Лекция 2. Свободные колебания в системе связанных осцилляторов

Дополнение к § 1

) 1.5. Особенности колебаний нелинейного осциллятора

1.5.1. Линейный осциллятор – гармонический осциллятор
(или откуда берутся гармонические колебания?)

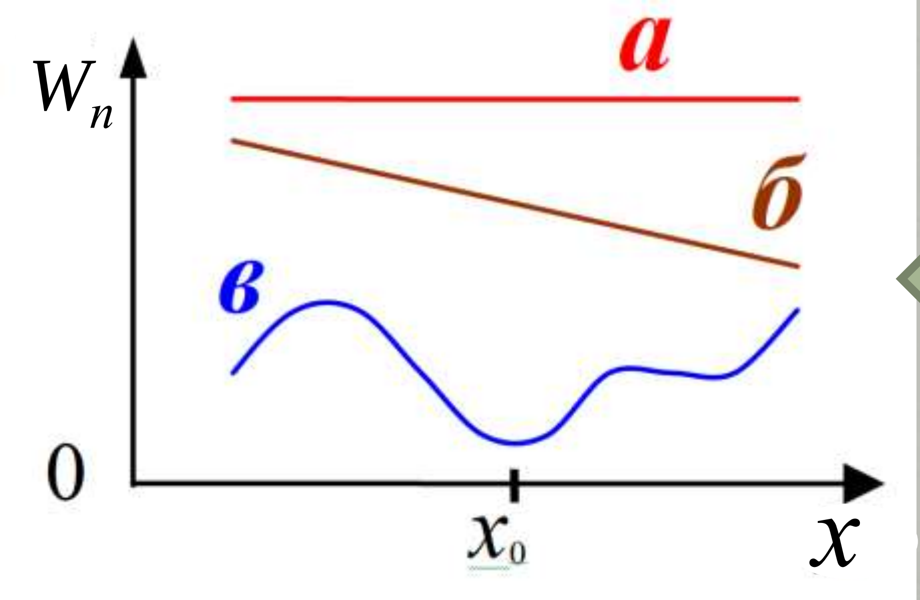
$$\ddot{\xi} + \omega_0^2 \cdot \xi = 0$$

А как это так получается?

$F \sim x$??

Система консервативна $\Rightarrow$

$$F_x = -\frac{dW_n}{dx}$$



$\Rightarrow W_n \sim x^2$, пружина $\qquad W_n(x) = \dfrac{kx^2}{2}$

А если $W_n(x)$ *– сложная функция ?*

$x - x_0 \equiv \xi$ – *«малый аргумент»*

Разложим в ряд

$$W_n(x) = W_n(x_0) + \left.\frac{dW_n}{dx}\right|_{x=x_0} \cdot (x - x_0) + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2W_n}{dx^2}\right|_{x=x_0} \cdot (x - x_0)^2 + \ldots$$

$$W_n(\xi) = U(0) + \left.\frac{dW_n}{dx}\right|_{\xi=0} \cdot \xi + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2W_n}{dx^2}\right|_{\xi=0} \cdot \xi^2 + \ldots$$

ξ мало ! Тогда:

$$W_n(\xi) \approx W_n(0) + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2W_n}{dx^2}\right|_{\xi=0} \cdot \xi^2 = W_n(0) + \frac{k\xi^2}{2}$$

Но: $F_x = -\dfrac{dW_n}{dx}$ ***и тогда*** $F_x = -k\xi$

$$k = \left.\frac{d^2W_n}{dx^2}\right|_{\xi=0}$$

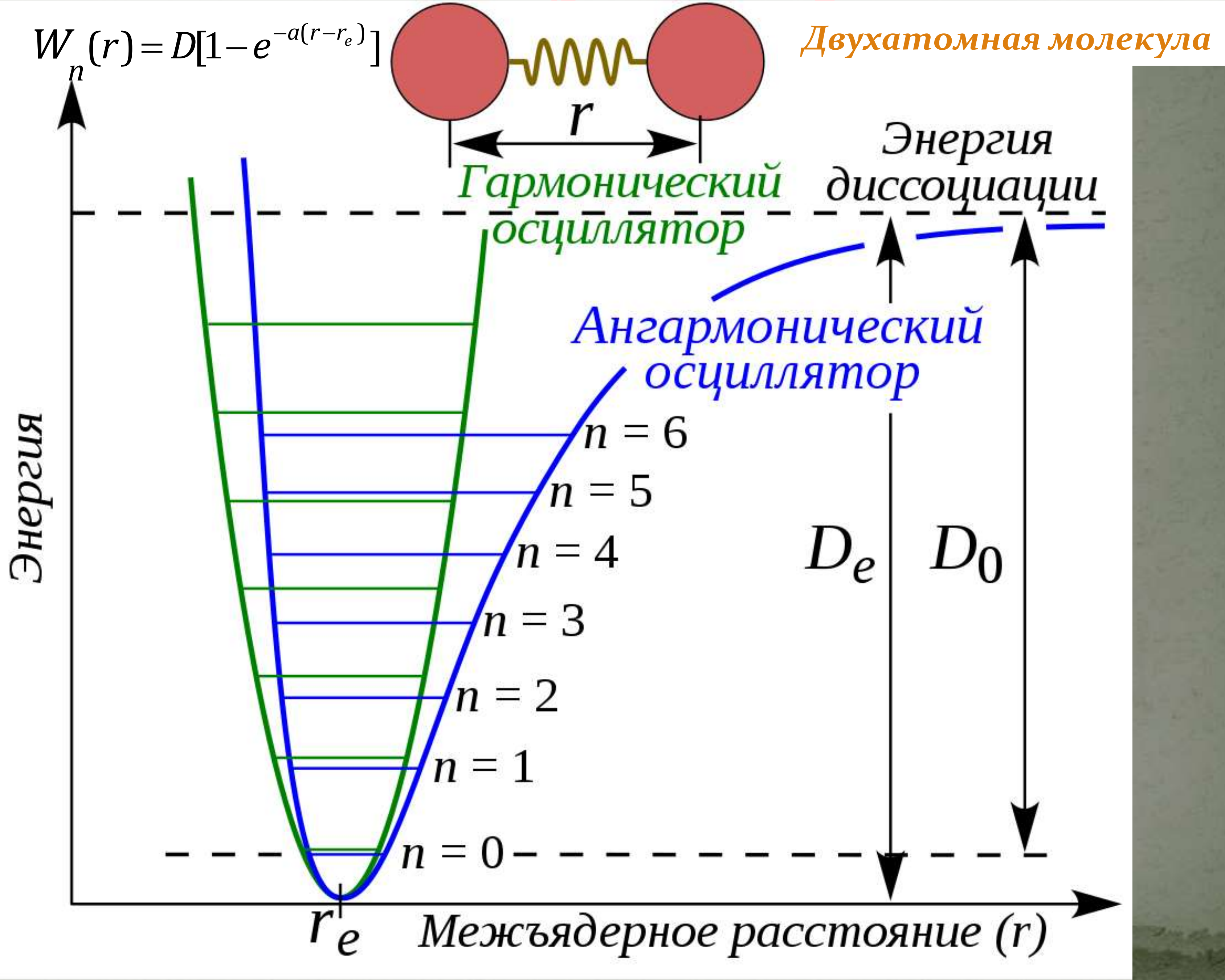
«Возвращающая сила», линейный, гармонический осциллятор !!!

А если $W_n(\xi)$ не пропорциональна ξ^2 ?

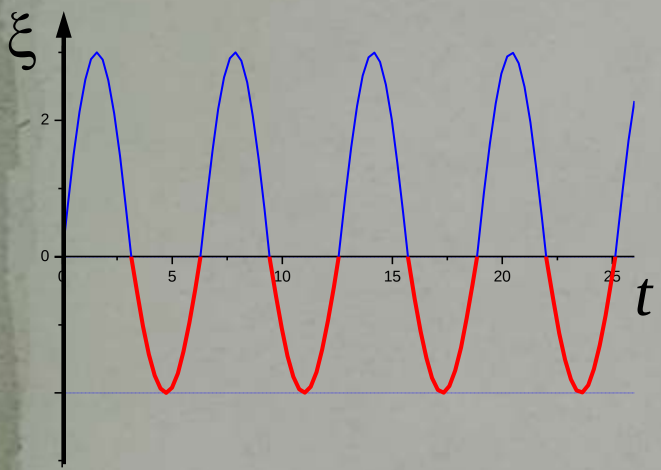
Примеры: "Потенциал Морзе", … ("Леннард-Джонса" (6/12), "Бакингема", …)

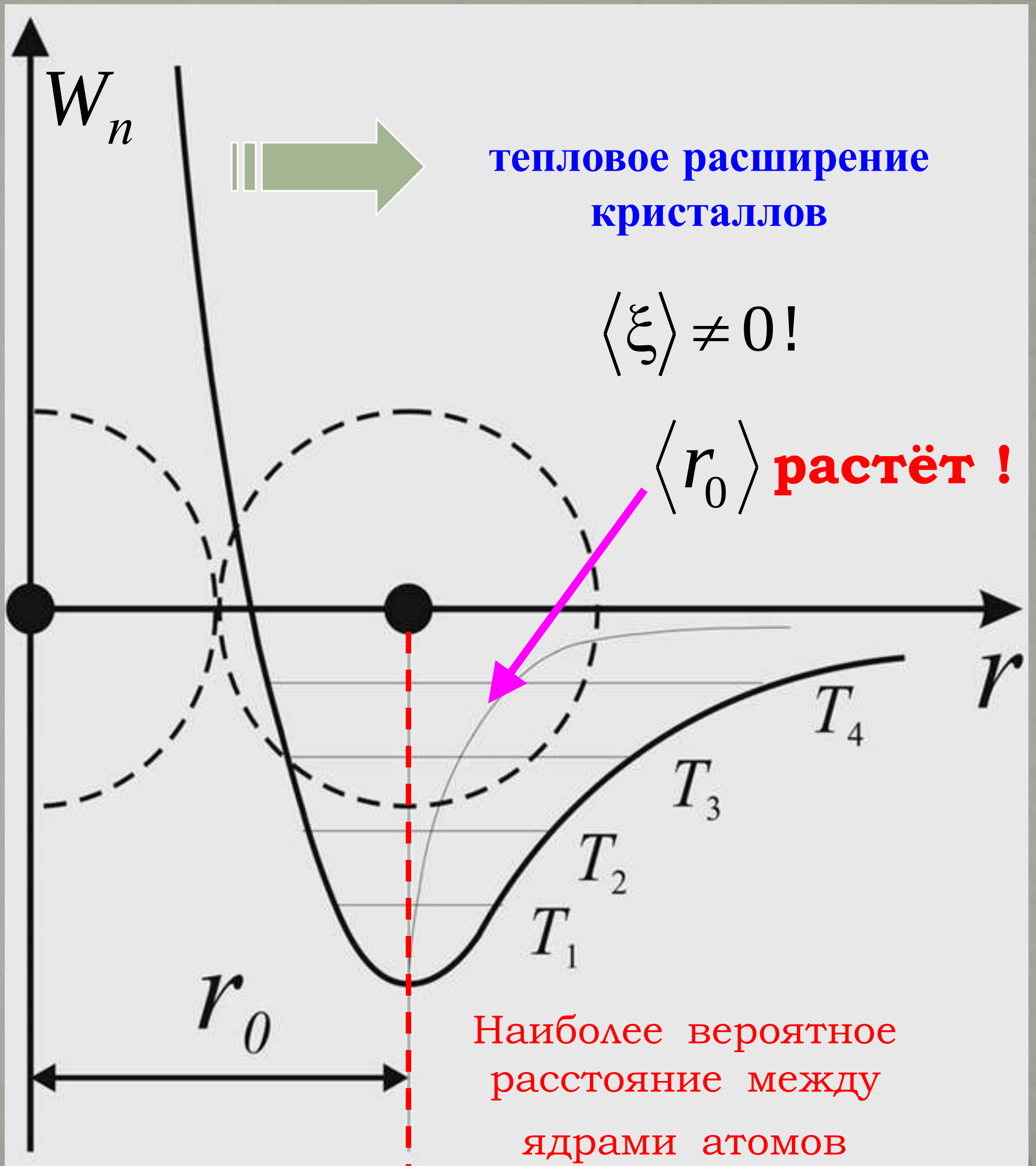
«Потенциал Морзе»

$$W_n(r) = D[1 - e^{-a(r-r_e)}]$$



- Ангармонизм колебаний нелинейного осциллятора





1.5.2. Нелинейный («ангармонический») осциллятор

ξ *растёт* $\Rightarrow$ **нельзя «аппроксимировать параболой»**

$$\ddot{\xi} + f(\xi) = 0 \qquad f(\xi) = k\cdot\xi + k_2\cdot\xi^2 + k_3\cdot\xi^3 + \ldots$$

$$\xi(t) = A_1\cdot\cos(\omega_0 t + \varphi_0) + A_2\cdot\cos(2\omega_0 t + \varphi_{02}) + A_3\cdot\cos(3\omega_0 t + \varphi_{03}) + \ldots$$

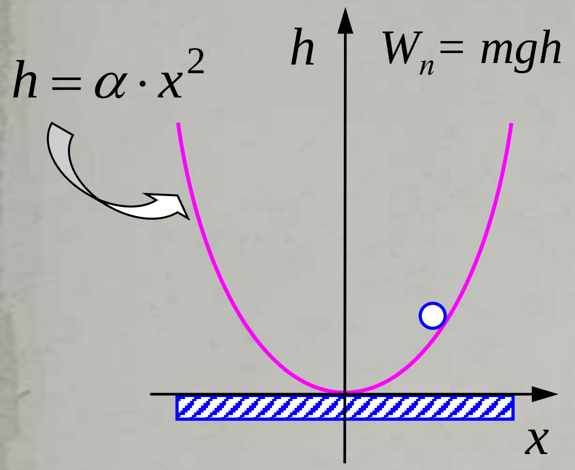
Ангармонизм

Неизохронность

! ??

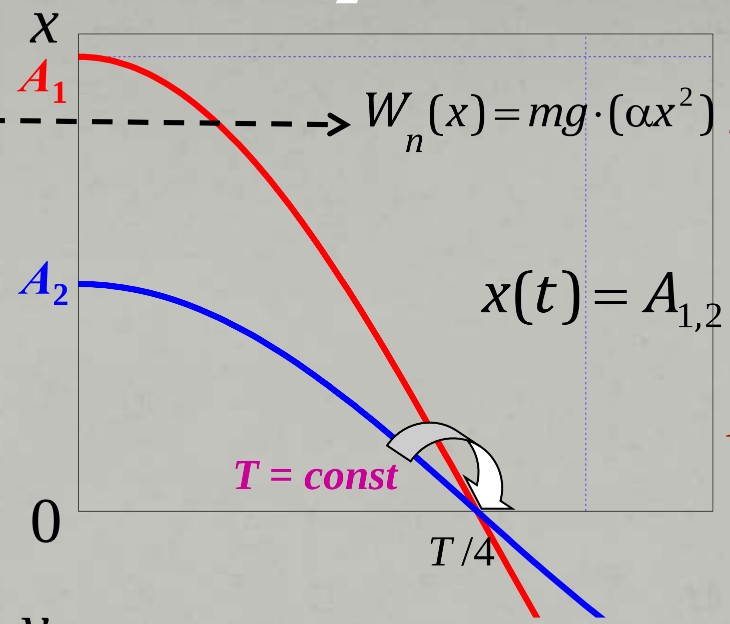
Изохронность / Неизохронность

Пример 1: "Чаша", ...



$W_n(x) = mg \cdot (\alpha x^2)$ т.е. $W_n(x) \sim x^2$

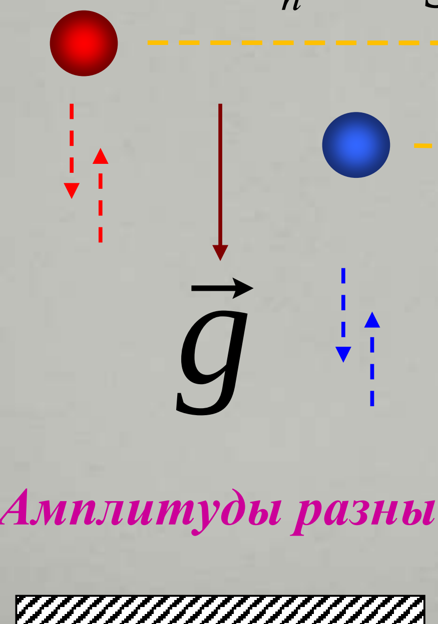
$F_x = -kx$



$x(t) = A_{1,2} \cdot \cos\omega_0 t$

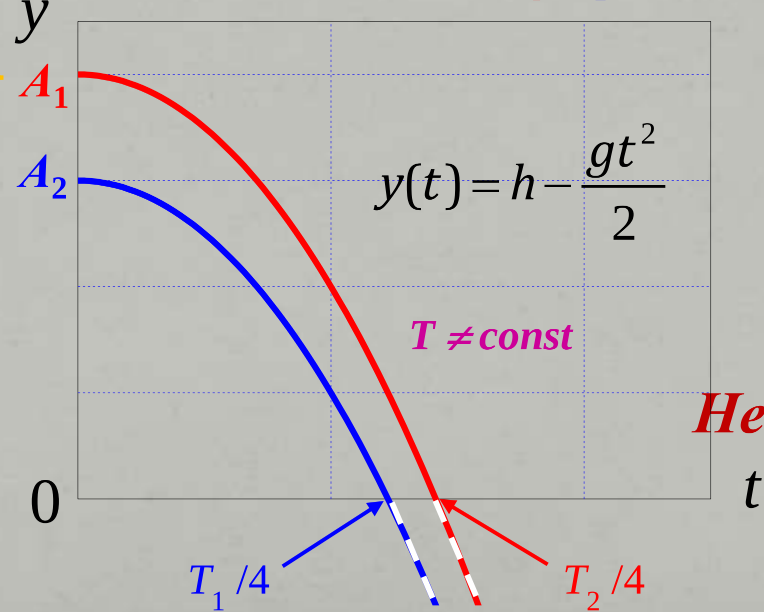
Изохронность

Пример 2: $W_n = mg \cdot y$



$F = const$

$a_y = const = g$



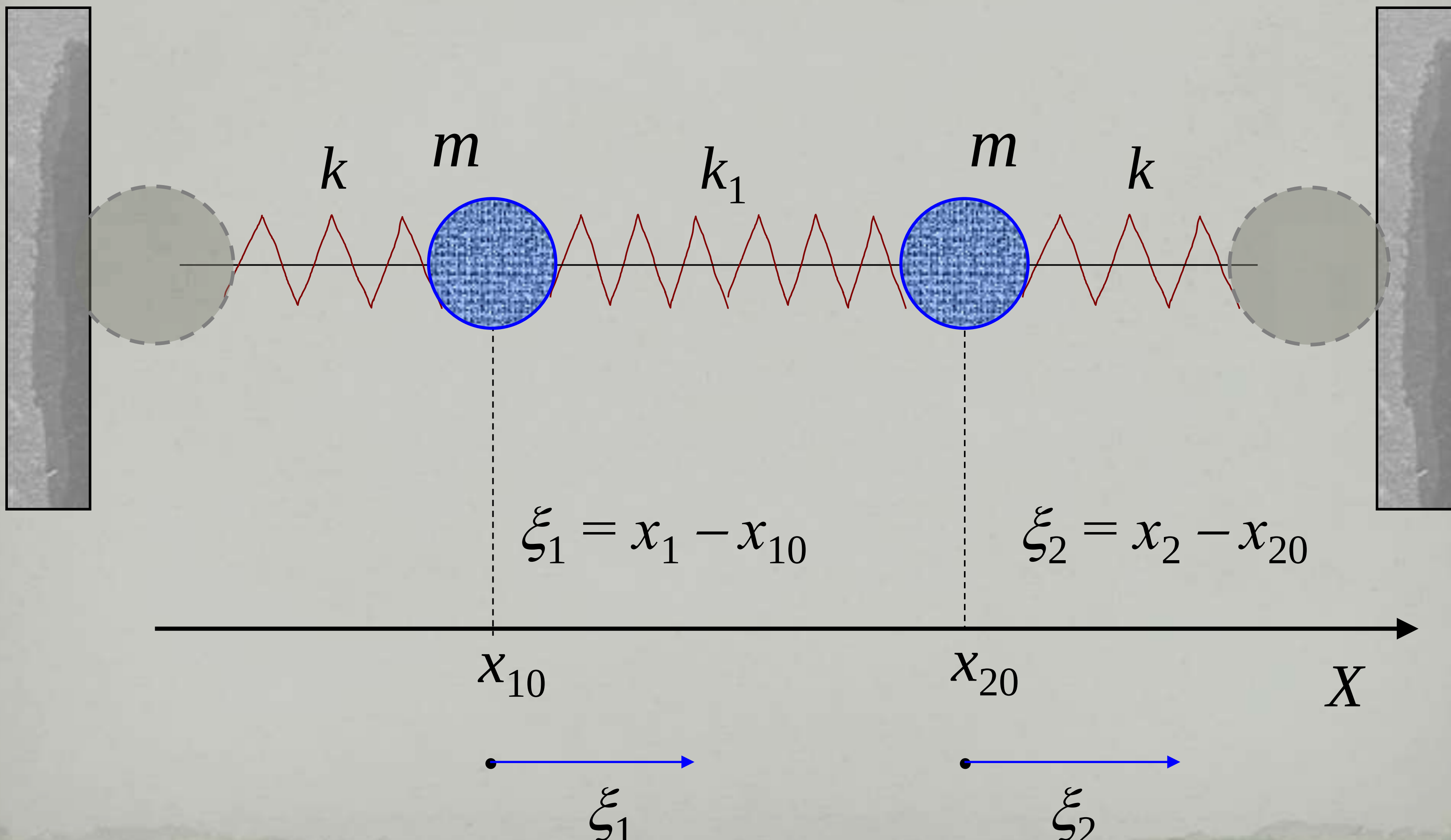
$y(t) = h - \frac{gt^2}{2}$

Неизохронность !

Амплитуды разные

§ 2. Свободные колебания в системе связанных осцилляторов. (о “модах” …) Колебания молекул

- 2.1. Симметричная система двух связанных осцилляторов.
- Нормальные колебания



Модель:

- Крайние атомы неподвижны, а «средние» одинаковы ;
- Одномерный случай;
- Система консервативна – трения нет;
- Все связи – квазиупругие – взаимодействуют линейные осцилляторы. Средняя пружинка моделирует связь осцилляторов:

$$k_1 = \left.\frac{d^2 W_n}{dx^2}\right|_{\substack{x_1 = x_{10} \\ x_2 = x_{20}}}$$

Система уравнений и её решение: …

(*Опр.*) ***Нормальными координатами называются линейные комбинации исходных координат, которые позволяют свести систему уравнений к системе уравнений гармонических осцилляторов***

Частоты нормальных колебаний (мод)

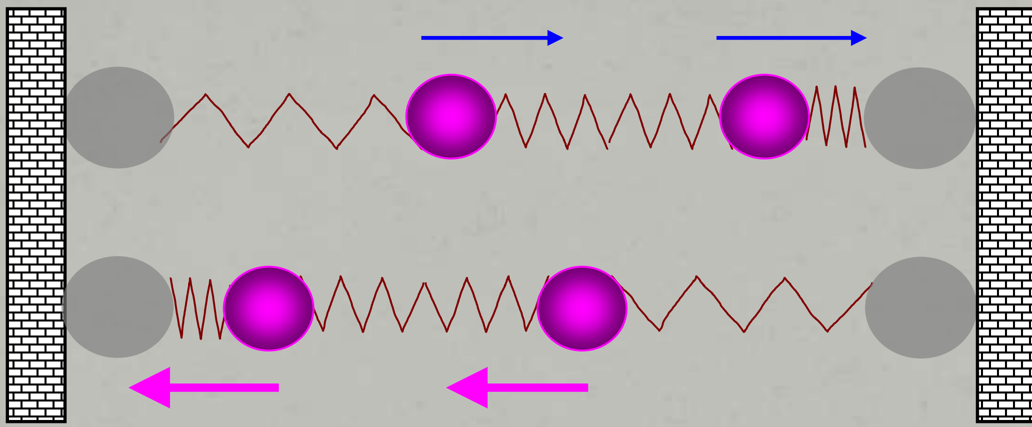
$$\omega_{\mathrm{I}} = \sqrt{\frac{k}{m}}; \qquad \omega_{\mathrm{II}} = \sqrt{\frac{k + 2k_1}{m}}$$

??

А что же это за «моды» такие, и как движутся сами атомы

Симметричная система связанных осцилляторов

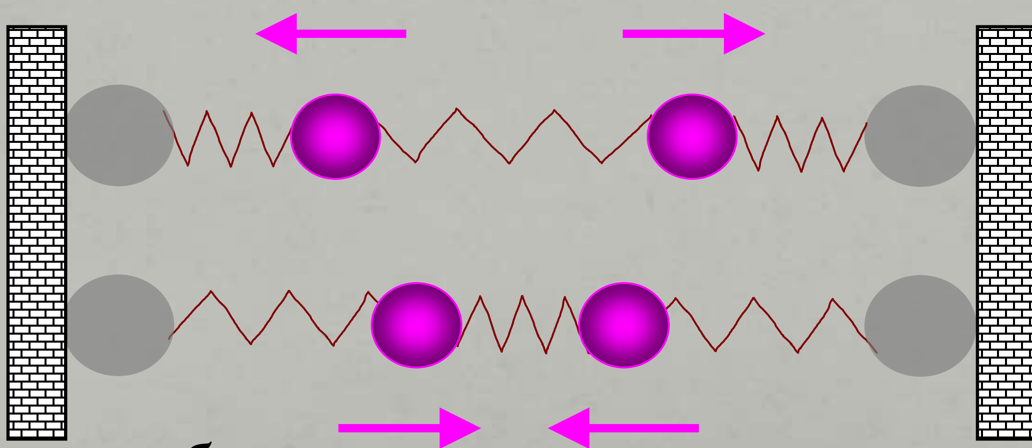
- "Нормальные колебания" ≡ "Моды"



$$\omega_{\mathrm{I}} = \sqrt{\frac{k}{m}};$$

а

Синфазно



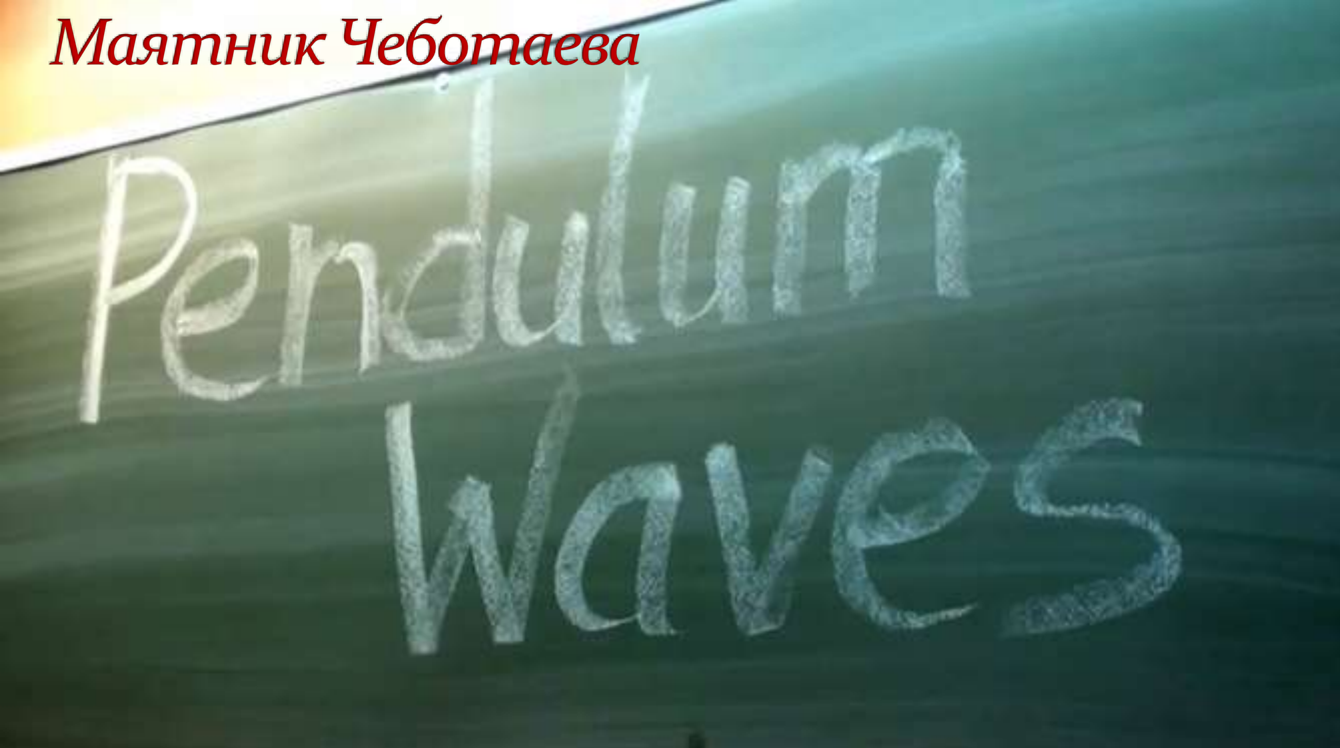
$$\omega_{\mathrm{II}} = \sqrt{\frac{k+2k_1}{m}}$$

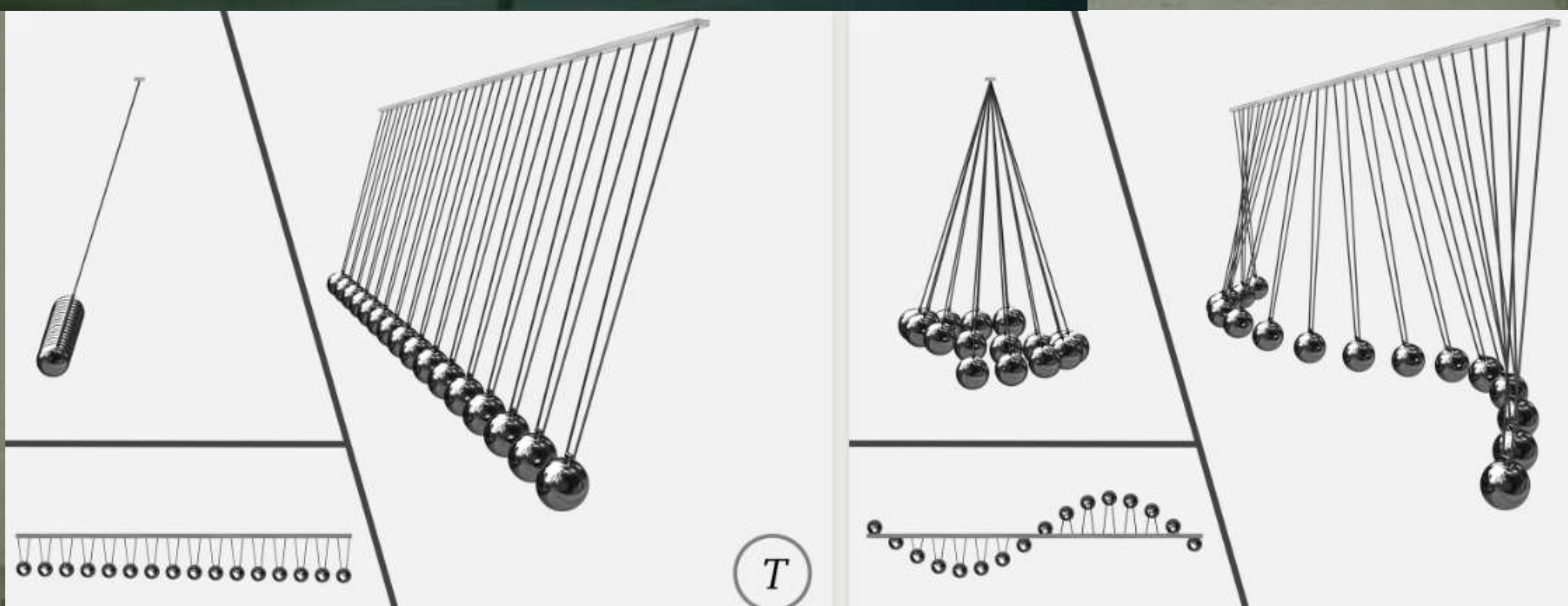
б

Противофазно

Маятник Чеботаева

Антракт





Антракт

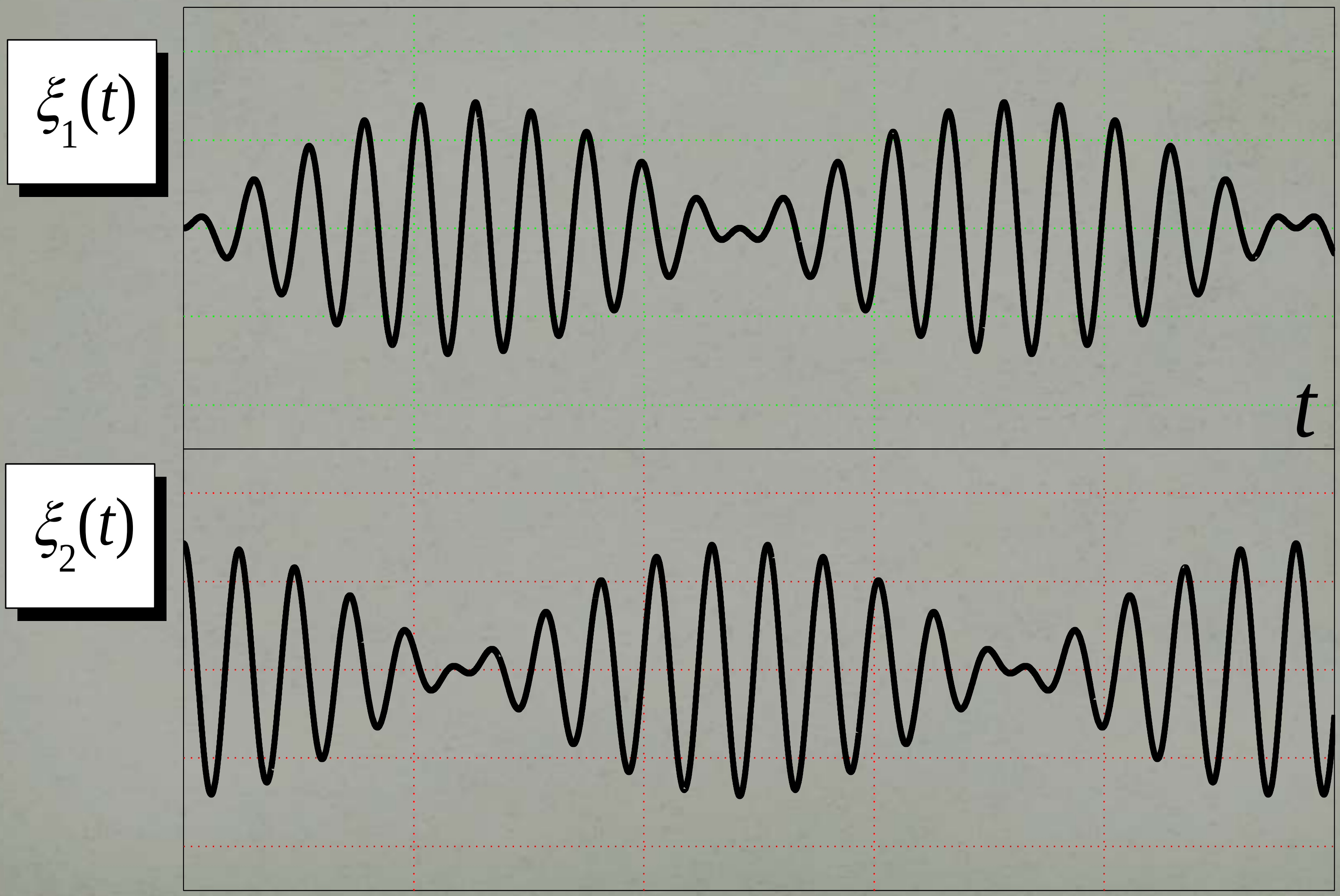
- **Замечания:** 1) Симметричная система со слабой связью $k_1 << k$

2) Моды энергетически независимы !!

3) Несимметричные системы ??

Замечания: 1) Симметричная система со слабой связью $k_1 << k$

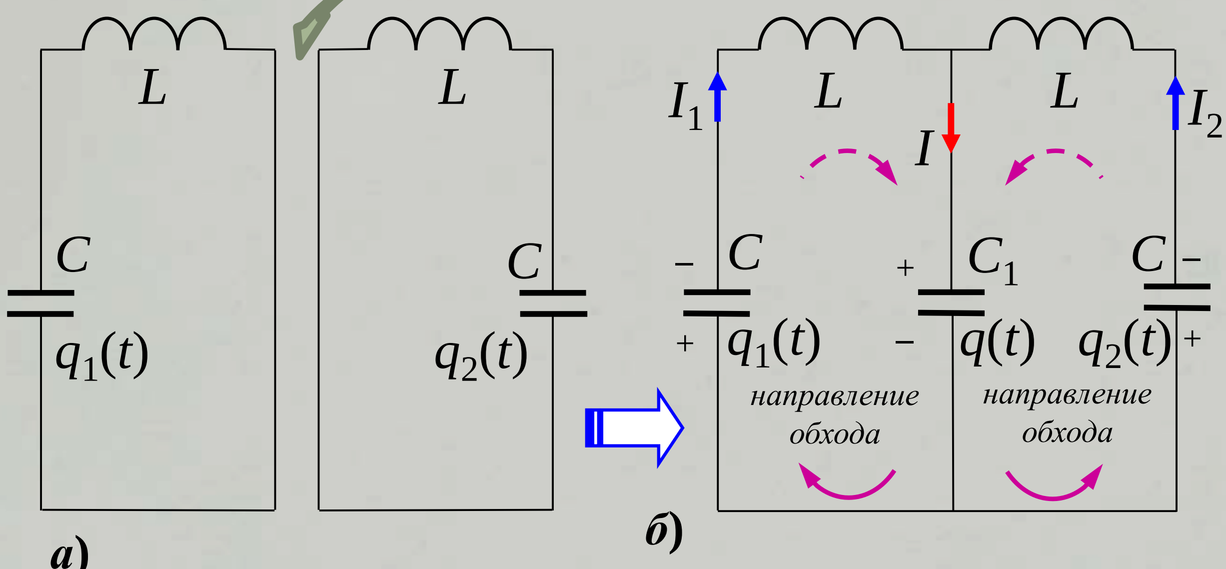
Биения



2.2. Связанные колебательные контуры

- «Ёмкостная связь» контуров

"Вместо" $k_1 \to 1/C_1$



а) Два одинаковых контура и *б)* Контуры с ёмкостной связью.

2.2. Связанные колебательные контуры

- Ёмкостная связь контуров

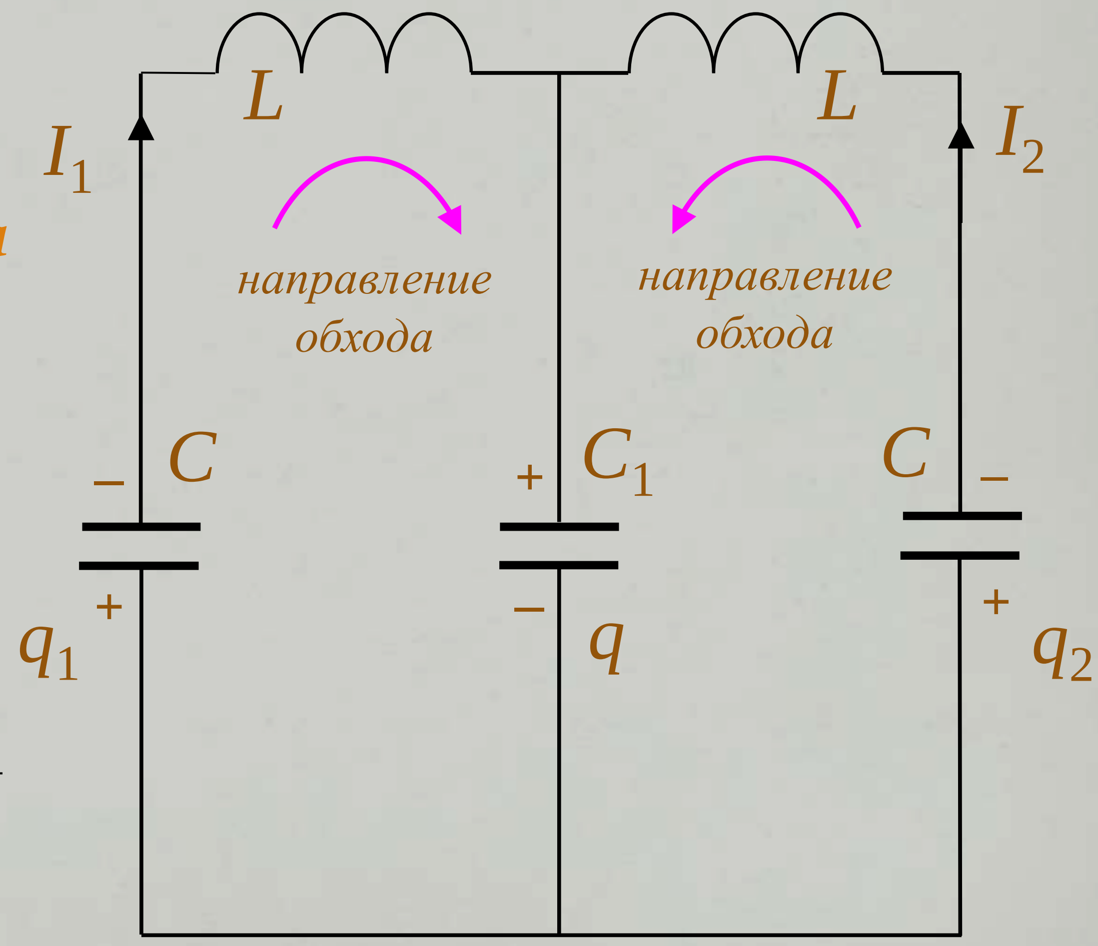
2-е правило Кирхгофа и "-/+":

$$q_{\mathrm{I}}: \quad \omega_{\mathrm{I}} = \frac{1}{\sqrt{LC}}$$

Синфазно

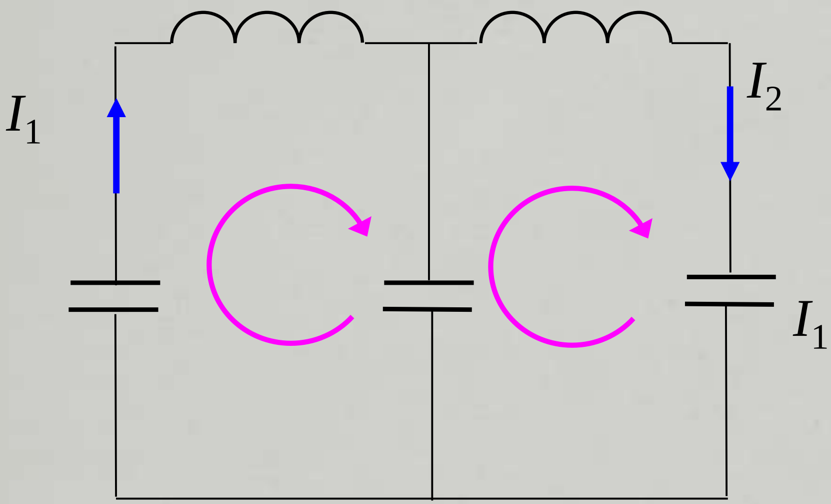
$$q_{\mathrm{II}}: \quad \omega_{\mathrm{II}} = \sqrt{\frac{1}{L}\left(\frac{1}{C} + \frac{2}{C_1}\right)}$$

Противофазно



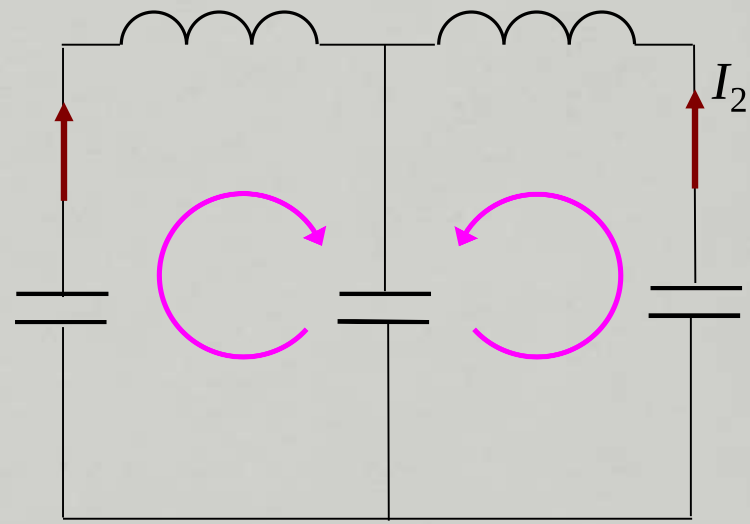
Связанные электрические контуры

- Ёмкостная связь контуров



а) **Синфазно**

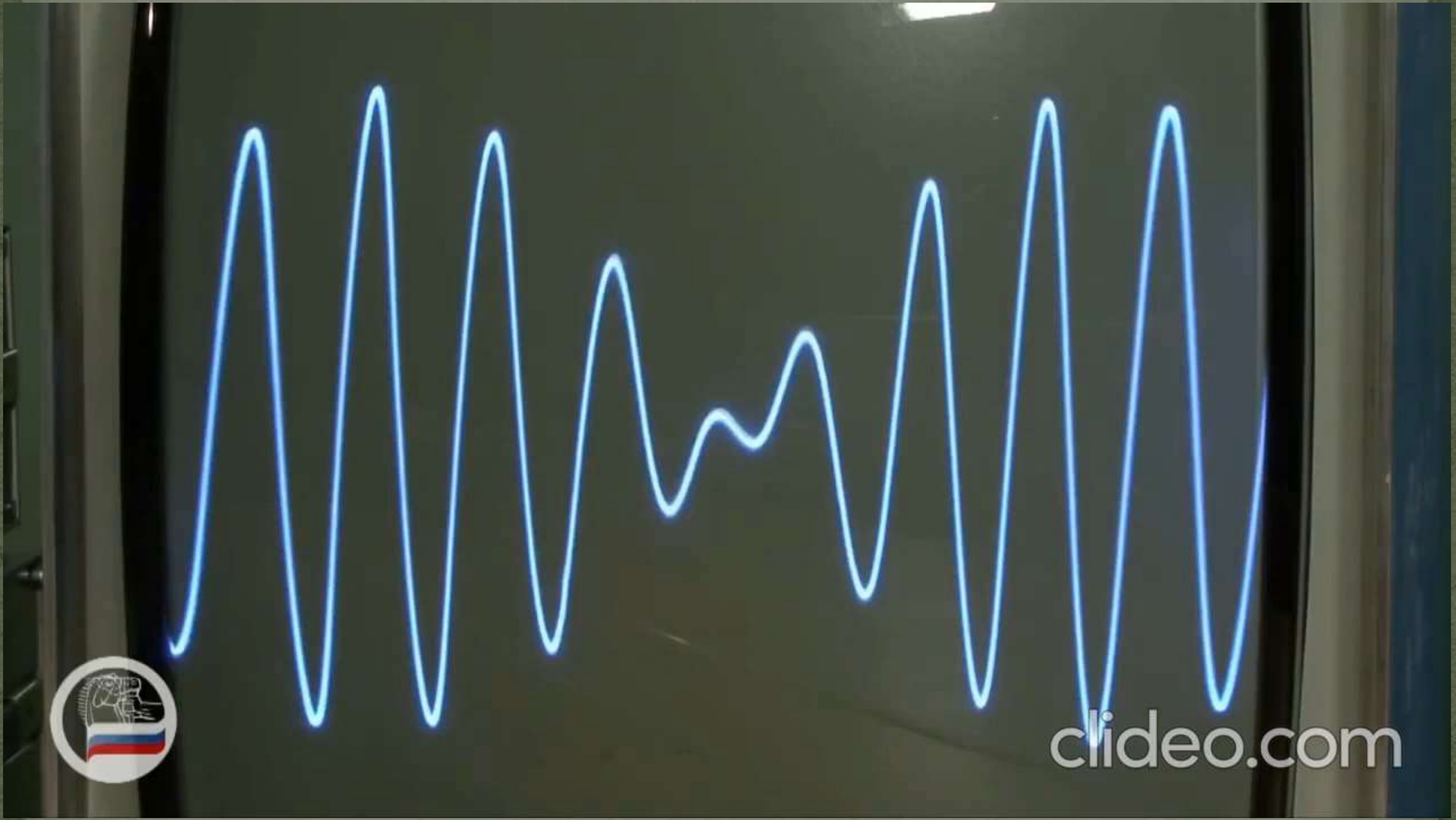
$$\omega_{\mathrm{I}} = \frac{1}{\sqrt{LC}}$$



б) **Противофазно**

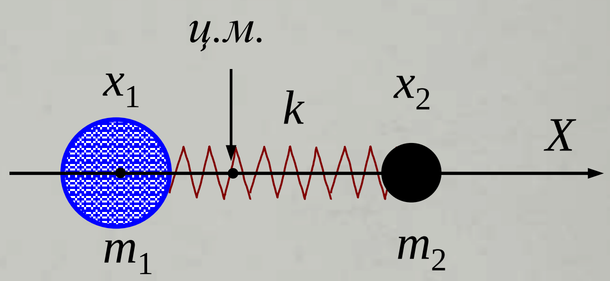
$$\omega_{\mathrm{II}} = \sqrt{\frac{1}{L}\left(\frac{1}{C} + \frac{2}{C_1}\right)}$$

Биения для связанных электрических контуров



2.3. Колебания молекул
(колебательная/молекулярная спектроскопия)

2.3.1. Двухатомная молекула



Внутримолекулярные колебания свободной двухатомной молекулы (Модель «гармонический осциллятор» в химии)

Задачи 2.3 – 2.5 :

$$\xi = x_2 - x_1 - l_0$$

Одна “колебательная степень свободы”

??

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

«Приведённая масса молекулы»

А где её можно “увидеть”??

Пример 1. Изотопные сдвиги в колебательных спектрах

$$\frac{\omega_0^{OH}}{\omega_0^{OD}} = \sqrt{\frac{\mu_{OD}}{\mu_{OH}}} = \sqrt{\frac{m_D(m_O + m_H)}{m_H(m_O + m_D)}} \approx 1{,}37$$

Пример 2. Свободные и связанные гидроксилы

$$\frac{\omega_0^{своб}}{\omega_0^{связ}} = \sqrt{\frac{(m_O + m_H)}{m_O}} \approx 1{,}031$$

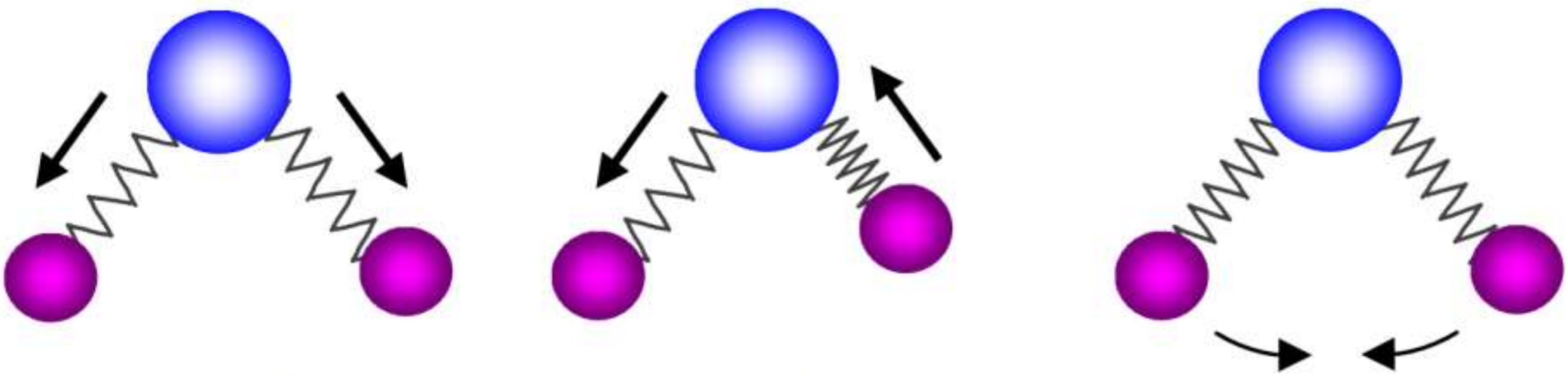
2.3.2. Многоатомные молекулы. Колебательные степени свободы молекул:

$3N - 6$ / $3N - 5$

?? *проверим*

Колебания молекул H_2O

$\bar{\nu}_1 = 3660\ см^{-1}$ *) $\bar{\nu}_3 = 3760\ см^{-1}$ $\bar{\nu}_2 = 1650\ см^{-1}$



а) **б)** **в)**

Рис. 2.7. Валентные (а и б) и деформационные (в) моды молекул H_2O

*) *«волновое число» в спектроскопии*: $1/\lambda$

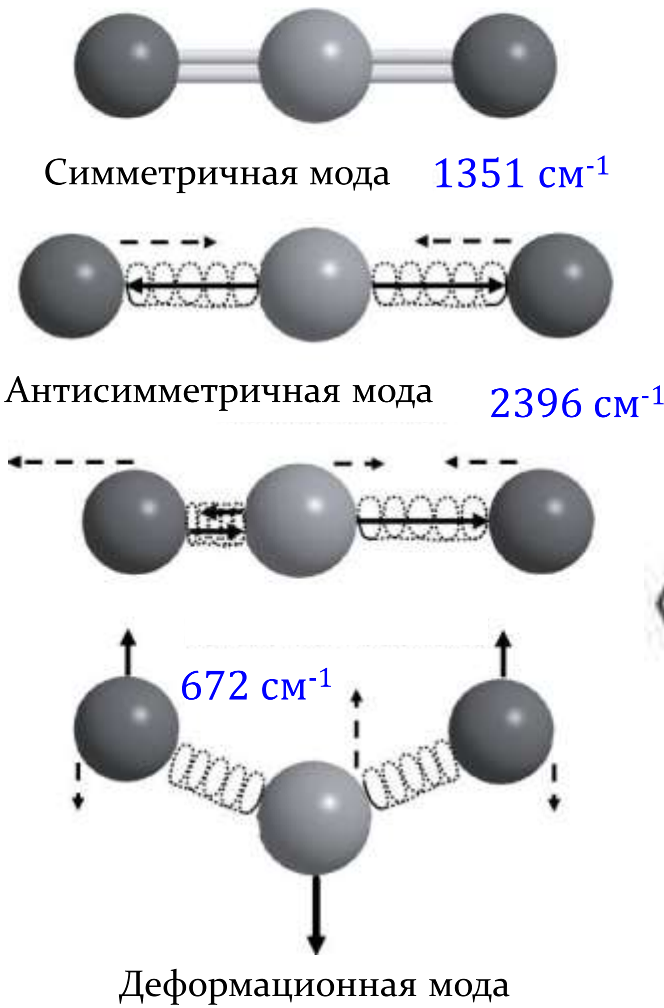
Молекулярная / Колебательная спектроскопия :

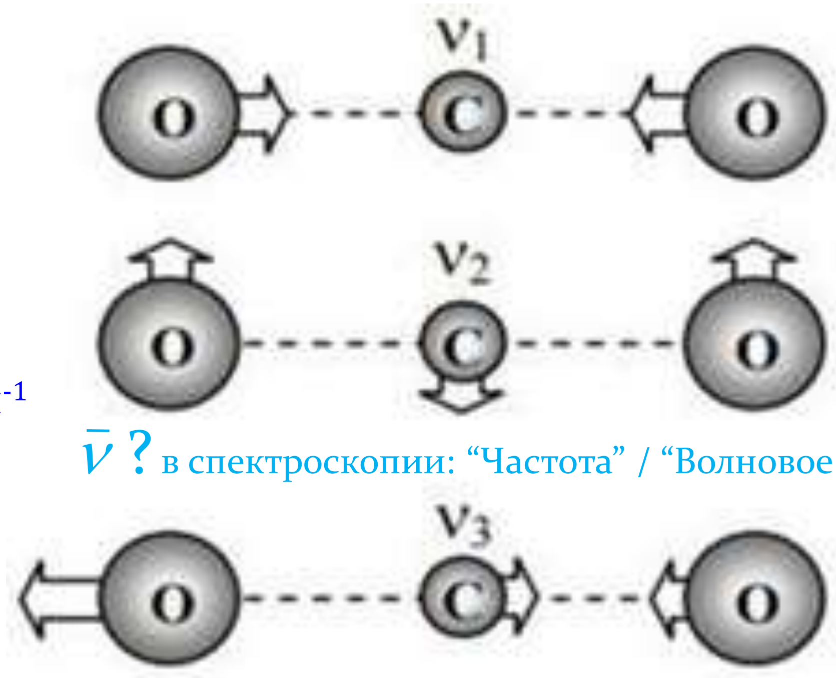
1) *Инфаракрасного* ***поглощения*** *света* ***(ИК-спектроскопия)*** *IR-Spetroscopy*

2) *Комбинационного* ***рассеяния*** *света (КР-спектроскопия ≡ "Рамановская") Raman Spetroscopy*

2.3.2. Многоатомные молекулы. Колебательные степени свободы молекул: $3N-6$ / $3N-5$

- Линейные молекулы (CO_2)





$\bar{\nu}_1 = 1351\ см^{-1}$

$\bar{\nu}_2 = 672\ см^{-1}$

$\bar{\nu}$? в спектроскопии: “Частота” / “Волновое число”. $\bar{\nu} = 1/\lambda$

$\bar{\nu}_3 = 2396\ см^{-1}$

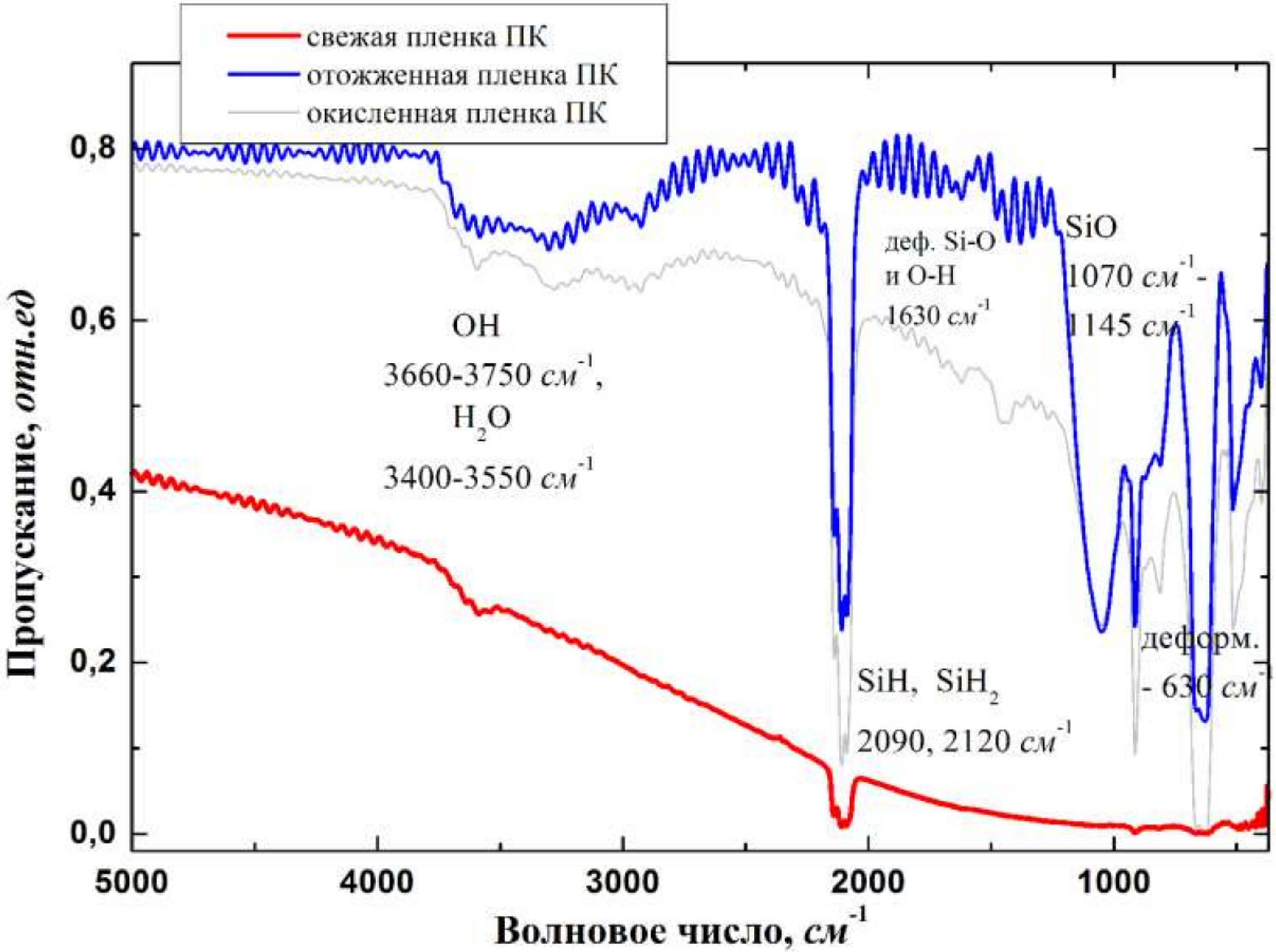
Три фундаментальные моды молекулы CO_2:

ν_1 - Симметричная валентная мода;

ν_2 - деформационная мода

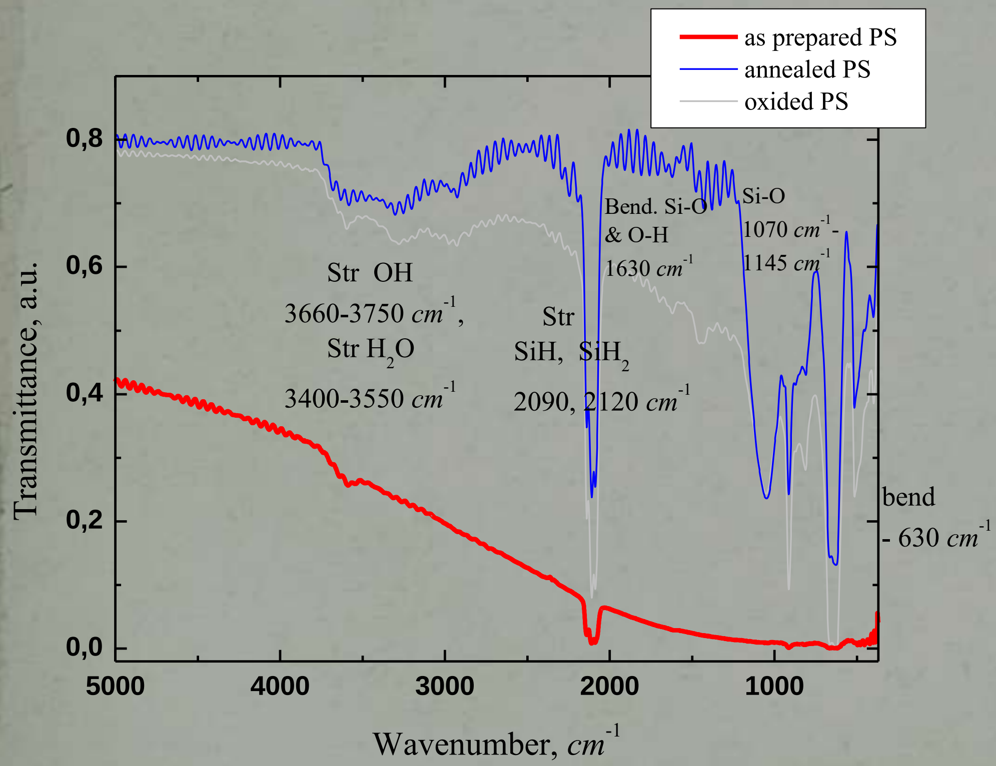
ν_3 - антисимметричная валентная мода;

Молекулярная колебательная спектроскопия



ИК спектроскопия

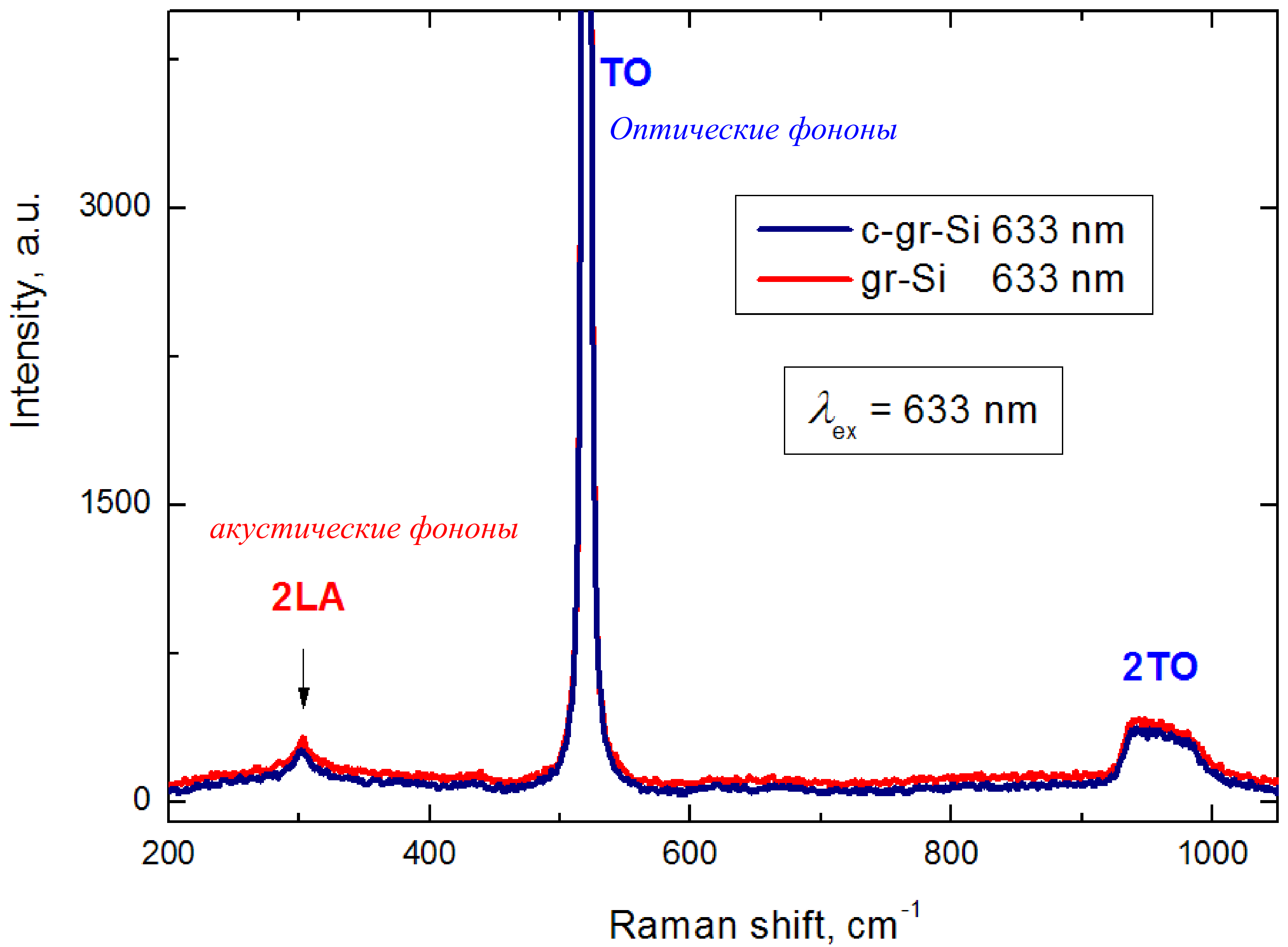
- **The infra-red (IR) spectroscopy of porous silicon**



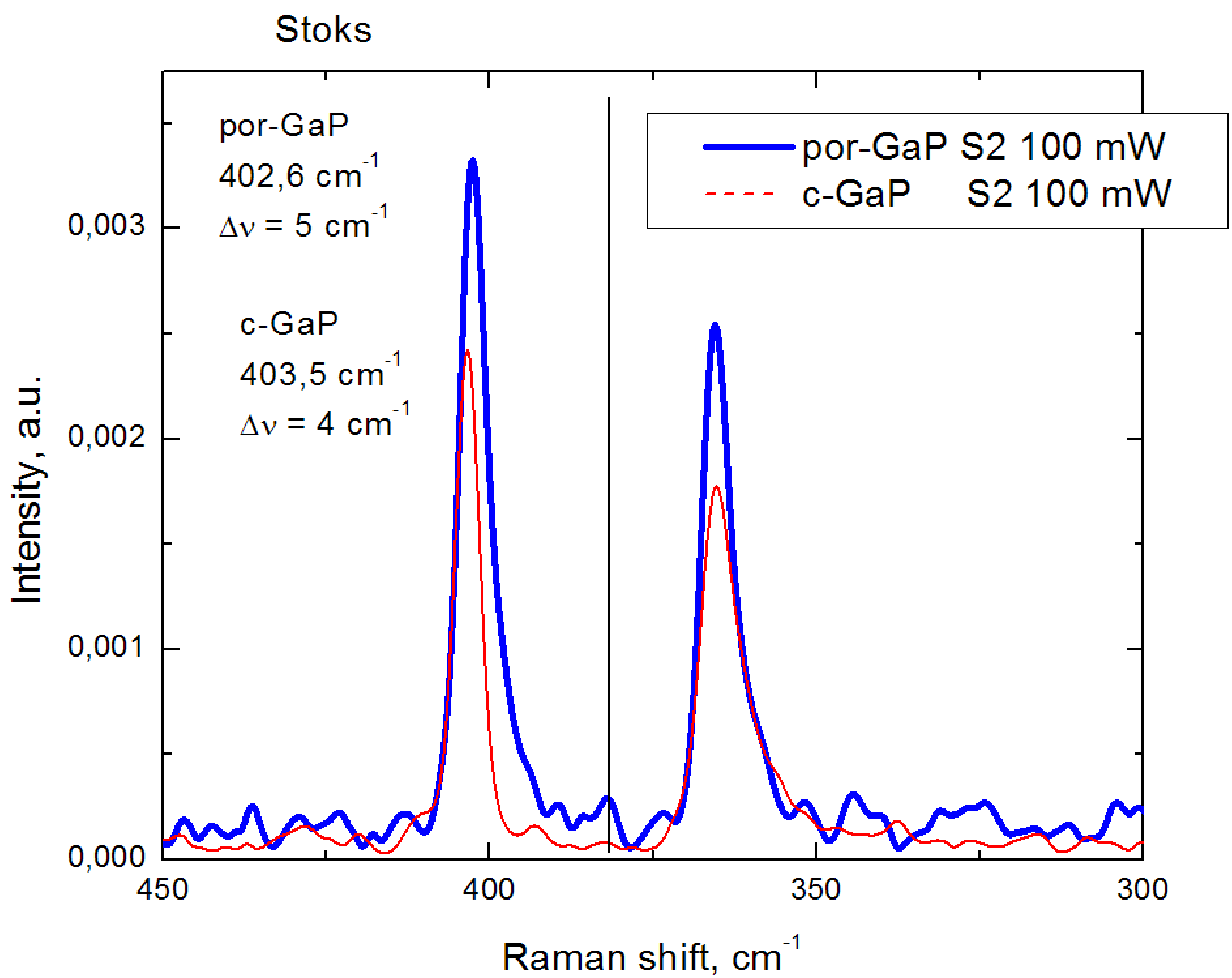
Absorption line, (cm^{-1})	**Types of vibration mode**
3745	Si–OH
3610	O–H stretching vibrations (in SiOH)
3452	O–H stretching vibrations (in H_2O)
2958	C–H stretching vibrations (in CH_3)
2927	C–H stretching vibrations (in CH_2)
2856	C–H stretching vibrations (in CH)
2197	Si–H stretching vibrations (in SiO_2–SiH)
2140	Si-H_3 stretching vibrations (in SiH_2–SiH)
2116	Si–H_2 stretching vibrations (in Si_2H–SiH)
1720	C=O
1056-1160	Si–O stretching vibrations (in Si–O–Si и C–Si–O)
980	Si–F stretching vibrations
979	Si–H bending vibrations (in Si_2H–SiH)
950	Si–F stretching vibrations
948	Si–H bending vibrations (in Si_2H–SiH)
827	Si–O bending vibrations (in Si–O–Si)
800	Si–CH_3
624	Si–H bending vibrations (Si_3–SiH)
617	Si–Si

Спектры комбинационного рассеяния света c-Si

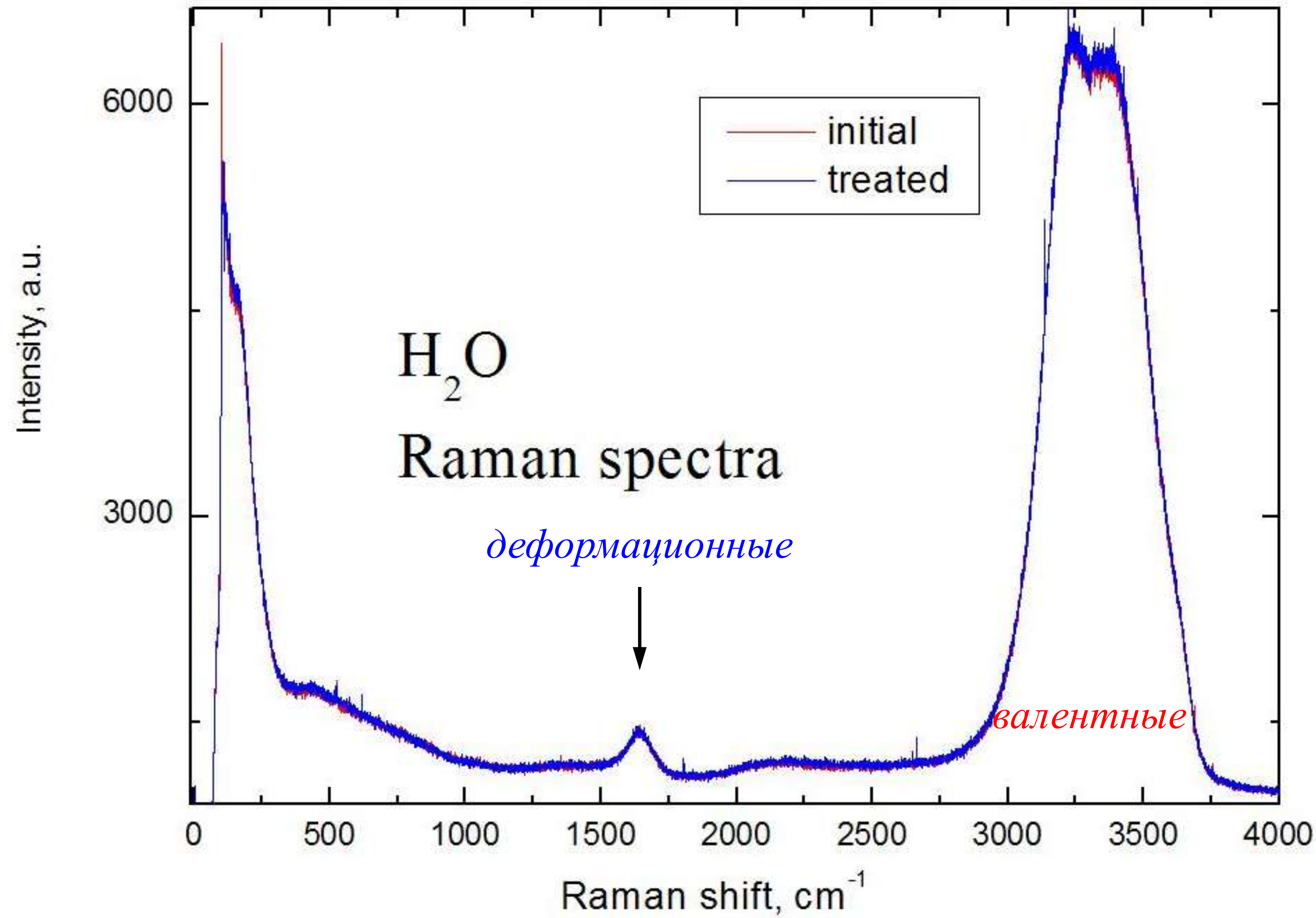
-



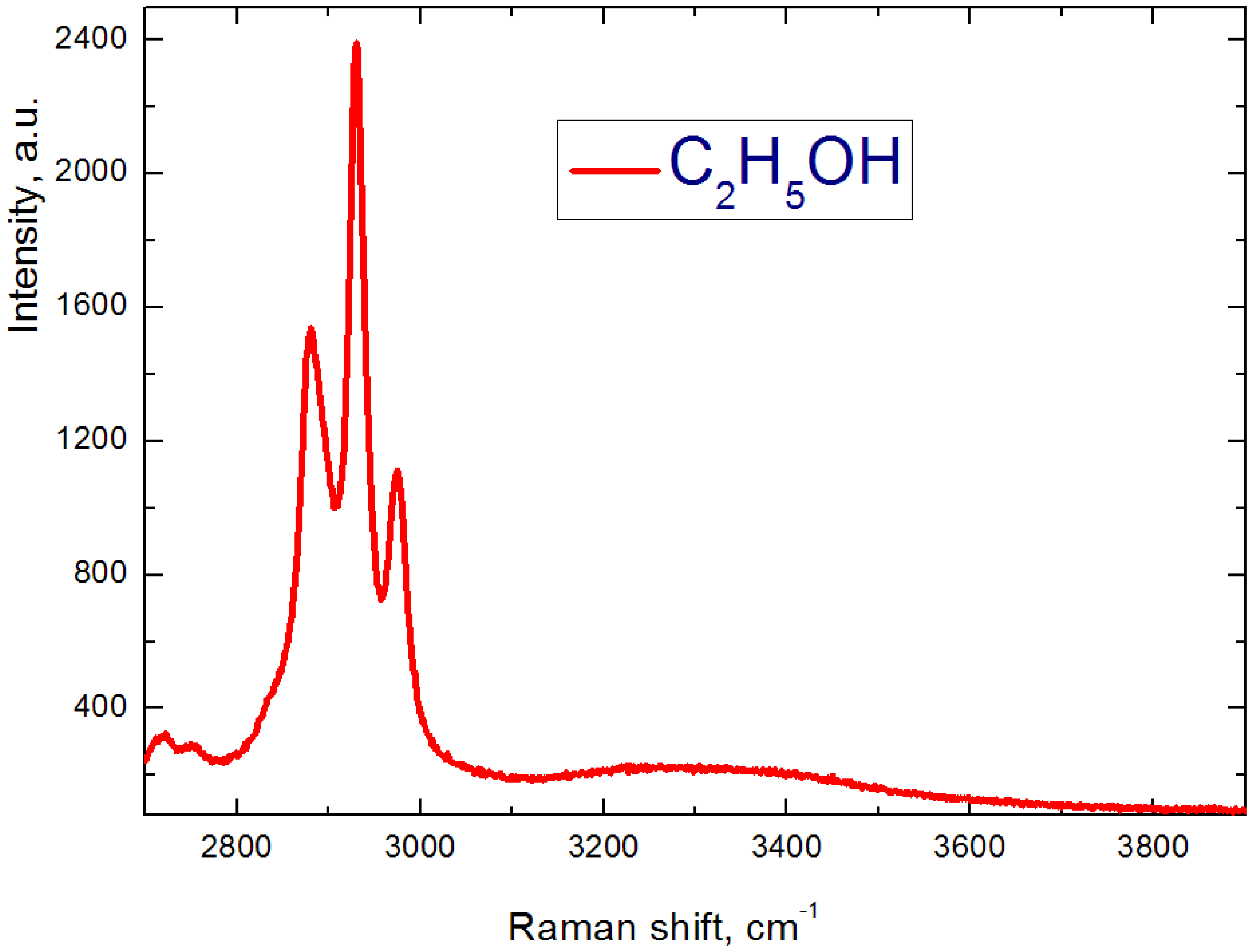
Спектры КРС арсенида галлия (GaP)



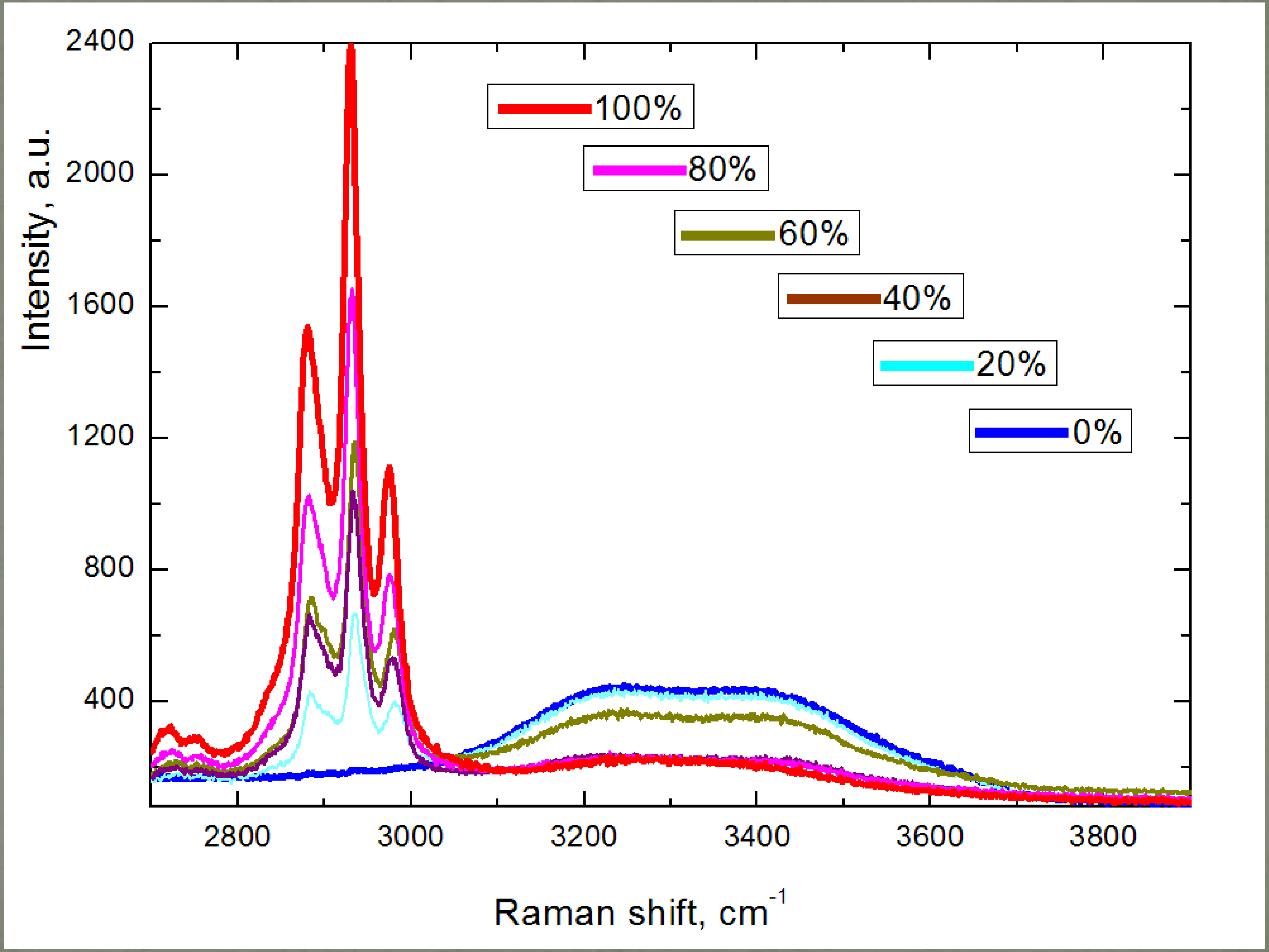
Спектр комбинационного рассеяния света воды



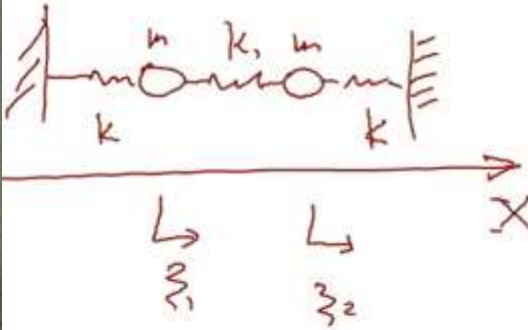
Спектр комбинационного рассеяния света



Спектры комбинационного рассеяния света



Доска 1



$$\begin{cases} m\ddot{\xi}_1 = -k\xi_1 \overset{?}{+} k_1(\xi_2-\xi_1); & :m \\ m\ddot{\xi}_2 = -k\xi_2 - k_1(\xi_2-\xi_1). & :m \end{cases}$$

„+" / „−"

„+": $\ddot{\xi}_1+\ddot{\xi}_2 = -\frac{k}{m}(\xi_1+\xi_2) \longrightarrow \xi_I = \xi_1+\xi_2$

$$\boxed{\ddot{\xi}_I + \frac{k}{m}\xi_I = 0} \rightarrow \xi_I(t) = A_I\cdot\cos(\omega_{0I}t+\varphi_{0I})$$

„−": $\ddot{\xi}_2-\ddot{\xi}_1 = -\frac{k}{m}(\xi_2-\xi_1) - \frac{2k_1}{m}(\xi_2-\xi_1) \longrightarrow \xi_{II} = \xi_2-\xi_1$

$$\ddot{\xi}_{II} + \frac{k+2k_1}{m}\xi_{II} = 0 \rightarrow \xi_{II}(t) = A_{II}\cdot\cos(\omega_{0II}t+\varphi_{0II})$$

Доска 2

$$\xi_I = \xi_1 + \xi_2 ; \qquad \xi_1 = \frac{\xi_I - \xi_{II}}{2} ; \qquad \omega_{0_I} = \sqrt{\frac{k}{m}} ;$$

$$\xi_{II} = \xi_2 - \xi_1 . \qquad \xi_2 = \frac{\xi_I + \xi_{II}}{2} \qquad \omega_{0_{II}} = \sqrt{\frac{k+2k_1}{m}}$$

$$\xi_1(t) = \frac{1}{2}\left[A_I \cdot \cos(\omega_{0_I} t + \varphi_{0_I}) - A_{II} \cdot \cos(\omega_{0_{II}} t + \varphi_{0_{II}})\right] ;$$

$$\xi_2(t) = \frac{1}{2}\left[\ \dots \quad + \quad \dots\ \right] .$$

Доска 3

$$\begin{cases} \underbrace{-L\dfrac{dI_1}{dt}}_{\mathcal{E}_{si}} = \dfrac{q_1}{C} + \dfrac{q}{C_1}; \\ -L\dfrac{dI_2}{dt} = \dfrac{q_2}{C} + \dfrac{q}{C_1}; \\ q = q_1 + q_2; \quad I_1 = \dfrac{dq_1}{dt} \equiv \dot{q}_1; \quad I_2 = \dfrac{dq_2}{dt} \equiv \dot{q}_2 \end{cases}$$

$$-\ddot{q}_1 = \frac{1}{LC}q_1 + \frac{1}{LC_1}(q$$

$$-\ddot{q}_2 = \frac{1}{LC}q_2 + \frac{1}{LC_1}(q$$

Доска 4

$$-(\ddot q_1-\ddot q_2)=\frac{1}{LC}(q_1-q_2)\quad ;\quad \begin{cases} -\ddot q_1=\frac{1}{LC}q_1+\frac{1}{LC_1}(q \\ -\ddot q_2=\frac{1}{LC}q_2+\frac{1}{LC_1}(q \end{cases}$$

$$q_{I}=q_1-q_2\,;\qquad \text{"} -/+ \text{"}$$

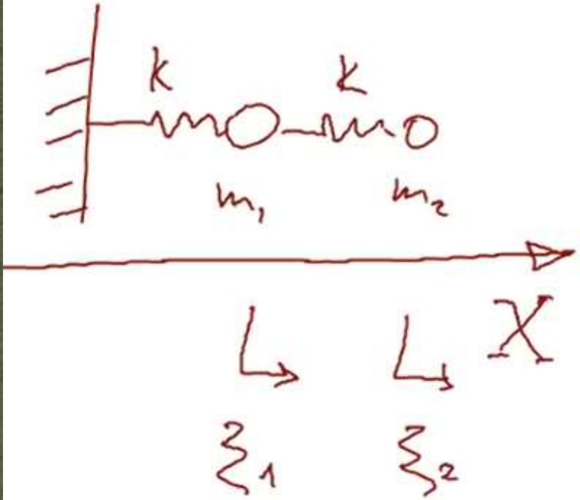
$$\ddot q_{I}+\frac{1}{LC}q_{I}=0\ \longrightarrow\ q_{I}(t)=Q_{I}\cdot\cos(\omega_{0I}t+\varphi_{0I}$$

$$\left(\omega_{0I}=\frac{1}{\sqrt{LC}}\right)\leftarrow \text{синфазно}$$

$$q_{II}=q_1+q_2$$

$$-(\ddot q_1+\ddot q_2)=\frac{1}{LC}(q_1+q_2)+\frac{2}{LC_1}(q_1+q_2)$$

Доска 5. Несимметричные системы



$$\xi_{I,II} = \xi_1 + n_{I,II}\cdot\xi_2 \quad ; \quad n_I, \; n_{II}$$

коэф.

$$\omega_{0I}, \; \omega_{0II}$$

$$\begin{cases} m_1\ddot{\xi}_1 = \dots & \Big| \; : m_1 \\ m_2\ddot{\xi}_2 = \dots & \Big| \; : m_2 \quad \times n \end{cases}$$

$$\ddot{\xi}_1 + n\ddot{\xi}_2 = \dots$$

$$n_{I,II}$$

$$\omega_{0I}, \; \omega_{0II}$$