

$$m_1 \ddot{x}'_1 = k(x'_2 - x'_1) \quad (1a)$$

$$m_2 \ddot{x}'_2 = -k(x'_2 - x'_1) \quad (1b)$$

为了展示分子振动的一般方法, 假定我们有一个多原子分子模型, N 个质点由几个弹簧耦合。我们现在寻找的特解形式为

$$x'_i = a_i \sin(\omega t + \phi) \quad i=1, \dots, N$$

式中, a_i 为第 i 个质点的振幅。注意: 在我们寻找的特解中, 每个质点以相同的频率振动。相角 ϕ 对每个质点也相同。我们这样论证存在这种解的合理性, 若每个质点都以不同的频率振动, 对孤立的分子来说, 它的线动量不可能守恒。

这些特解称为系统的简正模, 类似于 6.4 节讨论的两个耦合摆的简正模。如果存在 N' 个运动方程, 就有 N' 个简正模, 每个都有自己独特的频率。总有一个零频率的简正模, 对应于无振动静止系统的平庸情形, 留下 $N'-1$ 个非平庸的频率。

为给出简正模的一个例子, 且保持运算简单, 我们回到质量为 m_1 和 m_2 的双原子分子模型。运动方程有两个, 所以我们预期有一个非平庸的振动频率。在方程 (1a) 和 (1b) 中利用

$$x'_i = a_i \sin(\omega t + \phi)$$

$$\ddot{x}'_i = -\omega^2 a_i \sin(\omega t + \phi)$$

可得

$$(k - \omega^2 m_1) a_1 = k a_2 \quad (2a)$$

$$(k - \omega^2 m_2) a_2 = k a_1 \quad (2b)$$

因子 $\sin(\omega t + \phi)$ 在每一项里都有, 可全部消去。从方程 (2a) 中解出 a_2 , 代入方程 (2b), 经过一些化简, 得到振幅 a_1 的方程:

$$\omega^2 [\omega^2 m_1 m_2 - k(m_1 + m_2)] a_1 = 0 \quad (3)$$

方程 (3) 有几个可能的解。一个解是 $a_1 = 0$, 且由方程 (2a) 可得 $a_2 = 0$ 。这是一个静止无振动系统的平庸解。类似的, 解 $\omega^2 = 0$ 也对应一个非振动系统。感兴趣的非平庸解是

$$\begin{aligned}\omega^2 &= \frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} \\ &= \frac{k}{\mu}\end{aligned}$$

与我们的预期一致。

现在有了简正模频率，解方程 (2a) 可得相对振幅 a_2/a_1 ：

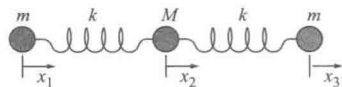
$$\frac{a_2}{a_1} = -\frac{m_1}{m_2}$$

两个质点运动反向，振幅满足线动量守恒。实际的振幅依赖初始条件。

处理多原子分子模型的思路相同，只是计算更复杂一些，就像下面例子所看到的那样。然而，最终的结果仍然是用质量和弹簧劲度系数表示的简正模频率 ω_i 。重要的是， ω_i 只是系统可能的非平庸振动频率，任何可能的运动则是简正模的线性组合：

$$\sum_{i=1}^{N'-1} A_i \sin(\omega_i t + \phi_i)$$

振幅 A_i 和相角 ϕ_i 依赖初始条件。容易证明，一个简正模的总能量正比于 A_i^2 。



例 6.7 二氧化碳的直线振动

CO_2 是一个直线分子，中心碳原子的两边各有一个氧原子。只考虑直线振动，这个质点-弹簧模型有三个质量 m 、 M 和 m ，两个弹簧，如图所示。两个弹簧有相同的劲度系数，代表碳-氧键。

原子相对平衡位置的偏离用 x_1 、 x_2 和 x_3 表示，运动方程是

$$m \ddot{x}_1 = -k(x_1 - x_2) \quad (1a)$$

$$M \ddot{x}_2 = -k(x_2 - x_1) - k(x_2 - x_3) \quad (1b)$$

$$m \ddot{x}_3 = -k(x_3 - x_2) \quad (1c)$$

定义频率 $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ 和 $\Omega_0 = \sqrt{k/M}$ 可以简化表示，上述方程变为