

Ejercicio 1 Guía 4

Autor: Vladimir D. Rodríguez Chariarse

1. Breve introducción teórica

El concepto de pequeñas oscilaciones en sistemas con muchos grados de libertad ha sido visto con amplitud en Física 2 (oscilaciones y ondas). Ahora se lo verá desde el punto de vista del formalismo Lagrangiano.

El punto de partida es la existencia de un sistema de n grados de libertad con posiciones de equilibrio estable. Nos enfocamos en el caso conservativo donde:

$$\mathcal{L} = T - V \quad (1)$$

con

$$T = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j t_{ij}(q_k) \dot{q}_i \dot{q}_j, \quad V = V(q_k) \quad (2)$$

El equilibrio exige:

$$\left. \frac{\partial V}{\partial q_k} \right|_{\{q_{k0}\}} = 0, \quad k = 1..n \quad (3)$$

cuya solución es $\{q_{k0}\}$.

El concepto de pequeñas oscilaciones requiere que el sistema se mantenga estable ante pequeños apartamientos de la posición de equilibrio. Pasemos a nuevas coordenadas, medidas a partir del equilibrio,

$$\eta_k = q_k - q_{k0}, \quad \dot{\eta}_k = \dot{q}_k \quad (4)$$

y hagamos una expansión de T y V a segundo orden en valores chicos de η y $\dot{\eta}$. Se obtiene a menos de la constante $V(\{q_{k0}\})$ el llamado Lagrangiano de pequeñas oscilaciones:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j - \frac{1}{2} \sum_i \sum_j V_{ij} \eta_i \eta_j \quad (5)$$

donde los elementos $\{i, j\}$ de la matriz de masas \mathbf{T} y de la matriz de potencial \mathbf{V}

$$T_{ij} = t_{ij}(\{q_{k0}\}), \quad V_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} V|_{q_{k0}} \quad (6)$$

En forma matricial tenemos:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{\eta}}^t \mathbf{T} \dot{\boldsymbol{\eta}} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^t \mathbf{V} \boldsymbol{\eta} \quad (7)$$

donde $\boldsymbol{\eta}$ es el vector columna de desplazamientos del equilibrio.

Las ecuaciones de movimiento se pueden escribir en forma matricial:

$$\mathbf{T} \ddot{\boldsymbol{\eta}} = -\mathbf{V} \boldsymbol{\eta} \quad (8)$$

ecuación que recuerda la de un resorte cambiando la masa m por \mathbf{T} y la constante k por \mathbf{V} . Se pueden buscar soluciones que representan oscilaciones del sistema con una dada frecuencia ω (usamos la representación compleja, al final siempre se toma la **parte real**)

$$\boldsymbol{\eta}(t) = \mathbf{a} \exp(-i\omega t) \quad (9)$$

es decir que todas las coordenadas oscilan con la misma frecuencia y fase, con una relación relativa de amplitudes dadas por \mathbf{a} . Usando las ecuaciones de movimiento obtenemos :

$$\omega^2 \mathbf{T} \mathbf{a} = \mathbf{V} \mathbf{a}$$

o en forma de sistema de ecuaciones homogéneo para \mathbf{a}

$$(\mathbf{V} - \omega^2 \mathbf{T}) \mathbf{a} = 0 \quad (10)$$

donde en ambas ecuaciones se canceló el factor común $\exp(-i\omega t)$. Para que esta última ecuación tenga solución no trivial se necesita que:

$$\det(\mathbf{V} - \omega^2 \mathbf{T}) = 0 \quad (11)$$

las n raíces de esta ecuación determinan los autovalores $\{\omega_k^2\}$. Los correspondientes \mathbf{a}_k se obtienen de la ecuación de autovectores (10). La solución general será combinación de soluciones multiplicadas por amplitudes C_k (con su módulo y fase representan $2n$ constantes a determinar de las condiciones iniciales):

$$\boldsymbol{\eta}(t) = \mathcal{R} \left(\sum_{k=1}^n C_k \mathbf{a}_k \exp(i\omega_k t) \right) \quad (12)$$

podemos ver que si las condiciones iniciales son tales que $C_k = \delta_{k,l}$, sólo el modo l estará presente en el movimiento. A esto se llama excitar un modo normal: el sistema oscila con una misma frecuencia. A los autovectores \mathbf{a}_k se los denomina modos normales de oscilación y a las ω_k frecuencias propias del sistema.

La estabilidad del sistema requiere que \mathbf{V} sea simétrico (que lo es) y definido positivo (igual que \mathbf{T}).

No todas los modos normales corresponden a oscilaciones, hay modos de frecuencia nula que son traslaciones o rotaciones del sistema como un todo (en este caso cambiaremos $\exp(i\omega t)$ por la correcta solución de (8), esto es un movimiento lineal en el tiempo). Un sistema 3D de N partículas sin vínculos posee 3 grados de libertad de traslación y tres de rotación, quedando $3N-6$ modos normales de oscilación. Si el equilibrio del sistema es colineal sobre un dado eje, no existe la rotación alrededor de dicho eje y el sistema posee $3N-5$ modos normales de oscilación.

Hay un teorema no ampliamente usado en Mecánica Clásica (muy usado en Cuántica, Sólidos, etc.) que utiliza las simetrías del Lagrangiano (sistema) para encontrar los modos normales. En particular la invariancia del Lagrangiano ante transformaciones de las coordenadas que representan reflexión en un plano de simetría implica que siempre se puede seleccionar autovectores que sean simétricos o antisimétricos ante reflexión en ese plano de simetría.

2. Problema 1, caso 1D

Nos hablan de la molécula de CO_2 , veremos la versión simplificada (1D). Para adelante dejamos la versión un poco mas 'realista' 2D (3D), a la cual se le agrega una interacción que restaura la alineación de la molécula cuando esta se dobla al medio (como por ejemplo en el **problema 3**).

En el caso 1D a tratar, las coordenadas de cada masa son x_k , con $k = 1, 2, 3$. La energía cinética es:

$$T = \frac{m}{2}\dot{x}_1^2 + \frac{M}{2}\dot{x}_2^2 + \frac{m}{2}\dot{x}_3^2$$

y el potencial:

$$V = \frac{k}{2}(x_2 - x_1 - l_0)^2 + \frac{k}{2}(x_3 - x_2 - l_0)^2$$

derivando con respecto a x_i e igualando a cero se obtienen sólo dos ecuaciones independientes

$$x_2 - x_1 = l_0, \quad x_3 - x_2 = l_0$$

estas ecuaciones de equilibrio se podría haber escrito con sólo observar el sistema. Claramente $V = 0$ en el equilibrio y es equilibrio estable pues V es mínimo. La solución es:

$$x_{10} = x_0, \quad x_{20} = x_0 + l_0, \quad x_{30} = x_0 + 2l_0$$

con x_0 un valor arbitrario. Usando $x_i = \eta_i + x_{i0}$ se obtiene:

$$T = \frac{1}{2} (m\dot{\eta}_1^2 + M\dot{\eta}_2^2 + m\dot{\eta}_3^2)$$

$$V = \frac{k}{2}(\eta_2 - \eta_1)^2 + \frac{k}{2}(\eta_3 - \eta_2)^2 = \frac{k}{2} (\eta_1^2 c - 2\eta_1\eta_2 + 2\eta_2^2 - 2\eta_2\eta_3 + \eta_3^2)$$

de donde identificamos las matrices de masa y de potencial:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & m \\ 0 & 0 & M \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} k & -k & 0 \\ -k & 2k & -k \\ 0 & -k & k \end{pmatrix}$$

2.1. Modos normales de vibración, procedimiento estándar

Queremos resolver la ecuación $(\mathbf{V} - \omega^2\mathbf{T})\mathbf{a} = 0$:

$$\mathbf{V} - \omega^2\mathbf{T} = \begin{pmatrix} k - m\omega^2 & -k & 0 \\ -k & 2k - M\omega^2 & -k \\ 0 & -k & k - m\omega^2 \end{pmatrix}$$

pidiendo que se anule el determinante del sistema:

$$\begin{vmatrix} k - m\omega^2 & -k & 0 \\ -k & 2k - M\omega^2 & -k \\ 0 & -k & k - m\omega^2 \end{vmatrix} = \omega^2(k - m\omega^2)[mM\omega^2 - (2km + kM)] = 0$$

se obtienen las frecuencias propias:

$$\omega_1^2 = 0, \quad \omega_2^2 = \frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right), \quad \omega_3^2 = \frac{k}{m}$$

2.1.1. Modo de traslación $\omega_1 = 0$

Es claro que el modo de traslación es

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

pues

$$\mathbf{V}\mathbf{a}_1 = 0.$$

Este modo representa el movimiento del sistema como un todo.

2.1.2. Modo antisimétrico $\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right)}$

Busquemos un modo de la forma:

$$\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

usando ortogonalidad de autovectores de distintas frecuencias según la métrica de \mathbf{T}

$$\mathbf{a}_1^t \mathbf{T} \mathbf{a}_2 = m + \alpha M + \beta m = 0 \quad \Rightarrow \quad \beta = -1 - \frac{\alpha M}{m}$$

Usamos ahora la ecuación de autovectores:

$$\mathbf{V}\mathbf{a}_2 = k \begin{pmatrix} 1 - \alpha \\ \alpha\left(2 + \frac{M}{m}\right) \\ -\alpha + 1 + \frac{\alpha M}{m} \end{pmatrix} = \frac{k}{m}\left(1 + \frac{2m}{M}\right) \begin{pmatrix} m \\ M\alpha \\ m\left(-1 - \frac{\alpha M}{m}\right) \end{pmatrix}$$

igualando las primeras componentes hallamos $\alpha = -\frac{2m}{M}$, de donde se obtiene que: $\beta = 1$ ¹), quedando:

$$\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{2m}{M} \\ 1 \end{pmatrix}$$

¹Pueden probar que las otras dos igualdades se satisfacen

2.1.3. Modo simétrico $\omega_3 = \sqrt{\frac{k}{m}}$

Es intuitivo que este modo que sólo hace intervenir a la masa m es el modo simétrico, en el cual las fuerzas sobre la masa M se cancelan, y por consiguiente no se mueve:

$$\mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

se deja como ejercicio probar esto usando la ecuación de autovectores.

2.2. Cálculo usando simetrías

Otra forma de trabajar este problema hubiera sido:
Proponer el modo de traslación (antisimétrico, pues cambia de signo ante reflexión en el plano de simetría) \mathbf{a}_1 ,

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

calcular su frecuencia usando la ecuación de autovectores ($\omega_1 = 0$).

Proponer un modo \mathbf{a}_2 antisimétrico, ortogonal a \mathbf{a}_1

$$\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{2m}{M} \\ 1 \end{pmatrix}$$

calcular su frecuencia usando la ecuación de autovectores ($\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}(1 + \frac{2m}{M})}$).

Proponer un modo \mathbf{a}_3 simétrico,

$$\mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

calcular su frecuencia usando la ecuación de autovectores ($\omega_3 = \sqrt{\frac{k}{m}}$). Dejamos como ejercicio verificar esto .

2.3. Coordenadas normales

Las coordenadas normales son nuevas coordenadas generalizadas que desacoplan el sistema, a un conjunto de osciladores independientes, cuyas frecuencias son los ω_k del sistema. Como tales son combinación de los η_j . Usando la propiedad de ortogonalidad según la matriz de masas:

$$\mathbf{a}_i^t \mathbf{T} \mathbf{a}_j = \alpha_i \delta_{i,j}$$

y usando la ecuación de autovectores:

$$\mathbf{a}_i^t \mathbf{V} \mathbf{a}_j = \omega_i^2 \alpha_i \delta_{i,j}$$

se concluye que las nuevas coordenadas:

$$\xi_i = \mathbf{a}_i^t \mathbf{T} \boldsymbol{\eta}$$

desacoplan las ecuaciones de movimiento, para ello apliquemos \mathbf{a}_i^t sobre (8):

$$\mathbf{a}_i^t \mathbf{T} \ddot{\boldsymbol{\eta}} = -\mathbf{a}_i^t \mathbf{V} \boldsymbol{\eta} \Rightarrow \ddot{\xi}_i = \omega_i^2 \xi_i \quad (13)$$

notar que la ecuación de movimiento para cada ξ_i es independiente y corresponde a un oscilador de frecuencia ω_i . No es necesario el proceso de normalización para hallar las coordenadas normales (a menos de una constante α_i). En este caso obtenemos:

$$\xi_1 = m\eta_1 + M\eta_2 + m\eta_3$$

$$\xi_2 = m(\eta_1 - 2\eta_2 + \eta_3)$$

$$\xi_3 = m(\eta_1 - \eta_3)$$

Finalmente en forma matricial:

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{A}^t \mathbf{T} \boldsymbol{\eta}$$

siendo \mathbf{A} la matriz modal, esto es la que contiene los autovectores como columnas. A veces se normalizan los autovectores tal que

$$\mathbf{A}^t \mathbf{T} \mathbf{A} = \mathbf{I}$$

donde \mathbf{I} es la matriz identidad. En este caso el Lagrangiano del sistema se escribe:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_i \left(\dot{\xi}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_i \omega_i^2 \xi_i^2 \right) \text{right}$$