

KLASSISCHE MECHANIK

David Gross, David Wierichs, Markus Heinrich, Johan Åberg

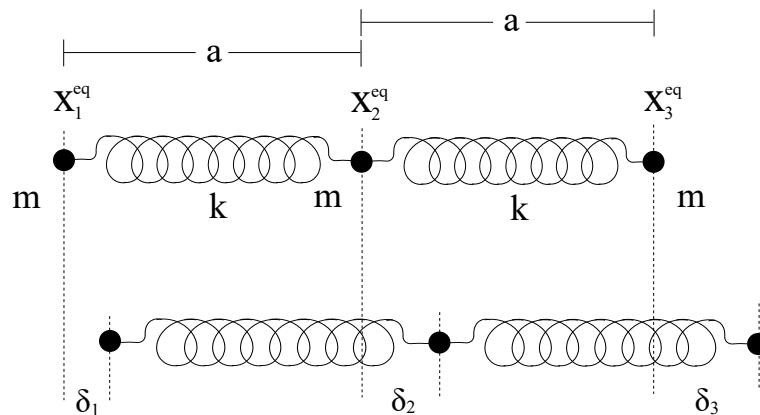
Übungsblatt 6 Abgabe: Donnerstag, 10. Dezember bis 24 Uhr

1 Lineares Molekül mit identischen Massen

In der Vorlesung haben wir die Vibration von N Teilchen bei periodischen Randbedingungen betrachtet. In dieser Aufgabe hingegen modellieren wir ein Molekül aus drei linear angeordneten Atomen der Masse m , deren Wechselwirkung durch das Potential

$$U(x_1, x_2, x_3) = \frac{k}{2}(x_2 - x_1 - a)^2 + \frac{k}{2}(x_3 - x_2 - a)^2,$$

beschrieben wird, wobei $k > 0$ und $a > 0$ sowie offene Randbedingungen gelten. Der Einfachheit halber betrachten wir hier nur die Bewegung der Atome entlang der Molekülachse.



Erinnern Sie sich aus der Vorlesung, dass die Bewegung von harmonisch wechselwirkenden Teilchen in besonders einfache Komponenten zerlegt werden kann, die sogenannten *Eigenmoden* oder *Normalmoden*. Für jede dieser Moden vollführen die Teilchen eine gemeinsame periodische Bewegung mit einer einzelnen Frequenz.

Das vorliegende Molekül befindet sich im mechanischen Gleichgewicht, wenn jedes Atom sich an seiner Gleichgewichtsposition befindet ($x_i = x_i^{\text{eq}}$ für $i \in \{1, 2, 3\}$), wobei $x_2^{\text{eq}} - x_1^{\text{eq}} = a$ und $x_3^{\text{eq}} - x_2^{\text{eq}} = a$. Es ist hilfreich, die *Abweichungen* von diesen Ruhelagen $\delta_i = x_i - x_i^{\text{eq}}$ als neue Koordinaten einzuführen. Bezüglich dieser neuen Koordinaten lautet das Potential

$$U(\delta_1, \delta_2, \delta_3) = \frac{k}{2}(\delta_2 - \delta_1)^2 + \frac{k}{2}(\delta_3 - \delta_2)^2.$$

a) In der Vorlesung haben Sie gesehen, dass man die Bewegungsgleichungen als

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{\delta} = M \vec{\delta}, \quad \vec{\delta} = \begin{bmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \\ \delta_3 \end{bmatrix} \quad (1)$$

schreiben kann, wobei M eine Matrix ist. *Bestimmen Sie die Matrix M .*

(2 Punkte)

b) Um die Eigenmoden zu ermitteln kann man den Ansatz $\vec{\delta}(t) = e^{i\omega t} \vec{v}$ wählen, wobei \vec{v} ein zeitunabhängiger Vektor und ω eine reelle Zahl ist. *Zeigen Sie, dass dies zu einem Eigenwertproblem der Form*

$$\lambda \vec{v} = M \vec{v} \quad (2)$$

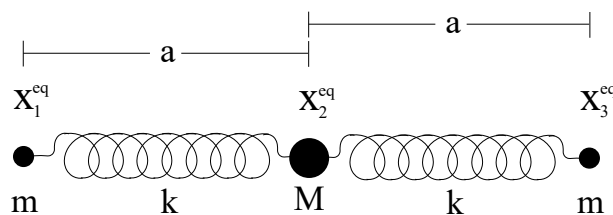
führt, wobei der Eigenwert λ eine Funktion von ω ist. Bestimmen Sie diese Funktion.

(1 Punkt)

- c) Berechnen Sie die Eigenwerte λ und die Eigenvektoren \vec{v} in (2). Was sind jeweils die erlaubten Werte für ω für jeden der Eigenwerte? **(3 Punkte)**
- d) Skizzieren Sie die Bewegung für die Eigenmoden des linearen Moleküls. Welche Bewegungsform gehört zum Eigenwert 0? Welches Erhaltungsgesetz ist mit diesem Eigenwert verknüpft? **(2 Punkte)**
- e) Verwenden Sie das Ergebnis aus c) um die entsprechenden Lösungen von (1) zu bestimmen. Wie kann man diese Lösungen kombinieren, um eine reellwertige Funktion (und damit eine physikalisch sinnvolle Bewegung) zu erhalten? **(2 Punkte)**

2 Lineares Molekül mit verschiedenen Massen

Wir modifizieren das Problem nun so, dass das Atom in der Mitte (mit Ruheposition x_2^{eq}) die Masse M hat, die von m verschieden sein kann. (Wir betrachten das gleiche Wechselwirkungspotential und weiterhin nur die eindimensionale Bewegung entlang der Molekülachse).



- a) Zeigen Sie, dass die Bewegungsgleichungen als

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{\delta} = \mathbf{W} \vec{\delta},$$

geschrieben werden können und bestimmen Sie die Matrix \mathbf{W} . Ist \mathbf{W} symmetrisch? Ist \mathbf{M} in Aufgabe 1 symmetrisch? **(2 Punkte)**

- b) Bestimmen Sie die Eigenwerte und die entsprechenden Eigenvektoren von \mathbf{W} . **(4 Punkte)**
- c) Sind die Eigenvektoren in b) zueinander orthogonal? Sind die Eigenvektoren in Aufgabe 1c) orthogonal zueinander? **(2 Punkte)**
- d) Das Spektrum von CO_2 könnte das Schicksal der Menschheit besiegeln. Die Berechnungen in dieser Aufgabe können bereits manche Vorhersagen seiner Eigenschaften liefern. Die Federkonstante k können wir hier nicht bestimmen, da dies ein quantenmechanisches Modell erfordert. Beachten Sie jedoch, dass das Verhältnis der Frequenzen nicht von k abhängt! Unsere einfache Theorie kann daher versuchen, einen Wert für das Verhältnis mancher Absorptionsfrequenzen atmosphärischen CO_2 vorherzusagen. Berechnen Sie das Verhältnis und vergleichen Sie es mit experimentellen Werten.

Hinweis: Eine geeignete Quelle könnten die Tabellen "NIST's Tables of Molecular Vibrational Frequencies" sein: <https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/Legacy/NSRDS/nbsnstrds39.pdf>

Schauen Sie nach "stretching modes", also den Dehnungs-/Stauchungsmoden – es gibt auch eine "bending mode", also Biegemode, die wir hier vernachlässigt haben. Eine der "stretching modes" ist wesentlich effizienter bei der Lichtabsorption als die andere, können Sie erraten, warum? **(2 Punkte)**