

Виртуальные частицы

На примере системы N_2 -Ar сделаем преобразование координат, аналогичное введению приведенной массы в задаче двух тел, приводящее к возникновению виртуальных масс. Обозначим массы азотов за m_1 , m_2 , аргона – за m_3 . Радиус-векторам относительно лабораторной системы координат припишем соответствующие номера.

$$T = \frac{1}{2}m_1\dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\mathbf{r}}_2^2 + \frac{1}{2}m_3\dot{\mathbf{r}}_3^2 \quad (1)$$

Осуществим замену переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \longrightarrow \mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_{12}$:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\rho}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{r}_{12} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \end{cases} \iff \begin{cases} \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_{12} + \frac{m_2}{m_1 + m_2}\boldsymbol{\rho}_{12} \\ \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_{12} - \frac{m_1}{m_1 + m_2}\boldsymbol{\rho}_{12} \end{cases} \quad (2)$$

Подставляя замену (2) в выражение кинетической энергии (1), получаем

$$T = \frac{1}{2}m_{12}\dot{\mathbf{r}}_{12}^2 + \frac{1}{2}\mu_{12}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{12}^2 + \frac{1}{2}m_3\dot{\mathbf{r}}_3^2, \quad (3)$$

где были введены обозначения

$$m_{12} = m_1 + m_2, \quad \frac{1}{\mu_{12}} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}.$$

Заметим, что вектор $\boldsymbol{\rho}_{12}$ направлен вдоль линейной молекулы N_2 , а вектор \mathbf{r}_{12} – к ее центру масс.

Проделаем аналогичную операцию с парой векторов $\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_3$, введя переменные $\boldsymbol{\rho}_\Sigma, \mathbf{r}_\Sigma$:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\rho}_\Sigma = \mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{r}_\Sigma = \frac{m_{12}\mathbf{r}_{12} + m_3\mathbf{r}_3}{m_{12} + m_3} \end{cases} \iff \begin{cases} \mathbf{r}_3 = \mathbf{r}_\Sigma - \frac{m_{12}}{m_{12} + m_3}\boldsymbol{\rho}_\Sigma \\ \mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_\Sigma + \frac{m_3}{m_{12} + m_3}\boldsymbol{\rho}_\Sigma \end{cases} \quad (4)$$

$$T = \frac{1}{2}m_\Sigma\dot{\mathbf{r}}_\Sigma^2 + \frac{1}{2}\mu_\Sigma\dot{\boldsymbol{\rho}}_\Sigma^2 + \frac{1}{2}\mu_{12}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{12}^2, \quad (5)$$

где были введены обозначения

$$m_\Sigma = m_1 + m_2 + m_3, \quad (\text{сумма масс мономеров})$$

$$\frac{1}{\mu_\Sigma} = \frac{1}{m_1 + m_2} + \frac{1}{m_3}. \quad (\text{приведенная масса мономеров})$$

Переместив начало системы отсчета в центр масс системы, исключаем первое слагаемое в (5).

$$T = \frac{1}{2}\mu_{\Sigma}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{\Sigma}^2 + \frac{1}{2}\mu_{12}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{12}^2. \quad (6)$$

Введем подвижную систему координат таким образом, чтобы линейная молекула и атом всегда находились в плоскости XZ , а атом лежал на оси OZ . Введем внутренние координаты $\mathbf{q} = \{R, \Theta\}$; R – длина вектора $\boldsymbol{\rho}_{\Sigma}$, равная расстоянию между центром масс N_2 и Ar , Θ – угол поворота N_2 относительно линии связи в подвижной плоскости.

$$\begin{array}{ll} \boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \rightarrow \mathbf{R}_1 = \{0, 0, R\} & \\ \boldsymbol{\rho}_{12} \rightarrow \mathbf{R}_2 = \{l \cos \Theta, 0, l \sin \Theta\} & \end{array} \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{array}{ll} X_1 = 0 & X_2 = l \sin \Theta \\ Y_1 = 0 & Y_2 = 0 \\ Z_1 = R & Z_2 = l \cos \Theta \end{array}$$