Übung zur Vorlesung
Theoretische Physik I

SoSe 2016 | **Blatt 13** | **22.07.2016**

Aufgabe 38 *Lineares dreiatomiges Molekül*

Betrachten Sie ein System bestehend aus drei Atomen der Massen $m_1 = m$, $m_2 = M$ und $m_3 = m$, die sich auf einer Linie befinden (siehe Abbildung 1). Die Atome 1 und 3 wechselwirken mit dem Atom 2 über das elastische Potential

$$V(\Delta x) = \frac{k}{2}\Delta x^2\,, \tag{1}$$

wobei k die Elastizitätskonstante und Δx die Auslenkung aus der Gleichgewichtslage bezeichnen. Im Gleichgewicht haben die Atome 1 und 3 jeweils den Abstand b vom Atom 2. Im Folgenden betrachten wir nur die Bewegung entlang der Molekülachse.

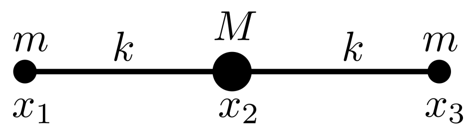

Abbildung 1: Lineares dreiatomiges Molekül

a) Geben Sie die potentielle Energie $V(x_1, x_2, x_3)$ als Funktion der Koordinaten der drei Atome an. *(1 Punkt)*

b) Geben Sie die potentielle Energie V und die kinetische Energie T als Funktion der Koordinaten

$$\eta_i = x_i - x_i^0, \quad i = 1, 2, 3 \tag{2}$$

an, wobei x_i^0 die jeweiligen Gleichgewichtslagen bezeichnen. *(2 Punkte)*

c) Nutzen Sie die Definitionen

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2}\sum_{i,j}\mathcal{V}_{ij}\eta_i\eta_j\,, \\ T &= \frac{1}{2}\sum_{i,j}\mathcal{T}_{ij}\dot{\eta}_i\dot{\eta}_j \end{aligned} \tag{3}$$

um die Matrizen $\mathcal{V}$ und $\mathcal{T}$ anzugeben und finden Sie die Resonanzfrequenzen ω_1, ω_2 und ω_3 des Systems für welche die Sekulargleichung

$$(\mathcal{V} - \omega_i^2\mathcal{T})\boldsymbol{a} = 0, \quad \boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^3 \tag{4}$$

nicht-triviale Lösungen besitzt. *(3 Punkte)*

d) Finden Sie die Eigenvektoren der Sekulargleichung (4) und diskutieren Sie die Normalmoden der Schwingung. *(4 Punkte)*

e) Das Problem des linearen dreiatomigen Moleküls kann auf ein Problem mit nur zwei Freiheitsgraden reduziert werden. Formulieren Sie das Problem unter Verwendung der Variablen $y_1 = x_2 - x_1$ und $y_2 = x_3 - x_2$ und eliminieren Sie die Koordinate x_2 unter der Bedingung, dass der Massenschwerpunkt in Ruhe verharrt. Finden Sie die Resonanzfrequenzen und vergleichen Sie diese mit dem Ergebnis vom Punkt c). *(4 Punkte)*