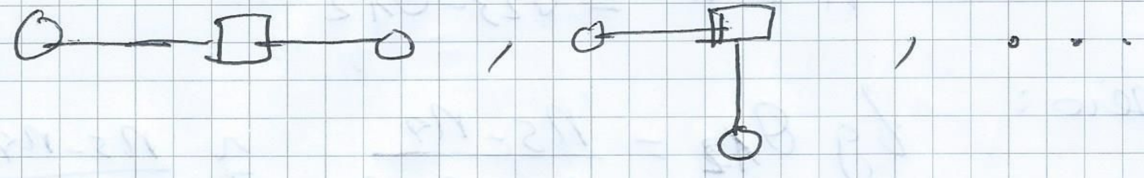
Guía 4: Reg. 05.

P1) El problema original está pensado para ser de 1D (1 dimensión)

En efecto para 2D hay muchos equilibrios por ejemplo



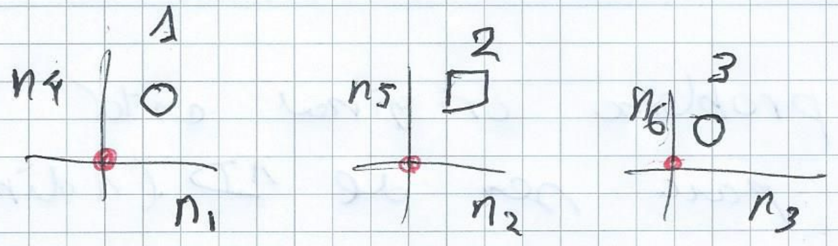
Aún eligiendo el primer equilibrio, la expansión en pequeños apartamientos del equilibrio da orden cuarta en los apartamientos transversales (el cálculo en clase estaba bien).

Por ello modificamos el problema a este:

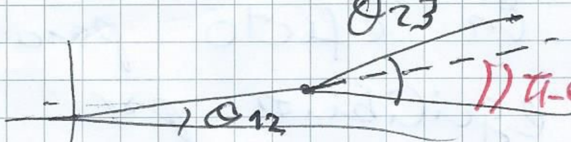
Añadimos un potencial angular que fija el equilibrio de la molécula a una molécula lineal.

$$V' = \frac{k'}{2}(\pi-\alpha)^2$$, mínimo si $\alpha=\pi$

k' lo determinamos luego.



α ángulo 1-2-3:



$\pi - \alpha = \theta_{23} - \theta_{12}$

$$\pi - \alpha = \theta_{23} - \theta_{12}$$

pero:

$$tg\,\theta_{12} = \frac{n_5 - n_4}{l_0 + n_2 - n_1} \simeq \frac{n_5 - n_4}{l_0} \simeq \theta_{12}$$

$$tg\,\theta_{23} = \frac{n_6 - n_5}{l_0 + n_3 - n_2} \simeq n_6 - n_5 \simeq \theta_{23}$$

$$\therefore \quad V' \simeq \frac{k'}{2}\left(\frac{n_6 - 2n_5 + n_4}{l_0}\right)^2$$

Vimos que:

$$V_k = \frac{1}{2}k\left(|\vec{r}_{12}| - l_0\right)^2 + \frac{k}{2}\left(|\vec{r}_{23}| - l_0\right)^2$$

$$V_k \simeq \frac{k}{2}(n_2 - n_1)^2 + \frac{k}{2}(n_3 - n_2)^2$$

redefinimos: $\frac{k'}{l_0^2} = Sk$ $\qquad$ S: factor adimensional.

$$V = \frac{K}{2}\left[n_2^2 + n_1^2 - 2n_2n_1 + n_3^2 + n_2^2 - 2n_3n_2 \right.$$
$$+ 5n_6^2 + 45n_5^2 + 5n_4^2$$
$$\left. + 25n_4n_6 - 45n_5n_6 - 45n_4n_5 \right]$$

$$\mathbb{V} = K\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 1 & & & \\ \hline & & & 5 & -25 & 5 \\ & & & -25 & 45 & -25 \\ & & & 5 & -25 & 5 \end{array}\right)$$

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{n}_1^2 + \dot{n}_4^2) + \frac{M}{2}(\dot{n}_2^2 + \dot{n}_5^2) + \frac{m}{2}(\dot{n}_3^2 + \dot{n}_6^2)$$

$$\mathbb{M} = \left(\begin{array}{ccc|ccc} m & & & & & \\ & M & & & & \\ & & m & & & \\ \hline & & & m & & \\ & & & & M & \\ & & & & & m \end{array}\right)$$

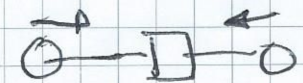
Se separa en dos partes desacopladas.

$$\mathbb{V}\vec{a} = \omega^2 \mathbb{M}\vec{a}$$

Los modos normales son:

i)

$$\bar{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{V}\bar{a}_1 = K \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \omega_1^2 \begin{pmatrix} m \\ 0 \\ m \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$



$$\therefore \quad \boxed{\omega_1^2 = \frac{k}{m}}$$

ii) Traslación:

$$\bar{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{V}\vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \omega_2^2 \, \mathbb{M}\vec{a}_2$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\omega_2 = 0}$$

iii)

$$\bar{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ \beta \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \bar{a}_3^{\,t}\, \mathbb{M}\, \vec{a}_2 = 0$$

ortogonalidad según $\mathbb{M}$

$$m + \beta M + m = 0$$

$$\therefore \quad \beta = -\frac{2m}{M}$$

$$\mathbb{V}\bar{a}_3 = K \begin{pmatrix} 1-\beta \\ -2+2\beta \\ -\beta+1 \end{pmatrix} = \omega_3^2 \begin{pmatrix} m \\ \beta M \\ m \end{pmatrix} \qquad \boxed{\omega_3^2 = \frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)}$$

iv) Modos transversales.

Traslación:

$$\bar{a}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{V}\bar{a}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \omega_4^2 \mathbb{M}\vec{a}_4$$

$$\boxed{\omega_4 = 0}$$

v) Rotación:

$$\bar{a}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{V}\vec{a}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \omega_5^2 \mathbb{M}\vec{a}_5$$

$$\boxed{\omega_5 = 0}$$

vi)

$$\vec{a}_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ B \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \bar{a}_6^{\,t} \mathbb{M}\vec{a}_4 = 0$$

(ortogonalidad según $\mathbb{M}$)

$$m + BM + m = 0$$

$$\boxed{B = -\frac{2m}{M}}$$

del mismo modo:

Se busca despejar ξ_i en función de $\vec{n}$, para ello usaremos que todos los estados son elegidos ortogonales según $\mathbb{M}$:

Multiplicando por $\bar{a}_j^{\,t}\mathbb{M}$:

$$\bar{a}_j^{\,t}\mathbb{M}\vec{n} = \sum_i \underbrace{\bar{a}_j^{\,t}\mathbb{M}\bar{a}_i}_{\mu_i\delta_{ij}}\xi_i$$

Si $\mu_i = 1$ están ortonormalizados según $\mathbb{M}$, pero no es necesario.

$$\therefore \quad \mu_j\xi_j = \bar{a}_j^{\,t}\mathbb{M}\vec{n}$$

$$\xi_j = \frac{1}{\mu_j}\bar{a}_j^{\,t}\mathbb{M}\vec{n}$$

μ_j podemos no tomarlo en cuenta en principio.

1) $$\begin{cases} \xi_1 = \dfrac{1}{\mu_1}(1\ 0\ -1)\begin{pmatrix} mn_1 \\ 0 \\ mn_3 \end{pmatrix} \propto n_1 - n_3 \\ \omega_1^2 = \dfrac{k}{m} \end{cases}$$

ii) $\begin{cases} \xi_2 = \dfrac{1}{\mu_2}(1\ 1\ 1)\begin{pmatrix} m\eta_1 \\ M\eta_2 \\ m\eta_3 \end{pmatrix} \simeq m\eta_1 + M\eta_2 + m\eta_3 \\ \omega_2 = 0 \end{cases}$

proporcional al centro de masas,

iii) $\begin{cases} \xi_3 = \dfrac{1}{\mu_3}\left(1\ -\dfrac{2m}{M}\ 1\right)\begin{pmatrix} m\eta_1 \\ -2m\eta_2 \\ m\eta_3 \end{pmatrix} \simeq \eta_1 + \dfrac{4m}{M}\eta_2 + \eta_3 \\ \omega_3^2 = \dfrac{k}{m}\left(1 + \dfrac{2m}{M}\right) \end{cases}$

Aún sin normalizar las ξ_i satisfacen:

$$\ddot{\xi}_i = -\omega_i^2 \xi_i$$

Si se normalizan $(\mu_i \to 1)$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\dot{\vec{\xi}}^t \dot{\vec{\xi}} - \frac{1}{2}\vec{\xi}^t \Omega \vec{\xi}$$

Con $\Omega = \begin{pmatrix} \omega_1^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \omega_n^2 \end{pmatrix}$

ó $\mathcal{L} = \frac{1}{2}\sum \dot{\xi}_i^2 - \frac{1}{2}\sum \omega_i^2 \xi_i^2$

y: $\vec{\eta} = A\vec{\xi} \qquad \vec{\xi} = A^t M \vec{\eta}$

Con $A = \begin{pmatrix} \vec{a}_1 & \vec{a}_2 & \vec{a}_n \\ | & | & \end{pmatrix}$ matriz de modos normales