



Месечно списание за

Култура, Образование, Стопанство, Наука, Общество, Семейство

<http://www.kosnos.com>

Колебание на двуатомна молекула

Съдържание

1. Честота на вибрация на двуатомна молекула.
2. Център на масите.
3. Движение на отделните атоми.

Авторски права: Материалът или част от него могат да се използват свободно (копирани на друг сайт) в обучението на български или македонски студенти само ако в сайта изрично се цитира тази оригинална статия във вида: *П.Пенчев, Колебание на двуатомна молекула., Списание "Коснос", брой 35, 2009 г.* <http://www.kosnos.com>

Колебание на двуатомна молекула

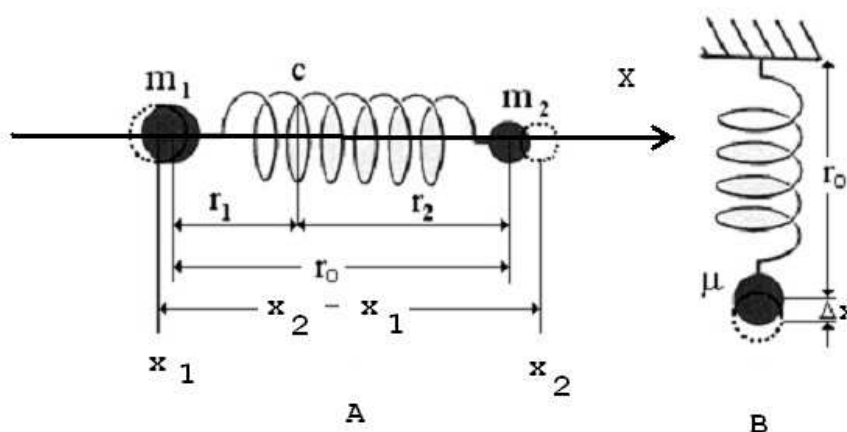
([съдържание на поредицата "Молекулна спектроскопия"](#))

В материала "[Вибрационна спектроскопия](#)" беше споменато без извод, че трептенето на двуатомните молекули, разглеждани като хармонични осцилатори, зависят от силовата константа на връзката и приведената маса на атомите. Или казано по-общо, задачата за движението на две тела (в случая имаме периодично движение - трептене) може да се приведе до задача за движение на едно тяло с маса, равна на приведената маса.

В настоящия материал ще разгледаме по-подробно колебанието (вибрацията) на двуатомна молекула като първо ще приведем системата от две уравнения на движение до едно уравнение. След това ще разгледаме вибрирането на отделните атоми и ще покажем, че те се движат с еднаква честота и еднаква фаза. Ще използваме класическото приближение за хармоничен осцилатор. Както беше изяснено в [гореспоменатия материал](#) то дава същата формула за честота на вибрация на молекулите както и квантовомеханичният модел. Също така, там може да намерите информация за физическия смисъл на величините и спектроскопското значение на този модел.

1. Честота на вибрация на двуатомна молекула. Избираме координатната система (фигура 1А) с ос x , ориентирана от m_1 към m_2 . При разтягане на пружината (връзката) на всяка от масите m_1 и m_2 действа една и съща по величина сила, но с различен знак. Величината на силата зависи от изменението на равновесното разстояние между двете маси, последното от които е равно на r_0 . Очевидно, че разстоянието между масите винаги е $x_2 - x_1$, и затова изменението на равновесното разстояние се дава като

$$\Delta x = x_2 - x_1 - r_0.$$



Фигура 1. Модел на двуатомна молекула, А, и модел В, когато задачата от две тела е приведена до задача за едно тяло с приведена маса μ .

При разтягане на пружината на първата маса действа сила надясно (пружината се стреми да се свие), т.е. при положително изменение на дължината между

масите силата е положителна, а на втората, поради същата причина силата е наляво, т.е. при положително изменение на дължината между масите силата е отрицателна. Тогава двете уравнения за втория закон на Нютон за двете маси в *хармонично приближение* (силата зависи линейно от изменението на разстоянието) са следните:

$$m_1 \frac{d^2 x_1}{dt^2} = k[(x_2 - x_1) - r_0] \quad (1)$$

$$m_2 \frac{d^2 x_2}{dt^2} = -k[(x_2 - x_1) - r_0]$$

Ако разделим първото уравнение на m_1 , а второто на m_2 , и от новополученото второ извадим новополученото първо ще получим следното уравнение:

$$\frac{d^2(x_2 - x_1)}{dt^2} = -k\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)[(x_2 - x_1) - r_0] \quad (2)$$

! Във физиката първа производна по времето се записва с точка върху величината, а втора - с две точки. По долу ще използваме традиционния запис с "прим" и "секонд".

!! Не забравяйте, че диференцирането от коя да е степен е линеен оператор и затова можем да запишем, че разлика от втори производни по времето на две величини е равна на втората производна по времето от разликата между тях. Също така в производната може да вмъкваме константа, защото коя да е производна от нея е нула.

Съгласно двете забележки лявата част на (2) беше преобразувана и може да се допреобразува така:

$$x_2'' - x_1'' = (x_2 - x_1)'' = (x_2 - x_1 - r_0)'' = \Delta x''$$

С $\Delta x = (x_2 - x_1 - r_0)$ означихме изменението на дължината на връзката. Както виждаме от (2) и новите преобразувания на лявата му част, Δx се среща в ляво и в дясно на израза. Допълнително, в дясната част намираме познатия израз за приведената маса μ , $1/\mu = 1/m_1 + 1/m_2$. С тези преобразувания от (2) получаваме изразът (3).

$$\frac{d^2 \Delta x}{dt^2} = -k \frac{1}{\mu} \Delta x \quad (3)$$

Това на практика е уравнение на трептене на една материална точка, закачена на една пружина, която има същите свойства като пружината между двата атома и има маса, равна на приведената маса на двата атома - вижте фигура [1B](#). Движението на тази маса се описва с една косинусоида (или синусоида, в зависимост от началната фаза φ_0), уравнение (4):

$$\Delta x = A \cos(\omega t + \varphi_0) \quad (4)$$

Величината A се нарича амплитуда, ω - кръгова честота, а както споменахме по-горе φ_0 е начална фаза на трептенето. Кръговата честота е равна на

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (5),$$

а честотата на трептене

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (6)$$

Написано уравнение (4) с честотата, а не кръговата честота изглежда по следния начин:

$$\Delta x = A \cos(2\pi\nu t + \varphi_0) \quad (4a)$$

Същият резултат е даден и в материала "[Вибрационна спектроскопия](#)", на който настоящия материал се явява един вид математическо допълнение.

2. Център на масите. От физиката е известно, че всяко едно движение на две тела може да бъде приведено математически в задача за движение на едно тяло с маса, равна на приведената маса на двете тела. Може да се докаже, че центърът на масите (тежестта) продължава да се движи праволинейно и без ускорение във външна отправна система, т.е. той не трепти.

При така избраната координатна система центърът на масите лежи на оста X и има координата

$$x_c = (m_1 x_1 + m_2 x_2) / (m_1 + m_2) \quad (7a)$$

! Координатите y_c и z_c са равни на нула, понеже и y и z координатите на двете точки са равни на нула.

Изразът (7a) можем да запишем като (7b):

$$m_1 x_1 + m_2 x_2 = (m_1 + m_2) x_c \quad (7b)$$

Ако с r означим разстоянието между двата атома, то очевидно имаме

$$\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 = \mathbf{r} \quad (8)$$

Ако умножим (8) с m_1 и го съберем с израз (7b) получаваме

$$(m_1 + m_2)\mathbf{x}_2 = m_1\mathbf{r} + (m_1 + m_2)\mathbf{x}_c$$

което преобразуваме до

$$(m_1 + m_2)(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_c) = m_1\mathbf{r} \quad (9a)$$

или

$$(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_c) = m_1\mathbf{r}/(m_1 + m_2) \quad (9b)$$

Аналогично ако умножим (8) с m_2 и и го извадим от израз (7b) получаваме

$$(m_1 + m_2)\mathbf{x}_1 = -m_2\mathbf{r} + (m_1 + m_2)\mathbf{x}_c$$

което преобразуваме до

$$(m_1 + m_2)(\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_1) = m_2\mathbf{r} \quad (10a)$$

или

$$(\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_1) = m_2\mathbf{r}/(m_1 + m_2) \quad (10b)$$

Разделянето на (9a) на (10a) или (9b) на (10b) дава

$$(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_c)m_2 = m_1(\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_1) \quad (11a)$$

! Изразите (10a) и (10b) можем да получим направо от, съответно (9a) и (9b), просто като сменим номерацията в последните изрази, т.е. заменим 1 с 2 и 2 с 1 - това е така, защото не може произволна номерация да се отразява на формулите. Обърнете внимание, че при тази замяна \mathbf{r} сменя своя знак, защото става $\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$.

Ако вместо разстоянията в кой да е момент от време между атомите и центъра на масите и това между самите атоми, изберем съответните равновестни разстояния, то последните също ще задоволяват изразите (10a) и (10b) и (9a) и (9b) - за означенията вижте фигура [1A](#).

$$(m_1 + m_2)\mathbf{r}_2 = m_1\mathbf{r}_0 \quad (9c)$$

$$\mathbf{r}_2 = m_1\mathbf{r}_0/(m_1 + m_2) \quad (9d)$$

и за атом 1

$$(m_1 + m_2)\mathbf{r}_1 = m_2\mathbf{r}_0 \quad (10c)$$

$$r_1 = m_1 r_0 / (m_1 + m_2) \quad (10d)$$

Разделянето на (9c) на (10c) или (9d) на (10d) дава

$$m_2 r_2 = m_1 r_1 \quad (11b)$$

3. Движение на отделните атоми. Изразът (4a) може да преобразуваме по следния начин (прехвърляме r_0 отдясно):

$$x_2 - x_1 = r_0 + A \cos(2\pi\omega t + \varphi_0) \quad (4b)$$

$$m_1 x_1 + m_2 x_2 = (m_1 + m_2) x_c \quad (7b)$$

ако умножим (4b) с m_1 и го съберем със (7b) ще получим:

$$(m_1 + m_2) x_2 = (m_1 + m_2) x_c + m_1 [r_0 + A \cos(2\pi\omega t + \varphi_0)]$$

или

$$(x_2 - x_c) = [m_1 / (m_1 + m_2)] [r_0 + A \cos(2\pi\omega t + \varphi_0)] \quad (12a)$$

Аналогично, ако умножим (4b) с m_2 и го извадим от (7b) ще получим:

$$(m_1 + m_2) x_1 = (m_1 + m_2) x_c - m_2 [r_0 + A \cos(2\pi\omega t + \varphi_0)]$$

или

$$(x_c - x_1) = [m_2 / (m_1 + m_2)] [r_0 + A \cos(2\pi\omega t + \varphi_0)] \quad (12b)$$

Имайте предвид, че десните части на (12a) и (12b) не са удълженията на r_1 и r_2 , които ще означим с Δx_1 и Δx_2 ! За да получим Δx_2 , което е преместване на втория атом при трептенето, трябва от (12a) да извадим (9d)

$$r_2 = m_1 r_0 / (m_1 + m_2) \quad (9d)$$

Получаваме

$$\Delta x_2 = [(x_2 - x_c) - r_2] = [m_1 / (m_1 + m_2)] [A \cos(2\pi\omega t + \varphi_0)] \quad (13a)$$

Аналогично, ако от (12b) да извадим (10d)

$$r_1 = m_1 r_0 / (m_1 + m_2) \quad (10d)$$

получаваме

$$\Delta x_1 = [(x_c - x_1) - r_1] = [m_2 / (m_1 + m_2)] [A \cos(2\pi\omega t + \varphi_0)] \quad (13b)$$

Сравнението на (13a) и (13b) показва, че двата атома се движат с еднаква честота ω и еднаква начална фаза φ_0 . Това е много важен резултат, който за многоатомни молекули може да се обобщи, че при едно дадено нормално трептене атомите се движат с еднаква честота и еднаква фаза, като последното означава, че атомите достигат крайните си положения в един и същ момент от време.

Разбира се, амплитудите на отклоненията им не са равни, а в частен случай някои атоми не се движат при дадено нормално трептене на многоатомните молекули. В конкретния случай отношението на преместванията на атомите е обратно пропорционално на техните маси - вижте израз (14), който се получава при деление на (13a) на (13b).

$$\Delta x_2 / \Delta x_1 = m_1 / m_2 \quad (14a)$$

или

$$m_2 \Delta x_2 = m_1 \Delta x_1 \quad (14b)$$

На практика, отношенията (14) означава, че в общия случай амплитудите на трептенията не са равни (при неравни маси). Те са равни, само ако масите са равни. Ако не бяха изпълнени (14) щеше при трептенето да се премества центъра на тежестта, т.е. да има трансляция.

Нека сега си представим, че едната маса е много по-голяма от другата, например $m_1 \gg m_2$. В израза (13a) отношението в първите квадратни скоби става единица (просто се пренебрегва m_2) и трептенето става

$$\Delta x_2 = [(x_2 - x_c) - r_2] = A \cos(2\pi\omega t + \varphi_0) \quad (15a)$$

докато в израза (13b) отношението в първите средните става близко до нула и целия израз става

$$\Delta x_1 = [(x_c - x_1) - r_1] = 0[A \cos(2\pi\omega t + \varphi_0)] = 0 \quad (15b)$$

т.е. атом 1 (който е по-тежък) не се движи, а само атом 2 (който е по-лек) трепти. Разбира се трептенето на втория атом е с различна амплитуда и различна честота (която зависи от приведената маса, като последната сега е равна на масата на втория атом). Единствено фазата не се променя.

([съдържание на поредицата "Молекулна спектроскопия"](#))

Литература

1. Г. Андреев. *Молекулна спектроскопия*, Изд. ПУ "П. Хилендарски", Пловдив, 1999.
2. Bernhard Schrader (Ed.); *Infrared and Raman Spectroscopy (Materials and Methods)*. VCH, Weinheim 1995.

Автор: [д-р Пламен Пенчев](#)

[това е статия от [брой 35](#) от ноември - декември 2009 г. на списание "Коснос" www.kosnos.com]