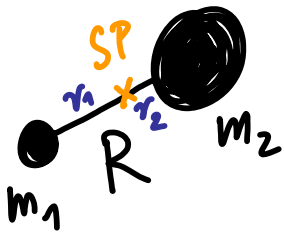


# Rotation von Molekülen



Bestimme SP des Moleküls:

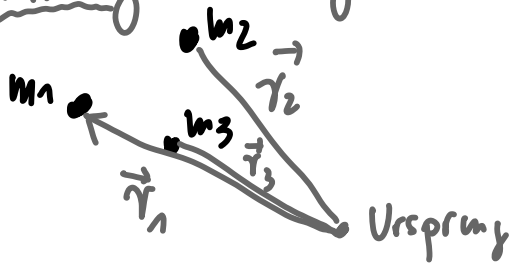
Es muß gelten

$$\left. \begin{aligned} r_1 \cdot m_1 &= r_2 \cdot m_2 \\ r_1 + r_2 &= R \end{aligned} \right\} \begin{aligned} r_1 &= \frac{m_2}{M} \cdot R \\ r_2 &= \frac{m_1}{M} \cdot R \end{aligned}$$

Ausgedrückt über red. Masse  $\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$ :

$$\begin{aligned} \mu &= m_1 + m_2 \\ r_1 &= \frac{\mu}{m_1} \cdot R \\ r_2 &= \frac{\mu}{m_2} \cdot R \end{aligned}$$

Bemerkung: Für allgemeine Moleküle (mehr als 2 Atome)



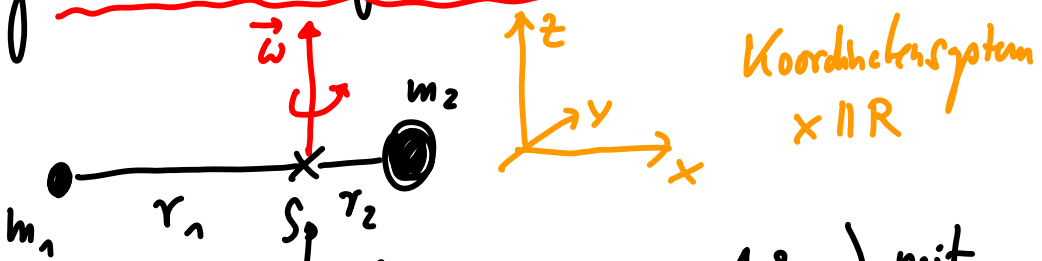
SP in diesem Koordinatensystem:

$$\vec{r}_{sp} = \sum_{i=1}^3 m_i \cdot \vec{r}_i$$

Neues Schwerpunktsystem:

$$\vec{r}_i' = \vec{r}_i - \vec{r}_{sp}$$

# Drehung von 2-atomigem Molekül (klassisch)

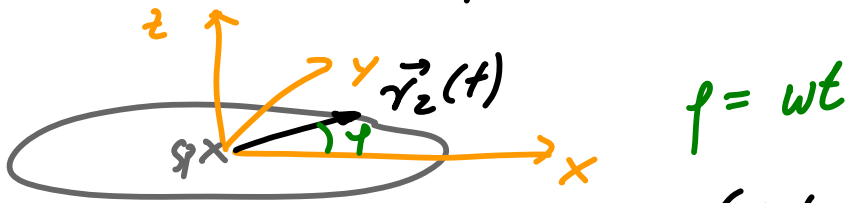


Drehung des Moleküls (bspweise um z-Achse) mit Winkelgeschwindigkeit  $\omega$

$$\vec{\omega} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix}$$

Beschreibung von den Vektoren  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  bei Rotation:

$$\vec{r}_2(t=0) = \begin{pmatrix} r_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{r}_2(t) = \begin{pmatrix} r_2 \cdot \cos(\omega t) \\ r_2 \cdot \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}$$



Kinetische Energie für Rotation (klassisch)

$$E_{rot} = \frac{1}{2} I_{\omega} \cdot \omega^2$$

$I_{\omega}$ : Trägheitsmoment für Rotation um Achse  $\vec{\omega}$

Berechnung des Trägheitsmoment:  $I_{\omega} = \sum_{i=1}^n m_i \underbrace{r_{iL}^2}_{\text{Abstand von Drehachse}}$   
 n Atome

2-atomiges Molekül:

$$I_z = I_y = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu R^2 \rightarrow E_{rot} = \frac{1}{2} \mu R^2 \omega^2$$

$$I_x = 0 \rightarrow E_{rot} = 0$$

im Allgemeinen:

$$I_{\omega} = \frac{\vec{\omega}}{\omega} \cdot \tilde{I} \cdot \frac{\vec{\omega}}{\omega} \quad \tilde{I}: \text{Trägheitstensor (3x3 Matrix)}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\omega_x}{\omega} & \frac{\omega_y}{\omega} & \frac{\omega_z}{\omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{xx} & I_{xy} & I_{xz} \\ I_{yx} & I_{yy} & I_{yz} \\ I_{zx} & I_{zy} & I_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\omega_x}{\omega} \\ \frac{\omega_y}{\omega} \\ \frac{\omega_z}{\omega} \end{pmatrix}$$

Zeilenvektor                      3x3 Matrix                      Spaltenvektor

$$I_{xx} = \sum_{i=1}^N m_i (y_i^2 + z_i^2)$$

$$\vec{r}_i = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix}$$

$$I_{yy} = \sum_{i=1}^N m_i (x_i^2 + z_i^2)$$

$$I_{zz} = \sum_{i=1}^N m_i (x_i^2 + y_i^2)$$

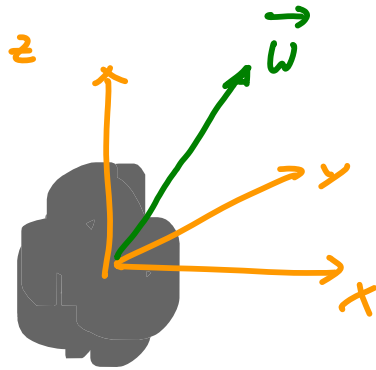
$$I_{xy} = I_{yx} = - \sum_i m_i x_i y_i$$

$$I_{xz} = I_{zx} = - \sum_i m_i x_i z_i$$

$$I_{yz} = I_{zy} = - \sum_i m_i y_i z_i$$

Symmetrische Matrix

Allgemeine Bezeichnung  
vom Trägheitsmoment  $\tilde{I}$   
im KS  $(x, y, z)$



$$E_{rot} = \frac{1}{2} \tilde{I} \omega^2 = \frac{1}{2} \frac{\vec{\omega}}{\omega} \tilde{I} \frac{\vec{\omega}}{\omega} \cdot \omega^2 = \frac{1}{2} \vec{\omega} \tilde{I} \vec{\omega}$$

beim 2-atomigen Molekül:

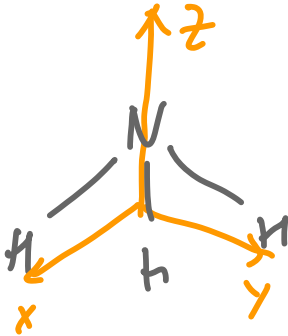
$$\tilde{I} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu R^2 & 0 \\ 0 & 0 & \mu R^2 \end{pmatrix}$$

Bemerkung: Es läßt sich für jedes Molekül ein  
Koordinatensystem finden, in dem  $\tilde{I}$   
diagonal ist  $\tilde{I} = \begin{pmatrix} I_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & I_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & I_{zz} \end{pmatrix}$

$I_{xx}, I_{yy}, I_{zz}$  : Hauptträgheitsmomente  
 $x, y, z$  Hauptträgheitsachsen

Das Achsensystem wird durch Molekülsymmetrie vorgegeben

Bsp.



( $x, y$  können beliebig  $\perp$  zu  $z$  gewählt werden)