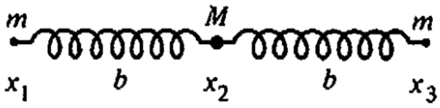
Majhna nihanja v linearni troatomni molekuli

Jakob Turk

4. junij 2015

Linearno simetrično troatomno molekulo (pomislimo na CO_2) si lahko v grobem klasičnem približku zamislimo kot tri masne točke povezane z dvema vzmetema, kjer imata robni točki (atoma) maso m, osrednja točka maso M, vzmeti pa koeficient k in dolžino v neobremenjenem stanju b. S takim opisom bomo torej obravnavali le nihanja teh treh mas v smeri osi sistema. To os imenujmo x.



Slika 1: Model linearne simetrične troatomne molekule.[1]

Koordinate posameznih točkastih mas označimo z x_1, x_2, x_3. Potencialna energija V, ki jo povzročata vzmeti med masami, se tako izraža kot:

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

Odvod potencialne energije V po vsaki od treh koordinat enačimo z nič, da poiščemo ravnovesno lego.

$$\frac{\partial V}{\partial x_1} = k(x_2 - x_1 - b)(-1) = 0$$

$$\frac{\partial V}{\partial x_2} = k((x_2 - x_1 - b) - (x_3 - x_2 - b)) = k(x_2 - x_1 - x_3 + x_2) = 0$$

$$\frac{\partial V}{\partial x_3} = k(x_3 - x_2 - b) = 0$$

Dobimo

$$\begin{aligned} x_{2_0} - x_{1_0} &= b \\ x_{2_0} - x_{1_0} &= x_{3_0} - x_{2_0} \\ x_{3_0} - x_{2_0} &= b. \end{aligned}$$

[1] Vse slike iz [1].

S pomočjo teh enačb ustvarimo nove koordinate, ki predstavljajo odmik od ravnosvesne lege:

$$\begin{aligned} \eta_1 &= x_1 - x_{1_0} & \eta_1 &= a_1 e^{i\omega t} \\ \eta_2 &= x_2 - x_{2_0} & \eta_2 &= a_2 e^{i\omega t} \\ \eta_3 &= x_3 - x_{3_0} & \eta_3 &= a_3 e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

Enačbe na desni (točneje: uporabo enake frekvence ω v vseh treh enačbah) si dovolimo, ker bomo govorili le o lastnih frekvencah in lastnih nihanjih sistema.

Z novimi koordinatami, ki predstavljajo gibanje okrog ravnovesne lege, lahko precej enostavno zapišemo kinetično in potencialno energijo ter Lagrangeovo funkcijo.

$$\begin{aligned} T &= \frac{m}{2}\dot{\eta}_1^2 + \frac{M}{2}\dot{\eta}_2^2 + \frac{m}{2}\dot{\eta}_3^2 \\ V &= \frac{k}{2}(\eta_2 - \eta_1)^2 + \frac{k}{2}(\eta_2 - \eta_1)^2 \\ L = T - V &= \frac{m}{2}(\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{M}{2}\dot{\eta}_2^2 - \frac{k}{2}(2\eta_2^2 + \eta_1^2 + \eta_3^2 - 2\eta_2\eta_1 - 2\eta_3\eta_2) \end{aligned}$$

Z upoštevanjem Lagrangeove enačbe $\frac{\partial}{\partial t}(\frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_i}) - \frac{\partial L}{\partial \eta_i} = 0$ dobimo sistem treh diferencialnih enačb:

$$\begin{aligned} m\ddot{\eta}_1 + k\eta_1 - k\eta_2 &= 0 \\ M\ddot{\eta}_2 + 2k\eta_2 - k\eta_1 - k\eta_3 &= 0 \\ m\ddot{\eta}_3 + k\eta_3 - k\eta_2 &= 0. \end{aligned}$$

Odvajamo η_j

$$\begin{aligned} \eta_j &= a_j e^{-i\omega t} \\ \ddot{\eta}_j &= (-1)^2 i^2 \omega^2 a_j e^{-i\omega t} \\ &= -\omega^2 \eta_j \end{aligned}$$

in opazimo, da dobimo sistem treh linearnih enačb, ki ga lahko zapišemo v matrični obliki kot

$$\begin{bmatrix} k - m\omega^2 & -k & 0 \\ -k & 2k - M\omega^2 & -k \\ 0 & -k & k - m\omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{bmatrix} = 0.$$

Determinanto dobljene matrike nato enačimo z nič, da poiščemo lastne frekvence ω_i.

$$\begin{vmatrix} k - m\omega^2 & -k & 0 \\ -k & 2k - M\omega^2 & -k \\ 0 & -k & k - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$= \begin{vmatrix} k - m\omega^2 & -k & 0 \\ -k & 2k - M\omega^2 & -k \\ -k + m\omega^2 & 0 & k - m\omega^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} k - m\omega^2 & -k & 0 \\ -2k & 2k - M\omega^2 & -k \\ 0 & 0 & k - m\omega^2 \end{vmatrix} =$$

$$= (k-m\omega^2) \begin{vmatrix} k - m\omega^2 & -k \\ -2k & 2k - M\omega^2 \end{vmatrix} = (k-m\omega^2)((k-m\omega^2)(2k-M\omega^2)-2k^2) =$$

$$= (k - m\omega^2)(2k^2 - kM\omega^2 - 2km\omega^2 + mM\omega^4 - 2k^2) =$$

$$= \omega^2(k - m\omega^2)(-kM - 2km + mM\omega^2) = 0$$

$$\omega^2(k - m\omega^2)(k(M + 2m) - \omega^2 Mm) = 0$$

kar nas pripelje do treh lastnih frekvenc:

$$\omega_1 = 0, \qquad \omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \qquad \omega_3 = \sqrt{\frac{k}{m}\Big(1 + \frac{2m}{M}\Big)}.$$

Prva rešitev, $\omega_1 = 0$, je na prvi pogled čudna. Ta rešitev predstavlja preprosto translacijo. Tudi ob translaciji vseh treh mas po osi x se namreč potencialna energija sistema ne spreminja. To je torej nekakšno indiferentno ravnovesje - odvod potenciala bo vseeno 0, zato je ta rešitev sploh nastopila. Ker pa sile, ki bi bila povezana s potencialom in nasprotovala takšnemu gibanju, ni, dobimo frekvenco enako 0.

Zanimajo nas še lastne amplitude v dobljenih treh nihajnih načinih (torej, pri treh različnih ω). Še enkrat zapišemo sistem treh enačb:

$$\begin{bmatrix} k - m\omega^2 & -k & 0 \\ -k & 2k - M\omega^2 & -k \\ 0 & -k & k - m\omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} e^{-i\omega t} = 0.$$

ali

$$(k - m\omega_i^2)a_{1i} - ka_{2i} = 0 \tag{1}$$

$$-ka_{1i} + (2k - M\omega_i^2)a_{2i} - ka_{3i} = 0 \tag{2}$$

$$-ka_{2i} + (k - m\omega_i^2)a_{3i} = 0. \tag{3}$$

Za $\omega_1 = 0$ lahko hitro iz 1 in 3 dobimo $a_{11} = a_{21} = a_{31}$ in lastni vektor $\mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$. Kot rečeno, nam ta 'frekvenca' in vektor nihajnega načina opisujeta translacijo.

Slika 2: Lastni vektorji nihajnega načina pri $\omega_1 = 0$

Ko $\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ vstavimo v 1, izgubimo prvi člen. Tako ostane $a_{22} = 0$. To vstavimo še v 2 in ostane nam $-a_{12} = a_{32}$. Torej $\mathbf{a}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$. Ta rezultat

Slika 3: Lastni vektorji nihajnega načina pri $\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}$

je nekako možno predvideti - v tem nihajnem načinu je osrednji delec pri miru, robna pa nihata s faznim zamikom $\frac{\pi}{2}$.

Pri $\omega_3 = \sqrt{\frac{k}{m}(1 + \frac{2m}{M})}$ spet začnemo z enačbo 1:

$$(k - m\frac{k}{m}(1 + \frac{2m}{M}))a_{13} - ka_{23} = -k\frac{2m}{M}a_{13} - ka_{23} = 0.$$

Velja torej $a_{13} = -\frac{M}{2m}a_{23}$. Podoben rezultat dobimo še iz enačbe 3, $a_{33} = -\frac{M}{2m}a_{23}$, in končno $\mathbf{a}_3 = \begin{bmatrix} -\frac{M}{2m} \\ 1 \\ -\frac{M}{2m} \end{bmatrix}$.

Slika 4: Lastni vektorji nihajnega načina pri $\omega_3 = \sqrt{\frac{k}{m}(1 + \frac{2m}{M})}$

Od treh nihajnih načinov je ta morda najbolj zanimiv. Tu robna delca nihata v fazi, osrednji pa s faznim zamikom $\frac{\pi}{2}$. Tudi amplitude se med robnima in osrednjim delcem razlikujejo. Amplituda robnih delcev je namreč glede na osrednjega skalirana z $\frac{M}{2m}$. Če je torej $M > 2m$, nihata robna delca z manjšo amplitudo kot srednji. Bolj kot gre masa osrednjega delca proti visokim vrednostim, manjša je amplituda njegovega nihanja in večja je amplituda robnih dveh. V primeru, da je $M < 2m$, pa niha z večjo amplitudo srednji delec. Če imata robna delca torej izjemno visoko maso, sta njuni amplitudi lahko izjemno majhni v primerjavi z izjemno veliko amplitudo osrednjega delca. Ko je $M = 2m$, so amplitude vseh treh delcev enake.

Literatura

[1] H. Goldstein, et al., Classical Mechanics (Pearson Education, San Francisco, 2002)