Einführung in die Physikalische Chemie, Mathematische Methoden (B) SS 14

Blatt 6

Aufgabe 21

a)

Koordinaten des Schwerpunktes:

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \qquad (1)$$

Relativkoordinaten:

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \;\Rightarrow\; \vec{r}_2 = \vec{r} + \vec{r}_1 \qquad (2)$$

Einsetzen von Gl. (2) in Gl. (1) ergibt:

$$\vec{R} = \frac{(m_1 + m_2)\vec{r}_1 + m_2\vec{r}}{m_1 + m_2}$$

$$\Rightarrow \quad \vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\vec{r} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\dot{\vec{r}}_1 = \dot{\vec{R}} - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\dot{\vec{r}}} \qquad (3)$$

Aus Gl. (2) folgt:

$$\vec{r}_2 = \vec{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\vec{r} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\dot{\vec{r}}_2 = \dot{\vec{R}} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\dot{\vec{r}}} \qquad (4)$$

Einsetzen in die Gleichung für die kinetische Energie ergibt:

$$T = \frac{m_1}{2}\left(\dot{\vec{R}} - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\dot{\vec{r}}\right)^2 + \frac{m_2}{2}\left(\dot{\vec{R}} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\dot{\vec{r}}\right)^2$$

$$= \frac{m_1 + m_2}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{m_1 m_2^2 + m_2 m_1^2}{m_1 + m_2}\right)\dot{\vec{r}}^2 = \frac{m_1 + m_2}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\right)\dot{\vec{r}}^2$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{T = \frac{M}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{\mu}{2}\dot{\vec{r}}^2} \quad \text{mit} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \text{(reduzierte Masse)}$$

$$\text{und} \quad M = m_1 + m_2 \quad \text{(Gesamtmasse des Systems)}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{L = T - V = \frac{M}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{\mu}{2}\dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r})} \quad \text{(Lagrange} - \text{Funktion)}$$

b)

Aufstellen der Lagrange-Funktion unter Berücksichtigung der gegebenen Bedingungen:

$$L = T - V = \frac{\mu}{2}\dot{r}^2 - \frac{1}{2}kr^2$$

Einschub:

Frage: Warum ist $\dot{\vec{r}}^2 = \dot{r}^2$ für $l = 0$?

Antwort: (am Beispiel einer 2D-Bewegung)

Da das Potential sphärische Geometrie besitzt, ist es zweckmäßig, den Ortsvektor $\vec{r}$ auch in sphärischen Koordinaten auszudrücken:

$$\vec{r} = r\begin{pmatrix}\cos(\varphi)\\ \sin(\varphi)\end{pmatrix} \Rightarrow \dot{\vec{r}} = \begin{pmatrix}\dot{r}\cos(\varphi) - r\,\dot{\varphi}\sin(\varphi)\\ \dot{r}\sin(\varphi) + r\,\dot{\varphi}\cos(\varphi)\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\vec{r}}^2 = (\dot{r}\cos(\varphi) - r\,\dot{\varphi}\sin(\varphi))^2 + (\dot{r}\sin(\varphi) + r\,\dot{\varphi}\cos(\varphi))^2$$

$$= \dot{r}^2\cos^2(\varphi) + r^2\,\dot{\varphi}^2\sin^2(\varphi) - 2\,\dot{r}\,r\,\dot{\varphi}\cos(\varphi)\sin(\varphi)$$

$$+\dot{r}^2\sin^2(\varphi) + r^2\,\dot{\varphi}^2\cos^2(\varphi) + 2\,\dot{r}\,r\,\dot{\varphi}\cos(\varphi)\sin(\varphi)$$

$$= \dot{r}^2 + r^2\,\dot{\varphi}^2 = \dot{r}^2 + \frac{l^2}{r^2\mu^2} \quad \Rightarrow \boxed{f\ddot{u}r\ l = 0\ \text{gilt}\ \dot{\vec{r}}^2 = \dot{r}^2}$$

Was passiert für $l \neq 0$?

$$H = T + V_{\text{eff}} = \underbrace{\frac{\mu}{2}\dot{r}^2}_{\substack{\text{kinetische Energie}\\ \text{der radialen Bewegung}}} + \underbrace{\frac{l^2}{2\mu r^2}}_{\substack{\text{Zentrifugal-}\\ \text{Potential}}} + \underbrace{\frac{1}{2}kr^2}_{\substack{\text{harmonisches}\\ \text{Potential}}}$$

Es kommt zu einer Rotations-Schwingungskopplung!!!

Lagrange-Gleichung: (generalisierte Koordinate ist r)

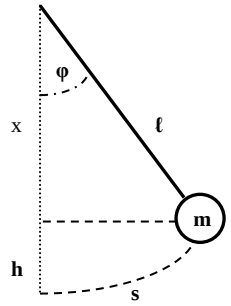
$$\frac{d}{dt}\frac{dL}{d\dot{r}} - \frac{dL}{dr} = \mu\ddot{r} + kr = 0$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\mu\ddot{r} = -kr} \quad \text{(Bewegungsgleichung eines 1D Harmonischen Oszillators)}$$

Frage: Welche molekularen Systeme lassen sich damit beschreiben?

Antwort: Nichtrotierende, schwingende Zweiatomige Moleküle!

Aufgabe 22



$x + h = \ell \quad ; x = \ell \cdot \cos\varphi \quad ; h = \ell - \ell \cdot \cos\varphi \quad ; s = \ell \cdot \varphi$

$T = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m \dot{s}^2 = \frac{1}{2} m \ell^2 \dot{\varphi}^2$

$V = m \cdot g \cdot h = m \cdot g \cdot \ell \cdot (1 - \cos\varphi)$

a) Lagrange: $L = T - V = \frac{1}{2} m \ell^2 \dot{\varphi}^2 - m \cdot g \cdot \ell \cdot (1 - \cos\varphi)$

in Gleichung $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0$ eingesetzt

$\rightarrow m \ell^2 \ddot{\varphi} + m \cdot g \cdot \ell \cdot \sin\varphi = 0$

$$\ddot{\varphi} + \frac{g}{\ell} \sin\varphi = 0 \qquad \text{q.e.d.}$$

b) Hamilton: $H = T + V$

$$p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = m \ell^2 \dot{\varphi}$$

$$T(p_\varphi) = \frac{p_\varphi^2}{2m\ell^2} \quad ; \quad V(\varphi) = m \cdot g \cdot \ell \cdot (1 - \cos\varphi)$$

$$\rightarrow H = \frac{p_\varphi^2}{2m\ell^2} + m \cdot g \cdot \ell \cdot (1 - \cos\varphi)$$

$$p_\varphi = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = -\, m \cdot g \cdot \ell \cdot \sin\varphi$$

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{m \cdot \ell^2} \rightarrow \ddot{\varphi} = \frac{\dot{p}_\varphi}{m \cdot \ell^2} = -\frac{g}{\ell} \sin\varphi$$

$$\rightarrow \ddot{\varphi} + \frac{g}{\ell} \sin\varphi = 0 \quad \text{q.e.d.}$$

Lösen der DGL für kleine Auslenkungen:

$\ddot{\varphi} + \frac{g}{\ell} \sin\varphi = 0$ für kleine Auslenkungen $\sin\varphi \approx \varphi$

➔ charakt. Gl.: $\lambda^2 + \omega^2 = 0$ mit $\omega = \sqrt{\frac{g}{\ell}}$

$\lambda_{1,2} = \pm i\omega$

$\varphi(t) = A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t)$

$\dot{\varphi}(t) = -\omega A\sin(\omega t) + \omega B\cos(\omega t)$

Randbedingungen:

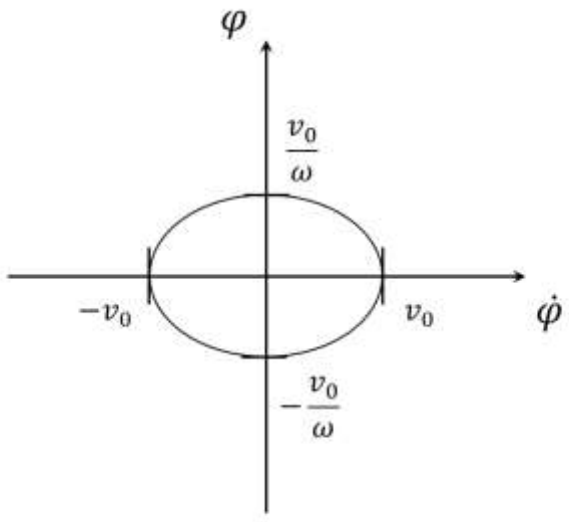
$\varphi(0) = 0 \;\Rightarrow\; A = 0$

$\dot{\varphi}(0) = v_0 \;\Rightarrow\; \omega B = v_0 \;\Rightarrow\; B = \frac{v_0}{\omega}$

$\Rightarrow\; \varphi(t) = \frac{v_0}{\omega}\sin(\omega t)$

$\Rightarrow\; \dot{\varphi}(t) = v_0\cos(\omega t)$

Trajektorie:



Alle Lösungen ohne Gewähr!!!