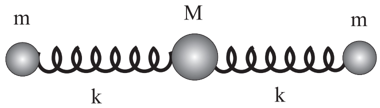
H. van Hees **Wintersemester 2023/2024**

Übungen zur Theoretischen Physik 1 für das Lehramt L3
Lösungen zu Blatt 10

Aufgabe 1: Eigenmoden eines dreiatomigen Moleküls

Diskutieren Sie die Eigenschwingungen eines dreiatomigen Moleküls. Im Gleichgewichtszustand des Moleküls haben die beiden Atome der Masse m den gleichen Abstand zum Atom der Masse M. Der Einfachheit halber betrachte man nur Schwingungen längs der Molekülachse, die die drei Atome verbindet, wobei das wirklich komplizierte zwischenatomare Potential durch zwei Federn (Federkonstante k) angenähert wird.

Gehen Sie dazu wie folgt vor:



(a) Stellen Sie die Lagrangefunktion auf und bestimmen Sie die Bewegungsgleichungen. Verwenden Sie als generalisierten Koordinaten die Auslenkungen $\vec{u} = (x_1, x_2, x_3)^{\mathrm{T}}$ der Moleküle aus ihrer Ruhelage entlang der Molekülachse.

Bringen Sie die Bewegungsgleichungen in die Form

$$\ddot{\vec{u}} = \hat{M}\vec{u} \tag{1}$$

mit einer 3×3-Matrix $\hat{M}$.

Lösung: Die Lagrangefunktion ist durch $L = T - V$ gegeben. Die kinetische Energie für die Bewegung in Richtung der Molekülachse ist

$$T = \frac{m}{2}\dot{x}_1^2 + \frac{M}{2}\dot{x}_2^2 + \frac{m}{2}\dot{x}_3^2. \tag{2}$$

Die potentielle Energie ist die Wechselwirkungsenergie zwischen Teilchen 1 und 2 bzw. 2 und 3 für harmonische Oszillatoren mit der Federkonstante k:

$$V = \frac{k}{2}(x_1 - x_2)^2 + \frac{k}{2}(x_2 - x_3)^2. \tag{3}$$

Die Lagrangefunktion ist also

$$L = T - V = \frac{m}{2}\dot{x}_1^2 + \frac{M}{2}\dot{x}_2^2 + \frac{m}{2}\dot{x}_3^2 - \frac{k}{2}(x_1 - x_2)^2 - \frac{k}{2}(x_2 - x_3)^2. \tag{4}$$

Zur Aufstellung der Bewegungslgleichungen (Euler-Lagrange-Gleichungen) berechnen wir zuerst die generalisierten Impulse

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} = m\dot{x}_1, \quad p_2 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} = M\dot{x}_2, \quad p_3 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_3} = m\dot{x}_3. \tag{5}$$

Dann lauten die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}
\dot{p}_1 &= \frac{\partial L}{\partial x_1} \Rightarrow m\ddot{x}_1 = -k(x_1 - x_2), \\
\dot{p}_2 &= \frac{\partial L}{\partial x_2} \Rightarrow M\ddot{x}_2 = k(x_1 - 2x_2 + x_3), \\
\dot{p}_3 &= \frac{\partial L}{\partial x_3} \Rightarrow m\ddot{x}_3 = -k(x_3 - x_2).
\end{aligned} \tag{6}$$

Dies können wir mit $\vec{u} = (x_1, x_2, x_3)^{\mathrm{T}}$ in die Form

$$\ddot{\vec{u}} = \hat{M}\vec{u} \tag{7}$$

mit der Matrix

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} -k/m & k/m & 0 \\ k/M & -2k/M & k/M \\ 0 & k/m & -k/m \end{pmatrix} \tag{8}$$

schreiben.

(b) Berechnen Sie die Eigenfrequenzen und diskutieren Sie die Eigenschwingungen des Systems, indem Sie den Exponentialansatz $(x_1, x_2, x_3)^{\mathrm{T}} = \vec{n}_\omega \exp(\mathrm{i}\omega t)$ in die Bewegungsgleichungen einsetzen und das enstehende Eigenwertproblem lösen, d.h. die Eigenfrequenzen ω und die dazugehörigen Eigenvektoren $\vec{n}_\omega$ bestimmen.

Lösung: Die Normalmoden sind nun die Lösungen des linearen Differentialgleichungssystems (7) in der angegebenen Form

$$\vec{u}(t) = \vec{n}_\omega \exp(\mathrm{i}\omega t) \tag{9}$$

gilt. Gehen wir mit diesem Ansatz in (7) ein, ergibt sich

$$-\omega^2 \vec{n}_\omega = \hat{M}\vec{n}_\omega, \tag{10}$$

und wir suchen nichttriviale Lösungen $\vec{n}_\omega \neq 0$ dieses homogenen linearen Gleichungssystems. Das bedeutet, daß $-\omega^2$ die Eigenwerte der Matrix $\hat{M}$ und die $\vec{n}_\omega$ die jeweils dazugehörigen Eigenvektoren sein müssen.

Das liefert die Bedingung

$$\det(\hat{M} + \omega^2 \mathbb{1}) = 0. \tag{11}$$

Für unsere Matrix (8) ergibt die Berechnung der Determinante die Gleichung

$$\left(\omega^2 - \frac{k}{m}\right)\left(\omega^2 - \frac{2m + M}{mM}k\right)\omega^2 = 0. \tag{12}$$

Das liefert die Eigenwerte

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{2m + M}{mM}k}, \quad \omega_3 = 0. \tag{13}$$

Die dazugehörigen (auf 1 normierten) Eigenvektoren sind

$$\vec{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2 + 4m^2/M^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2m/M \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Man beachte, daß die $\vec{u}_j$ ($j \in \{1,2,3\}$) linear unabhängig sind.

Für jede der Normalmoden folgt nun gemäß (9) und (10) mit dem Ansatz

$$\vec{u}(t) = A_j(t)\vec{u}_j \Rightarrow \ddot{\vec{u}} = \ddot{A}_j \vec{u}_j = -\omega_j^2 A_j \vec{u}_j \Rightarrow \ddot{A}_j = -\omega_j^2 A_j. \tag{15}$$

Für $\omega_j \neq 0$ ($j \in \{1,2\}$) ist die allgemeine Lösung dieser DGLs jeweils

$$A_j(t) = a_j \exp(\mathrm{i}\omega_j t) + b_j \exp(-\mathrm{i}\omega_j t) \tag{16}$$

und für $\omega_3 = 0$

$$A_3(t) = a_3 t + b_3. \tag{17}$$

Die allgemeine Lösung des Systems von Bewegungsgleichungen ist damit also

$$\vec{u}(t) = \sum_{j=1}^{3} A_j(t)\vec{u}_j. \tag{18}$$

Insgesamt enthält diese Gleichung die sechs Integrationskonstanten a_1, a_2, a_3 und b_1, b_2, b_3, die sich aus den sechs Anfangsbedingungen für Ort und Geschwindigkeit $\vec{u}(0)$ und $\dot{\vec{u}}(0)$ bestimmen lassen.

(c) Interpretieren Sie die durch die $\vec{n}_\omega$ definierten Eigenmoden physikalisch, d.h. diskutieren Sie, wie sich die drei Massenpunkte bewegen, wenn die Anfangsbedingungen so gewählt sind, dass sich diese speziellen Lösungen ergeben.

Lösungen: Die einzelnen Schwingungsmoden lassen sich entsprechend der Eigenvektoren wie folgt interpretieren: Die Lösung $\omega_3 = 0$ entspricht gemäß (17) der kollektiven Bewegung des gesamten Moleküls mit einer konstanten Geschwindigkeit, ohne daß das Molekül intrinsisch schwingt. Ist zusätzlich zu dieser freien Bewegung des Schwerpunktes die Eigenmode zur Eigenfrequenz ω_1 angeregt, schwingen die beiden Atome mit der Masse m gegeneinander mit derselben Amplitude relativ zur mittleren Masse M, die im Ruhsystem des Gesamtmoleküls, d.h. im Schwerpunktsystem, ruht. Ist hingegen die Mode mit der Eigenfrequenz ω_2 angeregt, schwingen die beiden Atome der Masse m mit gleicher Amplitude relativ zum Atom mit der Masse M in dieselbe Richtung gegeneinander, und das Atom mit der Masse M schwingt entgegengesetzt mit einer Amplitude im Verhältnis $2m/M$ zur Amplitude der beiden Atome mit der Masse m.

Hinweis: Die Rechnung ist sehr ähnlich wie die im Manuskript behandelte Lösung für das Doppelpendel in Abschnitt 4.1.