$$
の形であるが、微小振動のときに $a_{ij}(q)$ のところで $q \to q_0$ を置き換えるので、係数 $a_{ij}(q_0) \equiv m_{ij}$ は定数となる。従って、微小振動のときに
$$T = \frac{1}{2}\sum_{ij} m_{ij}\dot{x}_i\dot{x}_j$$
となり、$m_{ij} = m_{ji}$ は定数の対称行列（以下 $\hat{m}$ とする)。
3. Lagrangian および運動方程式は次のようになる：
$$L = \frac{1}{2}\sum_{ij}\left(m_{ij}\dot{x}_i\dot{x}_j - k_{ij}x_i x_j\right) \qquad (13)$$
$$\sum_j \left(m_{ij}\ddot{x}_j + k_{ij}x_j\right) = 0 \qquad (i = 1, 2, \ldots s) \qquad (14)$$

4. s 個の線形同次型微分方程式の組 (14) を解くために、

$$\vec{x} = \vec{A}\, e^{i\omega t} \tag{15}$$

とおく。ただし、ベクトル $\vec{x} = (x_1, x_2, \ldots x_s), \vec{A} = (A_1, A_2, \ldots A_s)$ は s 個の成分をもつ。(15) を (14) に代入すれば、

- **固有振動数** ω^2 についての特有方程式：

$$|\hat{k} - \omega^2\, \hat{m}| = 0$$

  が得られ、その解は一般に s 個がある $(\omega_1^2, \omega_2^2, \ldots \omega_s^2)$.

- **固有ベクトル** $\vec{A}$ についての方程式：

$$\left(\hat{k} - \omega_a^2 \hat{m}\right) \vec{A} = 0 \qquad (a = 1, 2, \ldots s)\,.$$

  従って、s 個の固有ベクトル $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \ldots \vec{A}_s$ が得られる。

5. より一般的な解はその基本解の組み合わせとなる：

$$\vec{x} = k_1 \vec{A}_1\, e^{i\omega_1 t} + k_2 \vec{A}_2\, e^{i\omega_2 t} + \ldots + k_s \vec{A}_s\, e^{i\omega_s t}\,.$$

ただし、 $k_1, k_2, \ldots k_s$ は任意の定数である。

6. 更に上記の解と別に、基本解の複素数共役の組み合わせで表される解もある。従って、一般解を実数として表すと次のようになる：

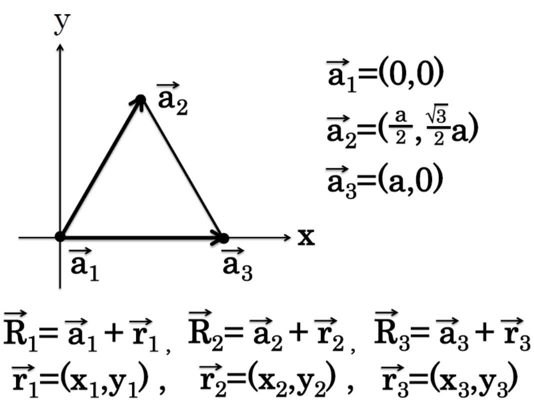
$$\vec{x} = C_1 \vec{A}_1\, \cos\left(\omega_1 t + \delta_1\right) + C_2 \vec{A}_2\, \cos\left(\omega_2 t + \delta_2\right) + \ldots + C_s \vec{A}_s\, \cos\left(\omega_s t + \delta_s\right)\,.$$

定数 C_i, δ_i は初期条件から決まる。

7. <u>重要なポイント</u>：一般解は色々な振動数の組み合わせでの運動を表しているが、**一つの基本解は一つだけの振動数をもって運動している**。即ち、「物理系はある特定の振動数で振動している」とは、基本解のみの場合は意味がある。

3原子分子の振動 [5]

図のような３原子の分子を考える。原子の共通の質量は m, 常に同一平面上に振動しているとする。簡単なモデルとして、３個の原子がバネ定数 k の重さのないバネでつながっているとし、静止状態では正三角形状になっていると考えよう。それぞれの原子の平均の位置　$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ は図のようになっている。この分子の固有振動数と固有振動モードについて考えよう。



図のように原子の位置ベクトルを

$$\vec{R}_i = \vec{a}_i + \vec{r}_i(t) \qquad (i = 1, 2, 3)$$

とする。$\vec{r}_i(t)$ は平均点からのずれ、微小量として取り扱う。

1. 系のポテンシャルエネルギーは

$$U = \frac{k}{2}\left[\left(|\vec{R}_1 - \vec{R}_2| - a\right)^2 + \left(|\vec{R}_2 - \vec{R}_3| - a\right)^2 + \left(|\vec{R}_3 - \vec{R}_1| - a\right)^2\right]$$

で与えられる。U を x_i, y_i について2次の項まで Taylor 展開し、

$$U \;=\; \frac{k}{2}\left[\left(\frac{1}{2}(x_2 - x_1) + \frac{\sqrt{3}}{2}(y_2 - y_1)\right)^2\right.$$

[5] 以下は基本的な解き方と結果の式だけ与え、途中の計算を（できそうな範囲で）自分でやって見て下さい。

$$+ \left(\frac{1}{2}(x_3 - x_2) - \frac{\sqrt{3}}{2}(y_3 - y_2)\right)^2 + (x_3 - x_1)^2 \Bigg] \tag{16}$$

となる。（各自で確かめて下さい。）

2. 系の運動エネルギーは

$$T = \frac{m}{2}\left(\dot{\vec{R}}_1^2 + \dot{\vec{R}}_2^2 + \dot{\vec{R}}_3^2\right) = \frac{m}{2}\left(\dot{\vec{r}}_1^2 + \dot{\vec{r}}_2^2 + \dot{\vec{r}}_3^2\right) \tag{17}$$

で与えられる。分子の質量中心の運動を分類するために、次の変数変換を行う：

$$(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) \to \left(\vec{R}, \vec{u}, \vec{v}\right).$$

ただし

$$\begin{aligned} \vec{R} &= (X, Y) = \frac{1}{3}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3) \\ \vec{u} &= (u_x, u_y) = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \\ \vec{v} &= (v_x, v_y) = \vec{r}_3 - \vec{r}_1 . \end{aligned}$$

運動エネルギー (17) を R, u, v で表し、その結果が

$$\begin{aligned} T &= \frac{m}{2}\Bigg[3\left(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2\right) \\ &+ \frac{2}{3}\left(\dot{u}_x^2 + \dot{u}_y^2 + \dot{v}_x^2 + \dot{v}_y^2 - \dot{u}_x\dot{v}_x - \dot{u}_y\dot{v}_y\right)\Bigg] \end{aligned} \tag{18}$$

となる。（各自で確かめて下さい。）また、ポテンシャルエネルギー (16) も $\vec{R}, \vec{u}, \vec{v}$ で表し、その結果が

$$\begin{aligned} U &= \frac{k}{2}\Bigg(\frac{1}{2}u_x^2 - \frac{1}{2}u_x v_x + \frac{\sqrt{3}}{2}u_x v_y + \frac{3}{2}u_y^2 + \frac{\sqrt{3}}{2}u_y v_x - \frac{3}{2}u_y v_y \\ &+ \frac{5}{4}v_x^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}v_x v_y + \frac{3}{4}v_y^2\Bigg) \end{aligned} \tag{19}$$

になる。（各自で確かめて下さい。）

3. $\vec{R}(t)$ についての運動方程式 (Euler-Lagrange equation) の解が

$$\vec{R}(t) = \vec{R}_0 + \vec{V}t \tag{20}$$

となる。ただし $\vec{R}_0, \vec{V}$ が定数のベクトルである。即ち、3原子の質量中心は任意の一定の速度 $\vec{V}$ で運動する。(式 (20) も各自で確かめて下さい。) 従って、式 (18) の $\vec{R}$ に依存する部分は $\frac{3}{2}m\vec{V}^2 = \text{const}$ となり、相対座標 $\vec{u}, \vec{v}$ の運動に影響しない。

4. 残りの変数 u_x, u_y, v_x, v_y をベクトル

$$\psi = (u_x, u_y, v_x, v_y)$$

にまとめ、その変数についての Lagrangian を

$$L = \frac{m}{2}\sum_{ij} A_{ij}\dot{\psi}_i\dot{\psi}_j - \frac{k}{2}\sum_{ij} B_{ij}\psi_i\psi_j + \text{const} \tag{21}$$

で表される。ただし、A, B は 4×4 対称行列であり、形は次のようになる：

$$A = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & 0 & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ 0 & \frac{3}{2} & \frac{\sqrt{3}}{4} & -\frac{3}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{5}{4} & -\frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{\sqrt{3}}{4} & -\frac{3}{4} & -\frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

5. 運動方程式 (Euler-Lagrange equation)

$$\sum_j \left(A_{ij} \ddot{\psi}_j + \omega_0^2 B_{ij}\psi_j \right) = 0 \qquad (i = 1, \ldots 4)$$

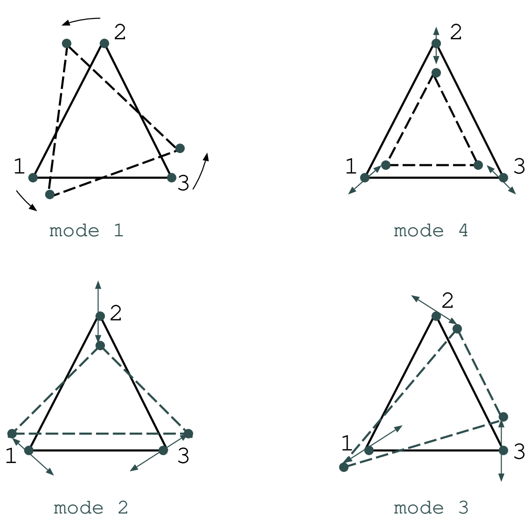
から固有振動数および固有振動モードを計算できる。ただし、上式では $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$ を使った。

固有振動数および固有モードについての解答：

- 固有振動数は次のようになる：

$$
\begin{aligned}
\omega_1^2 &= 0 : &\text{mode 1}\\
\omega_2^2 &= \frac{3}{2}\frac{k}{m} : &\text{mode 2}\\
\omega_3^2 &= \frac{3}{2}\frac{k}{m} : &\text{mode 3}\\
\omega_4^2 &= 3\frac{k}{m} : &\text{mode 4}
\end{aligned}
$$

- それぞれの固有振動数についての固有ベクトル ψ を求めると、その4つの振動モードは図のように表すことができる：



モード 1 は三角形の形を変えないまま、「回転モード」を表している。一般に、振動数はゼロのモードは Goldstone mode と呼ばれている。
モード 2, 3 は重解なので図形に不確定性があるが、上の図

では原子 2 が y 方向に振動する場合は「mode 2」と呼び、原子 3 が y 方向に振動する場合は「mode 3」と呼んだ。振動数は最も高いモード 4 は「圧縮モード」である。