

Trabajo Práctico Nº2:

Modos normales de vibración en una molécula unidimensional

- Trabajo Individual.
- Entrega a través de Google classroom: Miércoles 10 de abril de 2019.
- Devolución: Lunes 15 de abril de 2019.

Introducción: Las moléculas tienen tres tipos de movimientos: (i) traslación rígida, (ii) rotación y (iii) vibración. Consideremos como ejemplo el estudio de las vibraciones de la molécula triatómica lineal CO_2 . La parte superior de la figura 1 muestra un esquema de la molécula de CO_2 en el estado de equilibrio, mientras que en la parte inferior se muestra una configuración con los núcleos desplazados.

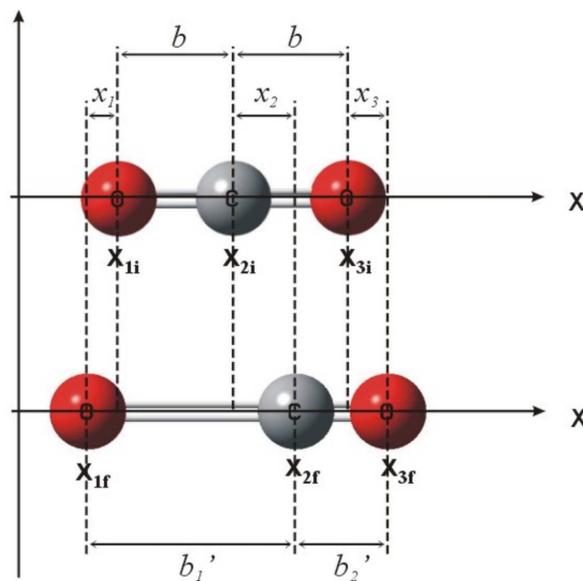


Figure 1: Molécula de dióxido de carbono CO_2 .

Consideremos que los núcleos de Oxígeno tienen masa m , mientras el núcleo de Carbono tiene masa M . Los enlaces correspondientes se simulan mediante resortes de constante k , cuya longitud natural es b . Esta molécula tiene dos grados de libertad de vibración longitudinales, y dos transversales. Para este trabajo analizaremos sólo los modos de vibración longitudinales.

Ecuaciones: Aplicando las leyes de Newton a un sistema de tres masas (enumerando de izquierda a derecha) m_1 , m_2 y m_3 unidas, entre ellas, por resortes de constantes elásticas (enumerando de izquierda a derecha) k_1 y k_2 , obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones lineales (SEL):

$$\frac{k_1}{m_1}x_1 - \frac{k_1}{m_1}x_2 = -\ddot{x}_1 \quad (1)$$

$$-\frac{k_1}{m_2}x_1 + \left[\frac{k_1}{m_2} + \frac{k_2}{m_2} \right] x_2 - \frac{k_2}{m_2}x_3 = -\ddot{x}_2 \quad (2)$$

$$-\frac{k_2}{m_3}x_2 + \frac{k_2}{m_3}x_3 = -\ddot{x}_3 \quad (3)$$

con x_i el apartamiento de cada núcleo respecto a su posición de equilibrio,

$$x_1 = x_{1f} - x_{1i} \quad (4)$$

$$x_2 = x_{2f} - x_{2i} \quad (5)$$

$$x_3 = x_{3f} - x_{3i} \quad (6)$$

El SEL en forma matricial resulta,

$$A \bar{x} = -\ddot{\bar{x}} \quad (7)$$

donde

$$A = \begin{bmatrix} \frac{k_1}{m_1} & -\frac{k_1}{m_1} & 0 \\ -\frac{k_1}{m_2} & \frac{k_1+k_2}{m_2} & -\frac{k_2}{m_2} \\ 0 & -\frac{k_2}{m_3} & \frac{k_2}{m_3} \end{bmatrix} \quad (8)$$

Para la molécula de dióxido de carbono CO₂ resulta:

$$m_1 = m_3 = m \quad (9)$$

$$m_2 = M \quad (10)$$

$$k_1 = k_2 = k \quad (11)$$

Modos normales: Los autovectores \bar{v}_i permiten visualizar los desplazamiento para ciertas frecuencias características $\sqrt{\lambda_i}$ llamadas *modos normales*, donde λ_i son los autovalores.

Para obtener los modos normales comencemos escribiendo la matriz A como

$$A = SDS^{-1} \quad (12)$$

donde $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ y $S = (\bar{v}_1, \bar{v}_2, \bar{v}_3)$.

Operando sobre el sistema de ecuaciones,

$$\ddot{\bar{x}} + A \bar{x} = 0 \quad (13)$$

$$\ddot{\bar{x}} + SDS^{-1} \bar{x} = 0 \quad (14)$$

$$S^{-1} \ddot{\bar{x}} + DS^{-1} \bar{x} = 0 \quad (15)$$

$$\ddot{\bar{\eta}} + D \bar{\eta} = 0 \quad (16)$$

donde hemos introducido las variables $\eta_j(t)$,

$$\bar{\eta} = S^{-1} \bar{x} \quad (17)$$

Dado que la matriz D es diagonal, uno puede resolver el SEL $\ddot{\bar{\eta}} + D \bar{\eta} = 0$ en forma inmediata,

$$\eta_i(t) = \eta_i(0) \cos(\sqrt{\lambda_i}t) + \frac{\dot{\eta}_i(0)}{\sqrt{\lambda_i}} \text{sen}(\sqrt{\lambda_i}t) \quad (18)$$

Ejercicios:

1. Calcular los autovalores λ_i y autovectores \bar{v}_i de la matriz A para la molécula dióxido de carbono CO_2
2. A partir de la relación (17), calcular los desplazamientos $x_i(t)$ para cada átomo en término de η_i y las masas.
3. Interpretar físicamente el movimiento del sistema de cada uno de los modos normales.