

Die reduzierte Masse μ

Was hat es eigentlich mit der sogenannten reduzierten Masse μ auf sich?

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

Sie taucht immer wieder bei der Formelbeschreibungen von Bewegungsvorgängen mehratomiger Moleküle auf. Im einfachsten Fall, bei hantelförmigen Körpern (Abb. 1), die aus zwei Massenpunkten m_1 und m_2 mit einem Abstand r bestehen, ist sie wie oben angegeben definiert.

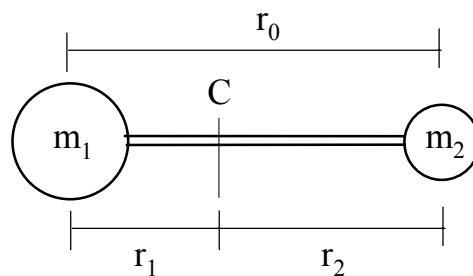
Bewegungsvorgänge eines solchen Körpers (Rotation, Schwingung) werden dann durch Formeln beschrieben, die aus der klassischen Mechanik für Massenpunkte m kommen, in denen diese aber durch μ ersetzt wird.

Woher kommt dieser umständlich erscheinende Ausdruck für μ ? Wir wollen ihn zunächst für den starren Rotator ableiten.

Rotation eines zweiatomigen Moleküls

Stellen wir uns ein zweiatomiges Molekül als Hantel mit zwei Massen m_1 und m_2 vor, die durch eine starre Verbindung der Länge r_0 (Atombindung) miteinander verbunden sind:

Abb. 1



Dieser Körper soll um eine Querachse rotieren, die die Atomverbindung (r_0) an derjenigen Stelle schneidet, die durch „C“ markiert ist.

$$r_0 = r_1 + r_2 \quad (1)$$

C ist der Schwerpunkt (vgl. Waage oder Hebelgesetz); er ist definiert durch:

$$m_1 r_1 = m_2 r_2 \quad (2)$$

Das Trägheitsmoment für diese Rotation ist:

$$\Theta = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 \quad (3)$$

oder mit Gleichung (2)

$$\begin{aligned} \Theta &= m_2 r_2 r_1 + m_1 r_1 r_2 \\ &= r_1 r_2 (m_1 + m_2) \end{aligned} \quad (4)$$

Aus der Kombination der Gleichungen (1) und (2) ergibt sich:

$$m_1 r_1 = m_2 r_2 = m_2 (r_0 - r_1) \quad (5)$$

und daraus

$$r_1 = \frac{m_2 r_0}{m_1 + m_2} \quad \text{und} \quad r_2 = \frac{m_1 r_0}{m_1 + m_2} \quad (6)$$

Einsetzen der Gleichungen (6) in Gleichung (4) ergibt:

$$\Theta = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r_0^2 = \mu r_0^2 \quad (7)$$

also: $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (1) \quad \text{und daraus} \quad 1/\mu = 1/m_1 + 1/m_2 \quad (8)$

Das Trägheitsmoment für die Rotation eines Massenpunktes m ist

$$\Theta = m r_0^2. \quad (9)$$

Wir haben für den Übergang von einem Massenpunkt m zu einer Hantel nichts weiter getan, als die Masse m in Gleichung (9) durch die reduzierte Masse μ zu ersetzen.

Gleichung (7) definiert das Trägheitsmoment eines hantelförmigen Körpers (zweiatomigen Moleküls) als Funktion der beiden Einzelmassen und ihrem Abstand.

Die reduzierte Masse repräsentiert dabei die Summe aller Einzelmassen in einer starren Hantel

und für sie gilt laut Gleichung (8):

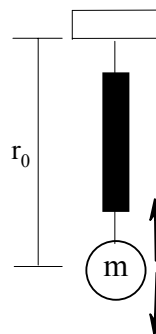
Die reziproke reduzierte Masse ist gleich den Summe der reziproken Einzelmassen.

Schwingung eines zweiatomigen Moleküls

Der Ersatz von m durch μ lässt sich analog auch für andere Bewegungsarten einer Hantel ableiten.

Betrachten wir zuerst die longitudinale Schwingung einer Masse, die mit einer Feder fest aufgehängt ist und um einen Ruheabstand r_0 herum schwingt (Abb. 2):

Abb. 2



Diese Bewegung wird durch das Hookesche Gesetz (10) beschrieben. Ihre Frequenz ν ist:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (10)$$

wobei k die Kraftkonstante der Feder ist.

Gehen wir nun zur Valenzschwingung über, bei der die beiden Massen m_1 und m_2 auf der Kernverbindungsline (kovalente Bindung; Abb. 1) gegeneinander schwingen (Oszillator), sich der Abstand r also fortlaufend ändert, d.h. um einen Optimalwert r_0 herum schwingt. Auch dafür existiert eine Kraftkonstante k ; beim zweiatomigen Molekül ist das die Bindungsstärke.

Ganz analog zum Fall des Rotators wird dann wieder die Masse m des in Abb. 2 dargestellten Oszillators durch die reduzierte Masse ersetzt:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (10)$$

Man beachte jedoch, dass diese Ableitung nach den Gesetzen der klassischen Mechanik das wirkliche Schwingungsverhalten nur sehr unvollständig beschreibt, denn sie gibt die Parabelform vor. Sie sollte nur für Schwingungen mit niedrigen Amplituden herangezogen werden. Bei höheren wird das Schwingungsverhalten eher durch eine unsymmetrische Potenzialkurve beschrieben, die – in Übereinstimmung mit den beobachteten Fakten – einen Bindungsbruch zulässt. Außerdem ist die atomare Schwingung natürlich den Gesetzen der Quantenmechanik unterworfen, was bedeutet, dass nur bestimmte Amplituden (Schwingungsquanten) zur Verfügung stehen.