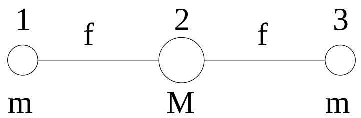
32 Dreiatomiges Molekül

32.a Eigenfrequenzen

Wir betrachten das Schema eines linearen dreiatomigen Moleküls. Wir wollen uns darauf beschränken, seine Bewegung in Richtung seiner Ausdehnung zu untersuchen. Dabei seien die beiden Federkonstanten f gleich wie auch die beiden äußeren Massen m.



Ausgedrückt durch die Auslenkungen η_i aus den Gleichgewichtslagen erhalten wir die kinetische Energie

$$\mathcal{T} = \frac{m}{2}(\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{M}{2}\dot{\eta}_2^2 \tag{32.1}$$

und die potentielle Energie

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2}f(\eta_1 - \eta_2)^2 + \frac{1}{2}f(\eta_2 - \eta_3)^2 = \frac{1}{2}f(\eta_1^2 + 2\eta_2^2 + \eta_3^2 - 2\eta_1\eta_2 - 2\eta_2\eta_3). \tag{32.2}$$

Daraus erhalten wir die dynamische Matrix

$$\Phi = \begin{pmatrix} \frac{f}{m} & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & 0 \\ -\frac{f}{\sqrt{mM}} & \frac{2f}{M} & -\frac{f}{\sqrt{mM}} \\ 0 & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & \frac{f}{m} \end{pmatrix} \tag{32.3}$$

und die charakteristische Gleichung $\det(\Phi - \omega^2 \mathbb{1}) = 0$,

$$\begin{vmatrix} \frac{f}{m} - \omega^2 & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & 0 \\ -\frac{f}{\sqrt{mM}} & \frac{2f}{M} - \omega^2 & -\frac{f}{\sqrt{mM}} \\ 0 & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & \frac{f}{m} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0. \tag{32.4}$$

Wir werten die Determinante aus

$$(\frac{f}{m} - \omega^2)\begin{vmatrix} \frac{2f}{M} - \omega^2 & -\frac{f}{\sqrt{mM}} \\ -\frac{f}{\sqrt{mM}} & \frac{f}{m} - \omega^2 \end{vmatrix} + \frac{f}{\sqrt{mM}}\begin{vmatrix} -\frac{f}{\sqrt{mM}} & 0 \\ -\frac{f}{\sqrt{mM}} & \frac{f}{m} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \tag{32.5}$$

oder

$$(\frac{f}{m} - \omega^2)[(\frac{2f}{M} - \omega^2)(\frac{f}{m} - \omega^2) - \frac{f^2}{mM} - \frac{f^2}{mM}] = 0 \tag{32.6}$$

oder zusammengefasst

$$(\frac{f}{m} - \omega^2)(\omega^2 - \frac{2f}{M} - \frac{f}{m})\omega^2 = 0. \tag{32.7}$$

Damit erhalten wir die drei Lösungen für die Quadrate der Eigenfrequenzen

$$\omega_1^2 = 0, \quad \omega_2^2 = \frac{f}{m}, \quad \omega_3^2 = \frac{f}{m} + \frac{2f}{M}. \tag{32.8}$$

32.b Eigenvektoren

Wir bestimmen nun die Eigenvektoren, indem wir die Matrix A bestimmen, mit der Φ diagonalisiert wird. Wir gehen aus von (31.16) $\Phi = A\widetilde{\omega^2}A^{\mathrm{T}}$, multiplizieren von rechts mit A, erhalten daraus, da A orthogonal ist, $\Phi A = A\widetilde{\omega^2}$ oder aus dem Matrixelement $_{i\lambda}$ die Gleichung

$$\sum_k \Phi_{ik} A_{k\lambda} = A_{i\lambda}\omega_\lambda^2. \tag{32.9}$$

Aus den $A_{i\lambda}$ bekommen wir dann die Auslenkungen, die zu den Normalschwingungen gehören, mittels (31.13) und (31.20)

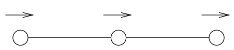
$$\eta_i = \frac{1}{\sqrt{m_i}}\xi_i = \frac{1}{\sqrt{m_i}} A_{i\lambda}\zeta_\lambda(t). \tag{32.10}$$

Wir wenden dies nun auf die drei Eigenfrequenzen an:
a) Für $\omega_1^2 = 0$ ist zu lösen

$$\begin{pmatrix} \frac{f}{m} & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & 0 \\ -\frac{f}{\sqrt{mM}} & \frac{2f}{M} & -\frac{f}{\sqrt{mM}} \\ 0 & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & \frac{f}{m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \\ A_{31} \end{pmatrix} = 0. \tag{32.11}$$

Hieraus folgt

$$A_{11} = \sqrt{\frac{m}{M}} A_{21} = A_{31}. \tag{32.12}$$



Unter Berücksichtigung der Faktoren $1/\sqrt{m_i}$ sind die Auslenkungen aller drei Massen gleich groß. Diese 'Eigenfrequenz' beschreibt die Translationsbewegung des gesamten Moleküls. Wir normieren noch die Koeffizienten

$$A_{11}^2 + A_{21}^2 + A_{31}^2 = (1 + \frac{2m}{M})A_{21}^2 = 1 \tag{32.13}$$

mit dem Ergebnis

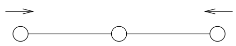
$$A_{21} = \sqrt{\frac{M}{2m+M}}, \quad A_{11} = A_{31} = \sqrt{\frac{m}{2m+M}}. \tag{32.14}$$

b) Für $\omega_2^2 = \frac{f}{m}$ erhalten wir die Gleichung

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & 0 \\ -\frac{f}{\sqrt{mM}} & \frac{2f}{M} - \frac{f}{m} & -\frac{f}{\sqrt{mM}} \\ 0 & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{12} \\ A_{22} \\ A_{32} \end{pmatrix} = 0 \tag{32.15}$$

mit der Lösung

$$A_{22} = 0, \quad A_{32} = -A_{12}. \tag{32.16}$$



Diese Lösung beschreibt ein Gegeneinander-Schwingen der beiden äußeren Massen, während die mittlere in Ruhe bleibt. Die Normierung ist mit

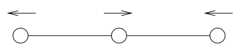
$$A_{12} = \sqrt{\frac{1}{2}}, \quad A_{22} = 0, \quad A_{32} = -\sqrt{\frac{1}{2}} \tag{32.17}$$

erfüllt.
c) Für $\omega_3^2 = \frac{f}{m} + \frac{2f}{M}$ ist die Gleichung

$$\begin{pmatrix} -\frac{2f}{M} & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & 0 \\ -\frac{f}{\sqrt{mM}} & -\frac{f}{m} & -\frac{f}{\sqrt{mM}} \\ 0 & -\frac{f}{\sqrt{mM}} & -\frac{2f}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{13} \\ A_{23} \\ A_{33} \end{pmatrix} = 0 \tag{32.18}$$

zu lösen. Man findet

$$A_{13} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{M}{m}} A_{23} = A_{33}. \tag{32.19}$$



Bei dieser Lösung schwingen die beiden äußeren Massen in gleicher Phase, die mittlere in Gegenphase. Die Normierung erfüllen wir mit

$$A_{23} = \sqrt{\frac{2m}{M+2m}}, \quad A_{13} = A_{33} = -\sqrt{\frac{M}{2(M+2m)}}. \tag{32.20}$$

Insgesamt erhalten wir mit (32.10) die Lösung

$$\eta_1 = \frac{\zeta_1(t)}{\sqrt{2m+M}} + \frac{\zeta_2(t)}{\sqrt{2m}} - \sqrt{\frac{M}{2m(M+2m)}}\zeta_3(t), \tag{32.21}$$

$$\eta_2 = \frac{\zeta_1(t)}{\sqrt{2m+M}} + \sqrt{\frac{2m}{M(M+2m)}}\zeta_3(t), \tag{32.22}$$

$$\eta_3 = \frac{\zeta_1(t)}{\sqrt{2m+M}} - \frac{\zeta_2(t)}{\sqrt{2m}} - \sqrt{\frac{M}{2m(M+2m)}}\zeta_3(t), \tag{32.23}$$

$$\zeta_1(t) = c_1 + \bar{c}_1 t, \qquad \zeta_{2,3}(t) = \Re(c_{2,3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{2,3}t}). \tag{32.24}$$

33 Lineare Kette

33.a Bewegungsgleichungen

Wir betrachten eine lineare Kette von N gleichen Massen m mit Ruhelage an den Orten $x_j = ja$. Dabei ist a der Gitterabstand. Diese werden ausgelenkt nach $q_j(t) = x_j + \eta_j(t)$. Deren kinetische Energie ist

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2} m \sum_j \dot{\eta}_j^2. \tag{33.1}$$

Die potentielle Energie ergibt sich zu

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} f \sum_j (\eta_i - \eta_{j+1})^2. \tag{33.2}$$

wenn wir annehmen, dass jeweils zwischen nächsten Nachbarn eine Kraftkonstante f wirkt. Damit ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$m\ddot{\eta}_j = -f(\eta_j - \eta_{j-1}) - f(\eta_j - \eta_{j+1}). \tag{33.3}$$

Mit dem Ansatz

$$\eta_j = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_\lambda \Re \left(A_{j\lambda} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t} \right) \tag{33.4}$$

folgt

$$-m\omega_\lambda^2 A_{j\lambda} = f(A_{j-1,\lambda} + A_{j+1,\lambda} - 2A_{j\lambda}). \tag{33.5}$$

Lösungen können wir nun dadurch finden, dass wir verlangen, dass sich $A_{j\lambda}$ beim Erhöhen des Index j um 1 jeweils mit einem Faktor z_λ multipliziert

$$A_{j+1,\lambda} = z_\lambda A_{j\lambda}. \tag{33.6}$$

Dann reduzieren sich die Gleichungen (33.5) unabhängig von j auf

$$-m\omega_\lambda^2 = f(z_\lambda^{-1} + z_\lambda - 2). \tag{33.7}$$

Daher ist bei gegebener Frequenz ω_λ^2 neben z_λ auch z_λ^{-1} Lösung. Zur Bestimmung der ω bzw. z kommt es auf die Randbedingungen an.

33.b Randbedingungen

Wir betrachten im Folgenden drei Arten von Randbedingungen:

33.b.α Periodische Randbedingungen

Für ein ausgedehnetes System ist es häufig am einfachsten, periodische Randbedingungen anzunehmen. Dies ergibt zum Beispiel, wenn man sich für die Gitterschwingungen (quantenmechanisch Phononen) im Innern eines Kristalls interessiert, Ergebnisse, die von den tatsächlichen nur unwesentlich abweichen. Interessiert man sich aber für das Verhalten der Schwingungen nahe der Oberfläche, so muss man die tatsächlichen Randbedingungen berücksichtigen.

Periodische Randbedingungen werden dadurch eingeführt, dass man

$$\eta_{j+N} = \eta_j \tag{33.8}$$

verlangt. Dann wiederholt sich die Bewegung nach N Gitterpunkten periodisch. Daher muss dann

$$z_\lambda^N = 1 \tag{33.9}$$

gelten, woraus

$$z_\lambda = \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i}\lambda/N}, \quad \lambda \text{ ganz} \tag{33.10}$$

folgt. Damit erhalten wir

$$A_{j\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i}\lambda j/N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx_j}, \tag{33.11}$$

wobei wir k aus

$$\frac{2\pi\lambda}{N} j = kaj \tag{33.12}$$

erhalten, also ist

$$k = \frac{2\pi\lambda}{Na} \tag{33.13}$$

Dabei ist k die Wellenzahl. Sie ist mit der Wellenlänge l verknüpft durch $k = 2\pi/l$, da l der kleinste positive Wert ist, der $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kl} = 1$ löst. Aus Gleichung (33.7) erhalten wir dann

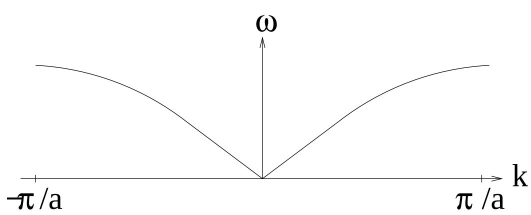
$$-m\omega^2 = f(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} - 2) = -2f(1 - \cos(ka)) = -4f \sin^2(\frac{ka}{2}), \tag{33.14}$$

woraus

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4f}{m}} |\sin(\frac{ka}{2})| \tag{33.15}$$

folgt.

Erhöht man λ um N, so erhält man wieder die gleichen Werte für z. Man beschränkt sich daher auf ein bestimmtes Intervall für λ, in der Regel verlangt man $-N/2 < \lambda \leq +N/2$, was $-\pi/a < k \leq +\pi/a$ entspricht. Diesen Bereich von ks nennt man (erste) Brillouinzone.



33.b.β Eingespannte Enden

Wir betrachten nun den Fall, dass die Enden eingespannt sind. Das entspricht den Bedingungen

$$A_0 = A_{N+1} = 0. \tag{33.16}$$

Hier ist es nützlich, dass für gegebenes ω^2 sowohl z als auch z^{-1} Lösung sind. Wir können daher die Lösung mit z und z^{-1} einander überlagern

$$A_j = bz^j + b'z^{-j} \tag{33.17}$$

Aus

$$A_0 = b + b' = 0, \quad A_{N+1} = bz^{N+1} + b'z^{-N-1} \tag{33.18}$$

folgt dann $b' = -b$ und $z^{2N+2} = 1$ und damit

$$ka = \frac{\pi\lambda}{N+1}, \lambda = 1, 2, ...N. \tag{33.19}$$

und

$$A_{j\lambda} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin(kx_j) \tag{33.20}$$

Wir erhalten hier also stehende Wellen.

33.b.γ Freie Enden

Sind die Enden frei, so fehlt den Massen an den Enden, das heißt bei x_1 und x_N ein Nachbar, der eine Kraft ausüben könnte. Da diese Kraft fehlt, ist dies äquivalent zu den Bedingungen, dass der Nachbar gleich weit ausgelenkt ist, also

$$A_1 = A_0, \quad A_N = A_{N+1}, \tag{33.21}$$

Wir setzen wieder

$$A_j = bz^j + b'z^{-j} \tag{33.22}$$

an und erhalten

$$b(z-1) + b'(z^{-1} - 1) = 0, \quad b(z-1)z^N + b'(z^{-1} - 1)z^{-N} = 0, \tag{33.23}$$

woraus $z^{2N} = 1$ mit der Lösung

$$ka = \frac{\pi\lambda}{N}, \quad \lambda = 0, 1, ...N-1 \tag{33.24}$$

und

$$A_{j\lambda} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{N}} \cos(k(x_j - \frac{a}{2})) & k \neq 0 \\ \sqrt{\frac{1}{N}} & k = 0 \end{cases} \tag{33.25}$$

Die Lösung für $k = 0$ entspricht einer Translationsbewegung der gesamten Kette.

Für festeingespannte Enden und freie Enden haben wir jeweils stehende Wellen erhalten. Wir können diese auch bei periodischen Randbedingungen erhalten, indem wir die Wellen mit Wellenvektoren k und $-k$ überlagern. Allerdings haben wir bei periodischen Randbedingungen auch Wellen, die durch die Kette laufen aus

$$\eta_j = \frac{1}{\sqrt{Nm}} \Re e^{i(kx_j - \omega t)} = \frac{1}{\sqrt{Nm}} \cos(kx_j - \omega t). \tag{33.26}$$

G Kontinuumsmechanik

34 Kontinuumslimes

34.a Harmonische Näherung

Wir betrachten anfangs wieder Massenpunkte an Orten

$$\mathbf{q}_j(t) = \mathbf{x}_j + \boldsymbol{\eta}_j(t), \tag{34.1}$$

wobei die $\mathbf{x}_j$ die Ruhelagen und die $\boldsymbol{\eta}$ die Auslenkungen aus den Ruhelagen angeben. Dann erhalten wir die kinetische Energie

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2}\sum_j m_j \dot{\boldsymbol{\eta}}_j^2(t) \tag{34.2}$$

und die potentielle Energie

$$\begin{aligned}\mathcal{V} &= \frac{1}{2}\sum_{ij}\mathcal{V}(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|) = \frac{1}{2}\sum_{ij}(\mathcal{V}(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) + (\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j)\mathrm{grad}_i\mathcal{V}(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) \\ &+ \frac{1}{2}(\eta_{i\alpha} - \eta_{j\alpha})(\eta_{i\beta} - \eta_{j\beta})\underbrace{\frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}}\frac{\partial}{\partial x_{i\beta}}\mathcal{V}(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)}_{\mathcal{V}_{ij,\alpha\beta}} + O(\eta_i - \eta_j)^3).\end{aligned} \tag{34.3}$$

Diese Darstellung ist vereinfacht. Tatsächlich sind die Potentiale nicht notwendigerweise Zweiteilchenpotentiale. Doch erhält man in jedem Fall eine Entwicklung der Form

$$\mathcal{V} = \text{const.} + \frac{1}{4}\sum_{ij}(\eta_{i\alpha} - \eta_{j\alpha})(\eta_{i\beta} - \eta_{j\beta})\mathcal{V}_{ij,\alpha\beta}. \tag{34.4}$$

Die linearen Terme fallen weg, da das System im Gleichgewicht sein soll. Greifen jedoch an der Berandung Kräfte an, die den Körper unter Spannung setzen, dann sind auch lineare Terme an der Oberfläche zu berücksichtigen, die den Kräften an der Berandung das Gleichgewicht halten.

34.b Lineare Kette

Wir betrachten nun den Grenzübergang zum Kontinuum für eine lineare Kette. Dort haben wir natürlich nur eine Auslenkung $\eta_i(t)$ in eine Richtung. Wir nehmen nun an, η variiere nur wenig auf atomarem Abstand und setzen

$$\eta_i(t) = \eta(x_i, t) \tag{34.5}$$

und betrachten $\eta(x,t)$ als eine glatte Funktion, die mehrfach nach x differenzierbar ist. Dann geht die kinetische Energie über

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2}\sum_j m\dot{\eta}^2(x_j,t) = \frac{1}{2}\sum_j \mu a\dot{\eta}^2(x_j,t) \to \frac{1}{2}\mu\int \mathrm{d}x\dot{\eta}^2(x,t). \tag{34.6}$$

Dabei ist a die Gitterkonstante und $\mu = \frac{m}{a}$ die Massendichte (pro Länge). Zur Kontinuums-Darstellung der potentiellen Energie verwenden wir

$$\eta_i = \eta(x_i) = \eta(x_j + x_i - x_j) = \eta(x_j) + (x_i - x_j)\frac{\partial\eta(x_j)}{\partial x_j} \tag{34.7}$$

und erhalten damit

$$\mathcal{V} = \frac{1}{4}\sum_{ij}(x_i - x_j)^2\left(\frac{\partial\eta(x_j)}{\partial x_j}\right)^2\mathcal{V}_{ij,11} = \frac{1}{2}\sum_j a\left(\frac{\partial\eta(x_j)}{\partial x_j}\right)^2\underbrace{\sum_i (x_i - x_j)^2\frac{1}{2a}\mathcal{V}_{ij,11}}_{Y}, \tag{34.8}$$

wobei der unterklammerte Ausdruck Y als Youngscher Elastizitätsmodul bezeichnet wird. Im Kontinuums-Limes können wir dann die potentielle Energie als

$$\mathcal{V} = \frac{Y}{2}\int \mathrm{d}x\left(\frac{\partial\eta(x,t)}{\partial x}\right)^2 \tag{34.9}$$

schreiben und die Lagrange-Funktion als

$$\mathcal{L} = \int \mathrm{d}x\left(\frac{\mu}{2}\dot{\eta}(x,t)^2 - \frac{Y}{2}\left(\frac{\partial\eta(x,t)}{\partial x}\right)^2\right). \tag{34.10}$$

34.c Bravais-Gitter, elastischer Körper

Wir betrachten nun den einfachsten Fall eines elastischen Körpers: Massenpunkte einheitlicher Masse auf einem periodischen Gitter. Die kinetische Energie ist dann

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2}\sum_j m\dot{\boldsymbol{\eta}}^2(\mathbf{x}_j,t). \tag{34.11}$$

Für die Masse setze ich nun $m = v\rho$, wobei v das Volumen pro Massenpunkt und ρ die Massendichte ist. Dann erhalten wir im Kontinuums-Limes

$$\mathcal{T} = \frac{\rho}{2}\int \mathrm{d}^3x\dot{\boldsymbol{\eta}}^2(\mathbf{x},t). \tag{34.12}$$

Unter Verwendung von

$$\eta_{i\alpha} - \eta_{j\alpha} = (x_{i\gamma} - x_{j\gamma})\frac{\partial\eta_\alpha(\mathbf{x})}{\partial x_\gamma} \tag{34.13}$$

erhalten wir für die potentielle Energie

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_j v \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\gamma} \frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\delta} C_{\alpha\gamma,\beta\delta} \tag{34.14}$$

mit den elastischen Konstanten

$$C_{\alpha\gamma,\beta\delta} = \sum_i \frac{1}{2v} (x_{i\gamma} - x_{j\gamma})(x_{i\delta} - x_{j\delta}) \mathcal{V}_{ij,\alpha\beta} \tag{34.15}$$

Damit können wir die potentielle Energie in der Form

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3 x C_{\alpha\gamma,\beta\delta} \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\gamma} \frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\delta} \tag{34.16}$$

schreiben. Man sieht unmittelbar, dass die Symmetriebeziehung

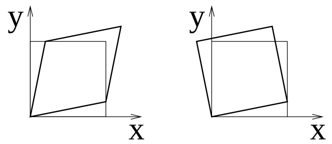
$$C_{\alpha\gamma,\beta\delta} = C_{\beta\delta,\alpha\gamma} \tag{34.17}$$

gilt. Wenn Zweiteilchen-Zentralkräfte wirken, gilt auch $C_{\alpha\gamma,\beta\delta} = C_{\alpha\delta,\beta\gamma}$. Jedoch zeigen Elastizitätsmessungen, dass diese Beziehung in der Regel verletzt ist.

Man zerlegt $\frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\gamma}$ in der Regel in zwei Anteile

$$\frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\gamma} = \epsilon_{\alpha\gamma} + \omega_{\alpha\gamma}, \tag{34.18}$$

wobei man fordert, dass ϵ symmetrisch und ω antisymmetrisch sind,



a) Verzerrung,
b) Drehung

$$\epsilon_{\alpha\gamma} = \epsilon_{\gamma\alpha}, \quad \omega_{\alpha\gamma} = -\omega_{\gamma\alpha} \tag{34.19}$$

oder

$$\epsilon_{\alpha\gamma} = \frac{1}{2}(\frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial \eta_\gamma}{\partial x_\alpha}), \quad \omega_{\alpha\gamma} = \frac{1}{2}(\frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\gamma} - \frac{\partial \eta_\gamma}{\partial x_\alpha}). \tag{34.20}$$

Dabei beschreibt ϵ die Verzerrung des Gitters. Man bezeichnet daher ϵ als den Verzerrungstensor. Dagegen beschreibt ω eine Drehung des Gitters. Hierzu betrachten wir das Abstands-Quadrat

$$(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)^2 = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^2 + 2(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)(\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j) + (\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j)^2 \tag{34.21}$$

und vernachlässigen den quadratischen Term $(\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j)^2$.[11] Dann finden wir neben dem konstanten $(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^2$ den Beitrag

$$2(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)(\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j) = 2(x_{i\alpha} - x_{j\alpha})(x_{i\gamma} - x_{j\gamma}) \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\gamma}. \tag{34.22}$$

[11] Es gibt Definitionen von ϵ, die es nicht nötig machen, diesen Term zu vernachlässigen. Doch gehen wir der Einfachheit halber hierauf nicht ein.

Wir können die Summations-Indices α und γ vertauschen und den bisherigen und den neuen Beitrag zur Hälfte addieren und erhalten

$$\begin{aligned} 2(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)(\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j) &= (x_{i\alpha} - x_{j\alpha})(x_{i\gamma} - x_{j\gamma}) \left(\frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial \eta_\gamma}{\partial x_\alpha} \right) \\ &= 2(x_{i\alpha} - x_{j\alpha})(x_{i\gamma} - x_{j\gamma})\epsilon_{\alpha\gamma}. \end{aligned} \tag{34.23}$$

Die Verzerrung hängt also nur von ϵ ab.

Die Drehung kostet keine Energie. Wir können daher die potentielle Energie auch

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3x C_{\alpha\gamma,\beta\delta}\epsilon_{\alpha\gamma}\epsilon_{\beta\delta} \tag{34.24}$$

schreiben. Man sieht, dass die C bezüglich Vertauschung der ersten beiden und der letzten beiden Indices invariant sind,

$$C_{\alpha\gamma,\beta\delta} = C_{\gamma\alpha,\beta\delta} = C_{\alpha\gamma,\delta\beta} = C_{\gamma\alpha,\delta\beta}, \tag{34.25}$$

da die ϵ symmetrisch sind.

Greifen an dem Festkörper noch äußere Kräfte an, so haben wir ein zusätzliches Potential

$$\mathcal{V}_{\mathrm{a}} = -\sum_i \mathbf{K}_i \cdot \boldsymbol{\eta}_i = -\int \mathrm{d}^3x \mathbf{k}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}), \tag{34.26}$$

wobei wir nach dem zweiten Gleichheitszeichen zum Kontinuums-Limes mit der Kraftdichte $\mathbf{k}$ (Kraft pro Volumen) übergegangen sind. Solche Kräfte sind beispielsweise Gravitationskräfte, aber vor allem auch Kräfte, die an der Oberfläche angreifen, und den Körper in einen Spannungszustand versetzen.