

Trabajo Práctico Nº2:

Modos normales de vibración en una molécula unidimensional - Soluciones

Derivación de las ecuaciones de movimiento: Vamos a deducir las ecuaciones de movimiento de modo general para una molécula lineal triatómica. Para ello etiquetamos las masas de los núcleos de izquierda a derecha como m_1 , m_2 y m_3 . Llamaremos k_1 las constante restitutiva entre las masas m_1 y m_2 y k_2 las constante restitutiva entre las masas m_2 y m_3 . Llamaremos b_1 y b_2 , a las distancias de equilibrio entre $m_1 - m_2$ y $m_2 - m_3$, respectivamente (longitudes naturales, sin estiramiento de los 'resortes').

La masa m_1 es traccionada hacia la derecha por una fuerza \bar{F}_1 . La masa m_2 es traccionada por la izquierda por una fuerza \bar{F}'_1 y por la derecha por una fuerza \bar{F}_2 . Finalmente, la masa m_3 es traccionada por la izquierda por una fuerza \bar{F}'_2 . Donde $F_1 = F'_1$ y $F_2 = F'_2$. Las ecuaciones de movimiento resultan

$$F_1 = m_1 \ddot{x}_{1f} \quad (1)$$

$$-F_1 + F_2 = m_2 \ddot{x}_{2f} \quad (2)$$

$$-F_2 = m_3 \ddot{x}_{3f} \quad (3)$$

Las fuerzas vienen dada por el estiramiento respecto a sus longitudes naturales y las constantes elásticas,

$$F_1 = k_1(x_{2f} - x_{1f} - b_1) \quad (4)$$

$$F_2 = k_2(x_{3f} - x_{2f} - b_2) \quad (5)$$

Introducimos nuevas variables que dan el apartamiento de cada núcleo respecto a su posición de equilibrio,

$$x_1 = x_{1f} - x_{1i} \quad (6)$$

$$x_2 = x_{2f} - x_{2i} \quad (7)$$

$$x_3 = x_{3f} - x_{3i} \quad (8)$$

Luego,

$$\ddot{x}_{1f} = \ddot{x}_1 \quad (9)$$

$$\ddot{x}_{2f} = \ddot{x}_2 \quad (10)$$

$$\ddot{x}_{3f} = \ddot{x}_3 \quad (11)$$

y

$$x_{2f} - x_{1f} = x_2 - x_1 + b_1 \quad (12)$$

$$x_{3f} - x_{2f} = x_3 - x_2 + b_2 \quad (13)$$

De modo que las ecuaciones de Newton resultan,

$$k_1(x_2 - x_1) = m_1\ddot{x}_1 \quad (14)$$

$$-k_1(x_2 - x_1) + k_2(x_3 - x_2) = m_2\ddot{x}_2 \quad (15)$$

$$-k_2(x_3 - x_2) = m_3\ddot{x}_3 \quad (16)$$

luego,

$$\frac{k_1}{m_1}(x_2 - x_1) = \ddot{x}_1 \quad (17)$$

$$-\frac{k_1}{m_2}(x_2 - x_1) + \frac{k_2}{m_2}(x_3 - x_2) = \ddot{x}_2 \quad (18)$$

$$-\frac{k_2}{m_3}(x_3 - x_2) = \ddot{x}_3 \quad (19)$$

Escribiendo las coordenadas en forma ordena obtenemos las siguientes ecuaciones para el caso general de diferentes masas, con diferentes resortes,

$$\frac{k_1}{m_1}x_1 - \frac{k_1}{m_1}x_2 = -\ddot{x}_1 \quad (20)$$

$$-\frac{k_1}{m_2}x_1 + \left[\frac{k_1}{m_2} + \frac{k_2}{m_2}\right]x_2 - \frac{k_2}{m_2}x_3 = -\ddot{x}_1 \quad (21)$$

$$-\frac{k_2}{m_3}x_2 + \frac{k_2}{m_3}x_3 = -\ddot{x}_3 \quad (22)$$

En forma matricial resulta,

$$A\bar{x} = -\ddot{\bar{x}} \quad (23)$$

donde

$$A = \begin{bmatrix} \frac{k_1}{m_1} & -\frac{k_1}{m_1} & 0 \\ -\frac{k_1}{m_2} & \frac{k_1+k_2}{m_2} & -\frac{k_2}{m_2} \\ 0 & -\frac{k_2}{m_3} & \frac{k_2}{m_3} \end{bmatrix} \quad (24)$$

De este modo, podemos definir una transformación lineal V tal que,

$$V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3 \quad (25)$$

$$: \bar{x} \rightarrow V[\bar{x}] = A\bar{x} = -\ddot{\bar{x}} \quad (26)$$

Ecuaciones de movimiento para la molécula CO₂: Especializando para la molécula de dióxido de carbono,

$$m_1 = m_3 = m \quad (27)$$

$$m_2 = M \quad (28)$$

$$k_1 = k_2 = k \quad (29)$$

obtenemos el siguiente sistemas de ecuaciones,

$$\frac{k}{m}x_1 - \frac{k}{m}x_2 = -\ddot{x}_1 \quad (30)$$

$$-\frac{k}{M}x_1 + 2\frac{k}{M}x_2 - \frac{k}{M}x_3 = -\ddot{x}_1 \quad (31)$$

$$-\frac{k}{m}x_2 + \frac{k}{m}x_3 = -\ddot{x}_3 \quad (32)$$

Luego

$$A \bar{x} = -\ddot{\bar{x}} \quad (33)$$

con

$$A = \begin{bmatrix} k/m & -k/m & 0 \\ -k/M & 2k/M & -k/M \\ 0 & -k/m & k/m \end{bmatrix} \quad (34)$$

Autovalores: La ecuación característica para la molécula de dióxido de carbono CO₂ resulta,

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} k/m - \lambda & -k/m & 0 \\ -k/M & 2k/M - \lambda & -k/M \\ 0 & -k/m & k/m - \lambda \end{vmatrix} \quad (35)$$

$$= \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) \left[\left(\frac{2k}{M} - \lambda\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) - \left(-\frac{k}{m}\right) \left(-\frac{k}{M}\right) \right] - \left(-\frac{k}{M}\right) \left[\left(-\frac{k}{m}\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) - 0 \right] \quad (36)$$

$$\det(A - \lambda I) = \frac{k}{m} \left[\left(\frac{2k}{M} - \lambda\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) - \left(-\frac{k}{m}\right) \left(-\frac{k}{M}\right) \right] - \lambda \left[\left(\frac{2k}{M} - \lambda\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) - \left(-\frac{k}{m}\right) \left(-\frac{k}{M}\right) \right] - \frac{k}{M} \left(\frac{k}{m}\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) \quad (37)$$

$$\det(A - \lambda I) = \frac{k}{m} \left[\left(\frac{2k}{M} - \lambda\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) \right] - \frac{k}{m} \left[-\left(-\frac{k}{m}\right) \left(-\frac{k}{M}\right) \right] - \lambda \left[\left(\frac{2k}{M} - \lambda\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) \right] - \lambda \left[-\left(-\frac{k}{m}\right) \left(-\frac{k}{M}\right) \right] - \frac{k}{M} \left(\frac{k}{m}\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) \quad (38)$$

$$\det(A - \lambda I) = \frac{k}{m} \left(\frac{2k}{M} - \lambda\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) - \frac{k}{m} \left(\frac{k}{m}\right) \left(\frac{k}{M}\right) - \lambda \left(\frac{2k}{M} - \lambda\right) \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) + \lambda \left(\frac{k}{m}\right) \left(\frac{k}{M}\right) - \frac{k^2}{mM} \left(\frac{k}{m} - \lambda\right) \quad (39)$$

$$\begin{aligned}
\det(A - \lambda I) &= \frac{k}{m} \left(\frac{2k}{M} - \lambda \right) \left(\frac{k}{m} - \lambda \right) \\
&\quad - \frac{k^3}{m^2 M} \\
&\quad - \lambda \left(\frac{2k}{M} - \lambda \right) \left(\frac{k}{m} - \lambda \right)
\end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned}
&\quad + \lambda \left(\frac{k^2}{mM} \right) \\
&\quad - \frac{k^2}{mM} \left(\frac{k}{m} - \lambda \right)
\end{aligned} \tag{41}$$

$$\begin{aligned}
\det(A - \lambda I) &= \frac{k}{m} \left(\frac{2k}{M} \right) \left(\frac{k}{m} \right) - \frac{k}{m} \left(\frac{2k}{M} \right) (\lambda) - \frac{k}{m} (\lambda) \left(\frac{k}{m} \right) + \frac{k}{m} (\lambda) (\lambda) \\
&\quad - \frac{k^3}{m^2 M} \\
&\quad - \lambda \left(\frac{2k}{M} \right) \left(\frac{k}{m} \right) + \lambda \left(\frac{2k}{M} \right) (\lambda) + \lambda (\lambda) \left(\frac{k}{m} \right) - \lambda (\lambda) (\lambda) \\
&\quad + \lambda \left(\frac{k^2}{mM} \right) \\
&\quad - \frac{k^2}{mM} \left(\frac{k}{m} \right) + \frac{k^2}{mM} (\lambda)
\end{aligned} \tag{42}$$

$$\begin{aligned}
\det(A - \lambda I) &= 2 \frac{k^3}{m^2 M} - 2\lambda \frac{k^2}{mM} - \lambda \frac{k^2}{m^2} + \lambda^2 \frac{k}{m} \\
&\quad - \frac{k^3}{m^2 M} \\
&\quad - 2\lambda \frac{k^2}{mM} + 2\lambda^2 \frac{k}{M} + \lambda^2 \frac{k}{m} - \lambda^3 \\
&\quad + \lambda \frac{k^2}{mM} \\
&\quad - \frac{k^3}{m^2 M} + \lambda \frac{k^2}{mM}
\end{aligned} \tag{43}$$

$$\begin{aligned}
\det(A - \lambda I) &= -\lambda^3 \\
&\quad + \lambda^2 \left[\frac{k}{m} + 2 \frac{k}{M} + \frac{k}{m} \right] \\
&\quad + \lambda \left[-2 \frac{k^2}{mM} - \frac{k^2}{m^2} - 2 \frac{k^2}{mM} + \frac{k^2}{mM} + \frac{k^2}{mM} \right] \\
&\quad + \left[2 \frac{k^3}{m^2 M} - \frac{k^3}{m^2 M} - \frac{k^3}{m^2 M} \right]
\end{aligned} \tag{44}$$

$$\begin{aligned}
\det(A - \lambda I) &= -\lambda^3 \\
&+ \lambda^2 2k \left[\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right] \\
&- \lambda \frac{2k^2}{m} \left[\frac{1}{M} + \frac{1}{2m} \right] = 0
\end{aligned} \tag{45}$$

$$= \lambda^3 - \lambda^2 2k \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + \lambda \frac{2k^2}{m} \left(\frac{1}{M} + \frac{1}{2m} \right) \tag{46}$$

$$= \lambda^3 - \lambda^2 2k \frac{m+M}{mM} + \lambda \frac{2k^2}{m} \frac{2m+M}{2mM} \tag{47}$$

$$= \lambda \left[\lambda^2 - \lambda 2k \frac{m+M}{mM} + \frac{2k^2}{m} \frac{2m+M}{2mM} \right] \tag{48}$$

Uno de los autovalores es $\lambda_1 = 0$, los otros dos se obtienen de las raices de la ecuación siguiente

$$\lambda^2 + b\lambda + c = 0 \tag{49}$$

donde

$$b = -\frac{2k}{mM}(m+M) \tag{50}$$

$$c = \frac{k^2}{m^2M}(2m+M) \tag{51}$$

$$b^2 - 4c = \frac{4k^2}{m^2M^2}(m+M)^2 - 4\frac{k^2}{m^2M}(2m+M) \tag{52}$$

$$= \frac{4k^2}{m^2M} \left[\frac{(m+M)^2}{M} - (2m+M) \right] \tag{53}$$

$$= \frac{4k^2}{m^2M} \left[\frac{(m+M)^2 - M(2m+M)}{M} \right] \tag{54}$$

$$= \frac{4k^2}{m^2M} \left[\frac{(m^2 + M^2 + 2mM) - 2Mm - M^2}{M} \right] \tag{55}$$

$$= \frac{4k^2}{m^2M} \left[\frac{m^2}{M} \right] \tag{56}$$

$$b^2 - 4c = \frac{4k^2}{M^2} \tag{57}$$

Luego,

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4c}}{2} \\
&= \frac{1}{2} \left[2k \frac{(m+M)}{mM} \pm \sqrt{\frac{4k^2}{M^2}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[2k \frac{(m+M)}{mM} \pm \frac{2k}{M} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[2k \frac{m}{mM} + 2k \frac{M}{mM} \pm \frac{2k}{M} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[2k \frac{1}{M} + 2k \frac{1}{m} \pm \frac{2k}{M} \right] \\
&= k \left[\frac{1}{M} + \frac{1}{m} \pm \frac{1}{M} \right]
\end{aligned} \tag{58}$$

los otros dos autovalores son

$$\lambda = k \left[\frac{1}{M} + \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right] = k \left[\frac{2}{M} + \frac{1}{m} \right] = k \left(\frac{2m+M}{mM} \right) \tag{59}$$

$$\lambda = k \left[\frac{1}{M} + \frac{1}{m} - \frac{1}{M} \right] = k \left(\frac{1}{m} \right) \tag{60}$$

Resumen de autovalores:

$$\lambda_1 = 0 \tag{61}$$

$$\lambda_2 = \frac{k}{m} \tag{62}$$

$$\lambda_3 = \frac{(2m+M)k}{Mm} \tag{63}$$

Autovector de $\lambda_1 = 0$: El autovector the $\lambda_1 = 0$ resulta del siguiente sistema,

$$(A - \lambda_1 I)\bar{v} = \begin{pmatrix} k/m & -k/m & 0 \\ -k/M & 2k/M & -k/M \\ 0 & -k/m & k/m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \bar{b} = 0 \tag{64}$$

La forma reducida de $(A|\bar{b})$ es,

$$\left(\begin{array}{ccc|c} k/m & -k/m & 0 & 0 \\ -k/M & 2k/M & -k/M & 0 \\ 0 & -k/m & k/m & 0 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{array} \right) \tag{65}$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{array} \right) \tag{66}$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \tag{67}$$

Luego,

$$x - y = 0 \Rightarrow x = y \quad (68)$$

$$y - z = 0 \Rightarrow y = z \quad (69)$$

tomando $z = 1 \Rightarrow y = 1, x = 1$. El autovecto asociado a $\lambda_1 = 0$ es,

$$\bar{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (70)$$

tambien podría ser

$$\begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (71)$$

Autovector de $\lambda_2 = \frac{k}{m}$: El autovector the $\lambda_2 = k/m$ resulta del siguiente sistema,

$$(A - \lambda_2 I)\bar{v} = \begin{pmatrix} k/m - k/m & -k/m & 0 \\ -k/M & 2k/M - k/m & -k/M \\ 0 & -k/m & k/m - k/m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (72)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -k/m & 0 \\ -k/M & k(2m + M)/mM & -k/M \\ 0 & -k/m & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (73)$$

$$= \bar{b} = 0 \quad (74)$$

La forma reducida de $(A|\bar{b})$ es,

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 0 & -k/m & 0 & 0 \\ -k/M & k(2m + M)/mM & -k/M & 0 \\ 0 & -k/m & 0 & 0 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & (2m + M)/m & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad (75)$$

Luego,

$$-y = 0 \Rightarrow y = 0 \quad (76)$$

$$-x + \frac{2m + M}{m}y - z = 0 \Rightarrow x = -z \quad (77)$$

$$-y = 0 \Rightarrow y = 0 \quad (78)$$

tomando $z = 1 \Rightarrow y = 0, x = -1$. El autovecto asociado a $\lambda_2 = k/m$ es,

$$\bar{v}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (79)$$

desde luego que tambien podría ser $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

Autovector de $\lambda_3 = \frac{(2m+M)k}{mM}$: El autovector the $\lambda_3 = k(2m+M)/mM$ resulta del siguiente sistema,

$$(A - \lambda_3 I)\bar{v} = \begin{pmatrix} \frac{k}{m} - \frac{k(2m+M)}{mM} & -k/m & 0 \\ -\frac{k}{M} & 2k/M - k(2m+M)/mM & -k/M \\ 0 & -k/m & k/m - k(2m+M)/mM \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -2k/M & -k/m & 0 \\ -k/M & -k/m & -k/M \\ 0 & -k/m & -2k/M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (80)$$

$$= \bar{b} = 0 \quad (81)$$

La forma reducida de $(A|\bar{b})$ es,

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -2k/M & -k/m & 0 & 0 \\ -k/M & -k/m & -k/M & 0 \\ 0 & -k/m & -2k/M & 0 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} -2k/M & -k/m & 0 & 0 \\ 0 & k/m & 2k/M & 0 \\ 0 & -k/m & -2k/M & 0 \end{array} \right) \quad (82)$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} -2k/M & -k/m & 0 & 0 \\ 0 & k/m & 2k/M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad (83)$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} -2m & -M & 0 & 0 \\ 0 & M & 2m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad (84)$$

Luego,

$$-2mx - My = 0 \Rightarrow x = -\frac{M}{2m}y \quad (85)$$

$$My + 2mz = 0 \Rightarrow y = -\frac{2m}{M}z \quad (86)$$

tomando $z = 1 \Rightarrow y = -\frac{2m}{M}, x = -\frac{M}{2m}(-\frac{2m}{M}) = 1$. El autovector asociado a $\lambda_3 = k(2m+M)/mM$ es,

$$\bar{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2m/M \\ 1 \end{pmatrix} \quad (87)$$

desde luego que tambien podría ser $\begin{pmatrix} -1 \\ 2m/M \\ -1 \end{pmatrix}$

Resumen de autovectores:

$$\bar{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (88)$$

$$\bar{v}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (89)$$

$$\bar{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2m/M \\ 1 \end{pmatrix} \quad (90)$$

Interpretación:

- En el primer modo (λ_1) los tres átomos se desplazan colectivamente (como un rígido) hacia la derecha.
- En el segundo modo (λ_2) ambos átomos de los extremos se alejan del átomo central, el cual permanece quieto.
- En el tercer modo (λ_3) los átomos de los extremos se mueven en la misma dirección mientras el central se mueve en sentido opuesto.

Desplazamientos de los átomos como función del tiempo: Escribiendo la matrix $A = SDS^{-1}$ con $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ y $S = (\bar{v}_1, \bar{v}_2, \bar{v}_3)$ podemos reescribir es sistema,

$$\ddot{\bar{x}} + A\bar{x} = 0 \quad (91)$$

$$\ddot{\bar{x}} + SDS^{-1}\bar{x} = 0 \quad (92)$$

$$S^{-1}\ddot{\bar{x}} + DS^{-1}\bar{x} = 0 \quad (93)$$

$$\ddot{\bar{\eta}} + D\bar{\eta} = 0 \quad (94)$$

donde

$$\bar{\eta} = S^{-1}\bar{x} \quad (95)$$

$$\ddot{\bar{\eta}} = S^{-1}\ddot{\bar{x}} \quad (96)$$

Luego,

$$\ddot{\eta}_1 + \lambda_1\eta_1 = 0 \quad (97)$$

$$\ddot{\eta}_2 + \lambda_2\eta_2 = 0 \quad (98)$$

$$\ddot{\eta}_3 + \lambda_3\eta_3 = 0 \quad (99)$$

La solución para cada modo normal es,

$$\eta_i(t) = \eta_i(0)\cos(\sqrt{\lambda_i}t) + \frac{\dot{\eta}_i(0)}{\sqrt{\lambda_i}}\text{sen}(\sqrt{\lambda_i}t) \quad (100)$$

Luego, el desplazamiento the cada núcleo se obtiene a partir de la relación inversa por la cual fue definido el modo normal,

$$\bar{x} = S\bar{\eta} \quad (101)$$

con

$$S = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -2m/M \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (102)$$

Luego,

$$\bar{x} = S\bar{\eta} \quad (103)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -2m/M \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{pmatrix} \quad (104)$$

$$= \begin{pmatrix} \eta_1 - \eta_2 + \eta_3 \\ \eta_1 - \frac{2m}{M}\eta_3 \\ \eta_1 + \eta_2 + \eta_3 \end{pmatrix} \quad (105)$$

Finalmente,

$$x_1(t) = \eta_1(t) - \eta_2(t) + \eta_3(t) \quad (106)$$

$$x_2(t) = \eta_1(t) - \frac{2m}{M}\eta_3(t) \quad (107)$$

$$x_3(t) = \eta_1(t) + \eta_2(t) + \eta_3(t) \quad (108)$$