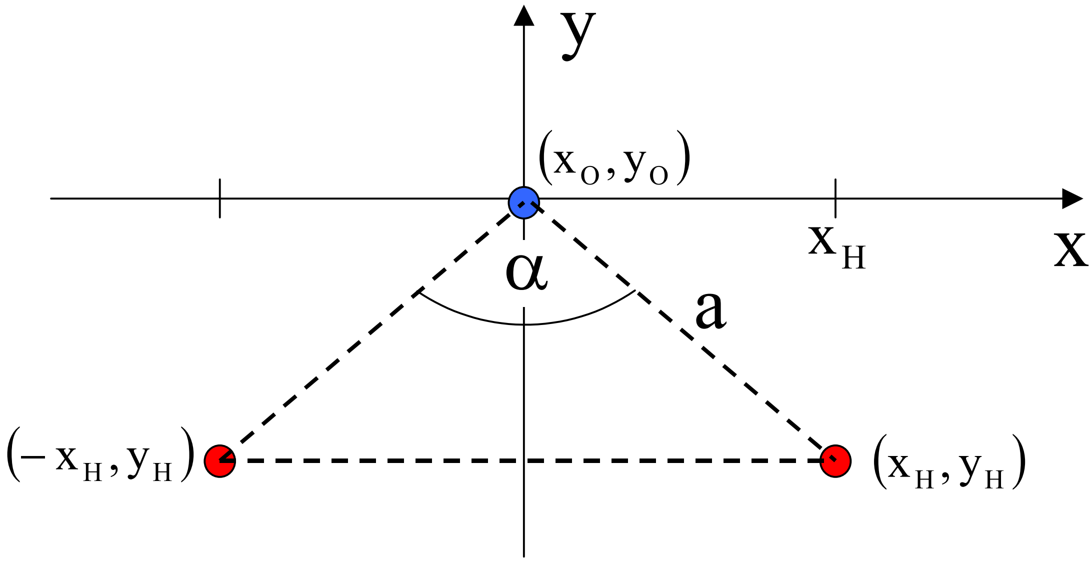
Schwerpunkt und Trägheitsmoment des Wassermoleküls



Unter Verwendung der Beziehung zur Berechnung des Schwerpunktes für Punktmassen

$$\vec{r}_s = \frac{\sum_{i=1}^{3} \vec{r}_i m_i}{M}$$

erhält man die Koordinaten

$$x_s = \frac{\sum_{i=1}^{3} x_i m_i}{M} \quad \text{und} \quad y_s = \frac{\sum_{i=1}^{3} y_i m_i}{M}$$

Die z-Koordinate des ebenen Problems setzen wir gleich Null.

Für die Berechnung der x-Koordinate des Schwerpunktes erhält man

$$x_s = (x_H m_H - x_H m_H + x_O m_O)/M = 0$$

Dieses Resultat war bereits aufgrund der Symmetrie des Problems zu erwarten.

Für die y-Koordinate des Schwerpunktes folgt:

$$y_s = \left(2y_H m_H + y_O m_O\right)/M$$

Gegeben seien der Winkel $\beta = \alpha/2$, der Abstand a sowie die relativen Atommassen $m_{1,2} = m_H = 1$ und $m_3 = m_O = 16$. Aus der Geometrie der Anordnung erhält man

$$x_H = x_{1,2} = \pm a \sin\beta \quad x_O = x_3 = 0 \quad y_H = y_{1,2} = -a\cos\beta \quad y_3 = 0$$

Die (relative) Gesamtmasse beträgt M = 18.

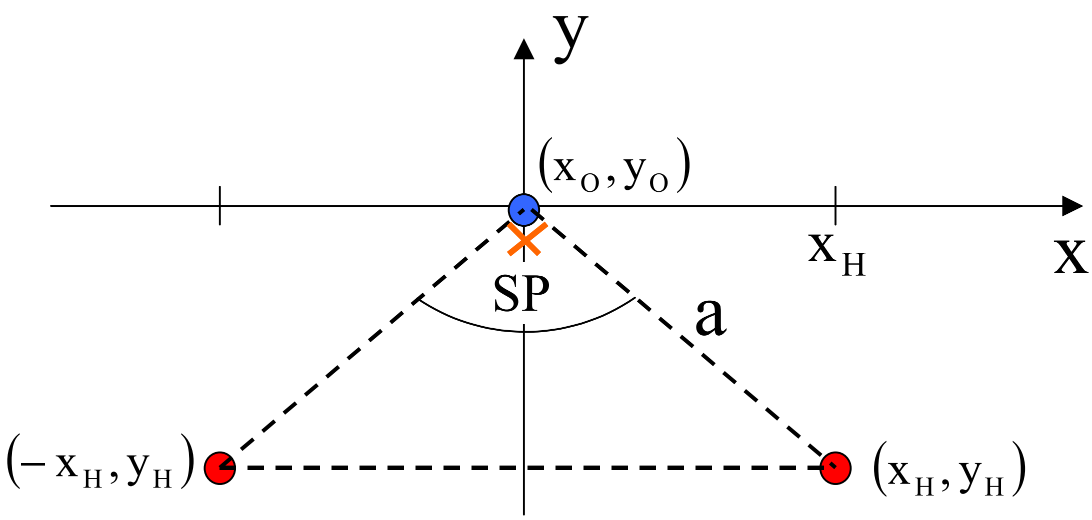
Setzt man diese Werte in die Beziehung für y_s ein, erhält man

$$y_s = \frac{y_H}{9} = -\frac{a\cos\beta}{9}$$

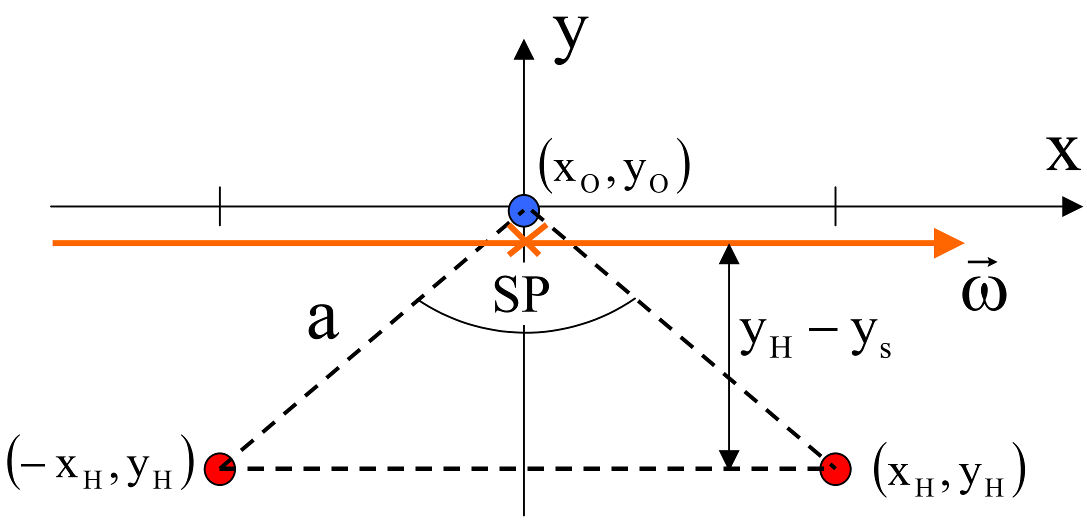
Somit haben wir bezüglich unseres gewählten Koordinatensystems folgende Schwerpunktkoordinaten:

$$\boxed{\vec{r}_s = \left(0, -\frac{a\cos\beta}{9}, 0\right)}$$

Damit liegt der Schwerpunkt SP sehr nahe beim Sauerstoffatom.



Will man die im Molekül gespeicherte Rotationsenergie berechnen, benötigt man das Trägheitsmoment bezüglich der Rotationsachsen. Freie Moleküle rotieren um ihre sogenannten Hauptträgheitsachsen. Diese Achsen gehen durch den Schwerpunkt und sind so gerichtet, dass die Trägheitsmomente extremal sind. Für eine (von 3 Hauptträgheitsachsen) Rotationsachse soll im folgenden das Trägheitsmoment angegeben werden.



Unter Verwendung von

$$I = \sum_{i=1}^{3} r_i^2 m_i$$

und

$$r_1 = r_O = y_s = \frac{y_H}{9}$$

$$r_2 = r_3 = r_H = y_H - y_s = \frac{8}{9} y_H$$

kann man das Trägheitsmoment berechnen. Man muss jetzt allerdings die absoluten Atommassen verwenden. Im folgenden ist mit m_H die Protonenmasse gemeint. Durch Einsetzen erhält man:

$$\boxed{I = \frac{144}{81} m_H a^2 \cos^2 \beta}$$