Problema 22, vibración de moléculas.

Resuelve el primer inciso y al menos dos incisos de los restantes.

1. El potencial de interacción entre dos átomos se ha observado experimentalmente que varia con la distancia r entre los átomos de la siguiente manera:

$$U(r) = U_0 \left[\left(\frac{R_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_0}{r} \right)^6 \right] \tag{1}$$

A este potencial de interacción se le conoce como potencial de Lennard-Jones y se dice que representa una interacción tipo van der Waals. Cuando la distancia de separación es $r=R_0$ el potencial de interacción toma su valor mínimo U_0 . Bajo estas condiciones la molécula esta en equilibrio mecánico ya que la fuerza de interacción es cero $F=-\frac{dU}{dr}$.

- a) Obtén la expresión la expresión de la fuerza correspondiente al potencial (1)
- b) Verifica explícitamente que el valor mínimo del potencial (1) es U_0 cuando $r = R_0$.
- c) Esboza la gráfica del potencial de interacción U(r) como función de la distancia de separación r.
- d) Demuestre que cuando el desplazamiento x, con respecto a la posición de equilibrio $(r=R_0)$, es pequeña, la energía potencial es aproximadamente $U\approx\frac{1}{2}kx^2-U_0$, a partir de esta expresión determina el valor de k.

Sugerencia: sea $r = R_0 + x$ y $u = x/R_0$. Emplea la aproximación de $(1 + u)^n$ hasta los tres primeros términos.

Solución: $k = \frac{72U_0}{R_0^2}$

- e) Dos átomos de argón pueden formar una molécula débilmente unida Ar₂ debido a una interacción de Van der Waals con $U_0=1.68\times 10^{-21}\,\mathrm{J}$ y $R_0=3.82\times 10^{-10}\,\mathrm{m}$. Calcule la constante de fuerza k y la frecuencia de oscilaciones pequeñas de un átomo alrededor de su posición de equilibrio.
- 2. Dos átomos idénticos de una molécula diatómica vibran como osciladores armónicos; no obstante, su centro de masa que está justo a la mitad de separación entre los centros de los átomos, no se mueve.
 - a) Demuestra que, en cualquier instante, los momentos lineales de los átomos con respecto al centro de masa son ${\bf p}$ y $-{\bf p}$
 - b) Demuestra que la energía cinética total K de los dos átomos se puede escribir como la de un solo objeto de masa m/2 con momento lineal de magnitud p. Usando este resultado, ¿cual es la corrección en la frecuencia de oscilación de la molécula de argón del último inciso del problema anterior?
 - c) En el caso de que los átomos no sean idénticos y tienen masas m_1 y m_2 , demuestra que se sigue cumpliendo el resultado del inciso (a) y lo mismo para el inciso (b) pero con un objeto de masa $m_1m_2/(m_1+m_2)$, esta cantidad se denomina masa reducida del sistema.
- 3. Cuando los átomos de una molécula de H_2 se desplazan del equilibrio, una fuerza de restitución actúa entre los átomos: F = -kx con k = 580 N/m. Calcula la frecuencia de oscilación de la molécula de H_2 .

1

4. Muchas moléculas diatómicas (compuestas por dos átomos) están unidas por enlaces covalentes que son mucho más fuertes que la interacción de Van der Waals, por ejemplo H₂, O₂ y N₂. De acuerdo a las observaciones experimentales, la interacción de tales moléculas se puede describir mediante una fuerza de la forma:

$$F = A \left[e^{-2b(r-r_0)} - e^{-b(r-r_0)} \right]$$
 (2)

donde A y b son constantes positivas, r es la distancia de separación de los centros de las moléculas y R_0 es la separación de equilibrio. Para la molécula de H_2 los valores de las constantes son: $A = 2.97 \times 10^{-8} \, \text{N}$, $b = 1.95 \times 10^{10} \, \text{m}^{-1}$ y $R_0 = 7.4 \times 10^{-11} \, \text{m}$.

Considerando pequeños movimientos alrededor del punto de separación de equilibrio. Calcula la frecuencia de oscilación de la molécula de H₂ y compara el resultado con el inciso anterior.

Problema 23, campo eléctrico

En general es complicado calcular el campo eléctrico de una distribución de carga arbitraria¹ -a veces conviene emplear la ley de Gauss, que revisaremos más adelante-. Pero hay ciertos ejemplos básicos y sencillos de calcular.

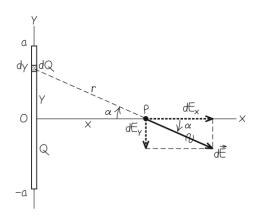
Ejemplo: campo eléctrico de una linea recta (una varilla con carga Q de longitud 2a). La geometría del problema se especifica en la siguiente figura.

densidad lineal de carga :
$$\lambda = \frac{dQ}{dy}$$
 \Rightarrow $dQ = \lambda dy$

$$\sin \alpha = \frac{y}{r}, \qquad \cos \alpha = \frac{x}{r}, \qquad r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

diferencial del campo producido por la diferencial de carga $dQ = \lambda dy$:

$$dE = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{dQ}{r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\lambda \, dy}{(x^2 + y^2)}$$



Integrado sobre toda la longitud de la varilla se obtiene el campo eléctrico en cada una de las componentes:

$$E_x = \int dE \cos \alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-a}^{a} \frac{\lambda \, dy}{(x^2 + y^2)} \cos \alpha \qquad \qquad E_y = -\int dE \sin \alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-a}^{a} \frac{\lambda \, dy}{(x^2 + y^2)} \sin \alpha \tag{4}$$

Se aprovecha la simetría de la configuración de carga, en este caso si se calcula el campo sobre el eje de simetría de la varilla, las componentes verticales (paralelas al eje y) se anulan. La componente x del campo resultante esta dada por:

$$E_x = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-a}^{a} \frac{\lambda \, dy}{(x^2 + y^2)} \cos \alpha = \frac{\lambda}{4\pi\epsilon_0} \int_{-a}^{a} \frac{x \, dy}{(x^2 + y^2)^{3/2}} = \frac{\lambda}{4\pi\epsilon_0} \frac{2a}{x\sqrt{x^2 + a^2}} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{x\sqrt{x^2 + a^2}}$$
(5)

Límites:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{dQ}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} (\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
 (3)

donde ${\bf r}-{\bf r}'$ es la distancia entre la fuente de carga en la posición ${\bf r}'$ hasta el punto donde se calcula el campo ${\bf r},\ dQ$ es la diferencial de carga de las fuente y $1/4\pi\epsilon_0=9.00\times 10^9\,{\rm m/F}$ es una constante del sistema MKS.

¹El campo eléctrico de una distribución de carga arbitraria se puede calcular con la siguiente expresión:

- Cuando el punto P esta muy lejano $(a \ll x) \Rightarrow E_x = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{x^2}$, el campo eléctrico es como el de una carga puntual.
- En el límite cuando la varilla es muy larga $(a \to \infty)$ el campo se reduce a la expresión: $E_x = \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{\lambda}{x}$ (verifícalo)

Resuelve al menos tres de los siguientes incisos:

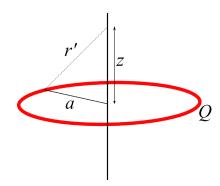
- 1. Calcular la integral $\int_{-a}^{a} \frac{x \, dy}{(x^2 + y^2)^{3/2}}$ y verificar el resultado final de la ecuación (5).
- 2. Dos varillas delgadas de longitud L están a lo largo del eje x, entre x=a/2 y x=a/2+L y la otra entre x=-a/2 y x=-a/2-L

Cada varilla tiene carga positiva Q distribuida uniformemente en toda su longitud.

- a) Calcula el campo eléctrico producido por la segunda varilla en puntos a lo largo del eje x positivo
- b) Demuestre que la magnitud de la fuerza que ejerce una varilla sobre la otra es

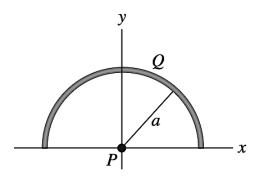
$$F = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 L^2} \ln \left[\frac{(a+L)^2}{a(a+2L)} \right]$$
 (6)

- c) Demuestra que cuando $a\gg L$, la fuerza se reduce a $F=Q^2/4\pi\epsilon_0a^2$. Interpreta este resultado. Sugerencia, usa la expansión $\ln{(1+z)}=z-\frac{z^2}{2}+\frac{z^3}{3}-\ldots$ válida para $|z|\ll 1$ ()
- 3. Para un anillo de radio a y carga total Q, calcular el campo eléctrico sobre el eje del anillo. Suponer que la carga esta distribuida de manera uniforme en el anillo. Verifica que cuando la distancia z es muy grande, en comparación con el radio del anillo, el campo eléctrico del anillo se reduce al de una carga puntal: $E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{z^2}$



4. Una carga positiva Q está distribuida de manera uniforme alrededor de un semicírculo de radio a. Encuentre el campo eléctrico (magnitud y dirección) en el centro de curvatura P.

3

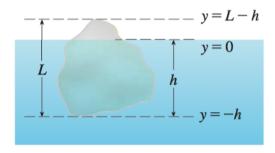


5. Un disco de radio R tiene una carga total Q distribuida uniformemente. El disco se está colocado en el plano x-y, con su centro en el origen de coordenadas. Encuentra el campo eléctrico en un punto z a los largo del eje del disco.

Problema 24, varios.

Resuelve al menos dos de los siguientes incisos:

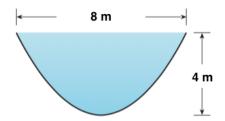
1. Un objeto de densidad ρ_0 , que flota parcialmente sumergido en un líquido de densidad ρ_f la fuerza de flotación es $F = \rho_f g \int_{-h}^0 A(y) \, dy$ donde g es la aceleración debido a la gravedad y A(y) es el área de una sección transversal representativa del objeto. Si el peso del objeto es $W = \rho_0 g \int_{-h}^{L-h} A(y) \, dy$



a) Demuestra que el porcentaje del volumen del objeto por arriba de la superficie del líquido esta dado por:

$$100\frac{\rho_f - \rho_0}{\rho_f} \tag{7}$$

- b) ?Qué porcentaje del volumen del un iceberg sobresale del agua?, considera que la densidad del hielo es aproximadamente $\rho_h = 917 \, \text{kg/m}^3$ y la densidad del agua de mar es $1030 \, \text{kg/m}^3$.
- c) Un cubo de hielo flota en un vaso lleno hasta el borde con agua. ¿Se derramará el agua cuando se funda el cubo de hielo?
- d) Una esfera de radio 0.4 m y de peso insignificante flota en un lago enorme de agua dulce. ¿Qué tanto trabajo se requiere para sumergir del todo a la esfera? La densidad del agua es de $10^3 \, {\rm kg/m^3}$.
- 2. Un canal se llena con agua y sus extremos verticales tienen la forma de la región parabólica en la figura. Encuentre la fuerza hidrostática en un extremo del canal.



3. El átomo de hidrógeno se compone de un protón en el núcleo y un electrón, que se mueve respecto al núcleo. En la teoría cuántica de la estructura atómica, se supone que el electrón no se mueve en una órbita bien definida. En cambio, ocupa un estado conocido como orbital, que se puede considerar como una "nube" de carga negativa en torno al núcleo. En el estado de menor energía, llamado estado basal, u orbital 1s, la forma de esta nube se supone como una esfera centrada en el núcleo. Esta esfera se describe en términos de la función de densidad de probabilidad:

$$p(r) = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0},\tag{8}$$

donde $a_0 = 5.59 \times 10^{-11}$ m es el radio de Bohr. La siguiente integral da la probabilidad de que el electrón se encuentre dentro de la esfera de radio r centrada en el núcleo.

$$P(r) = \int_{0}^{r} \frac{4}{a_0^3} s^2 e^{-2s/a_0} ds \tag{9}$$

- a) Grafica la función de densidad.
- b) Encuentre la probabilidad de que el electrón esté dentro de la esfera de radio $4a_0$ centrada en el núcleo.
- c) Calcule la distancia media del electrón desde el núcleo en
- 4. Se prende un cohete en posición recta, quemando combustible con una proporción constante de b kilogramos por segundo. Sea v = v(t) la velocidad del cohete en el instante t y suponga que la velocidad u del gas de salida es constante. Sea M = M(t) la masa del cohete en el instante t, M disminuye cuando se quema el combustible.
 - a) Escribe la segunda ley de Newton para el cohete, considera que su masa varia. Sea M_1 la masa del cohete sin combustible, M_2 la masa inicial del combustible y $M_0 = M_1 + M_2$. Por lo tanto, hasta que se agota el combustible en el tiempo $t = M_2 b$, la masa es $M = M_0 - bt$.
 - b) Determina la expresión de la velocidad del cohete como función del tiempo.
 - c) Determina la velocidad del cohete en el tiempo $t = M_2/b$, ¿cuál es el significado de esta velocidad?
 - d) Determina la altura del cohete: y = y(t), y el tiempo en que el combustible se agota.

Problema 25, Serie de Taylor.

Resuelve el inciso 6 y al menos tres de los incisos restantes.

1. Calcula los 3 primeros términos de la serie de Taylor alrededor del origen (x = 0) de la función seno y coseno,

Importante: la serie de Taylor para las funciones trigonométricas (seno, coseno, tangente, etc) son validas en unidades de radianes, No en grados. Verifica que cuando $x \ll 1$ entonces se pueden aproximar las funciones seno y coseno por:

$$\sin x \approx x \\
\cos x \approx 1$$
(10)

- 2. Calcula el valor de $\sin (0.2)$ y $\cos (0.2)$ a diferentes ordenes de aproximación usando uno, dos y tres términos (No uses calculadora para hacer las fracciones)
- 3. Calcula los 3 primeros términos de la serie de Taylor alrededor del origen (x=0) de la función $(1+x)^n$, verifica que a primer orden $(1+x)^n \approx 1 + nx$
- 4. Calcula la serie de Taylor alrededor del origen $x_0 = 0$ de la función exponencial $f(x) = e^x$ y la función $g(x) = \ln(1+x)$
- 5. Para la integral: $\int \sin x^2 dx$ no es posible determinar su expresión en términos de funciones elementales, es decir, la función: $\sin x^2$ no posee antiderivada. Aproxima la integral $\int_0^1 \sin x^2 dx$ hasta tres decimales.
- 6. El periodo de un péndulo de longitud L que subtiende un ángulo máximo θ_0 con la vertical esta dada por:

$$T = 4\sqrt{\frac{L}{g}} \int_{0}^{\pi/2} \frac{dx}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 x}}$$
 (11)

donde $k = \sin(\theta_0/2)$ y $g = 9.8 \,\text{m/s}^2$.

a) Primero demuestra la siguiente relación entre integrales de potencias de la función seno (usa integración por partes):

$$\int \sin^n x \, dx = -\frac{1}{n} \cos x \, \sin^{n-1} x + \frac{n-1}{n} \int \sin^{n-2} x \, dx \tag{12}$$

b) Ahora demuestra que el periodo del péndulo se puede escribir como:

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{L}{g}} \left[1 + \frac{1}{2^2} k^2 + \frac{1}{2^2} \frac{3^2}{4^2} k^4 + \frac{1}{2^2} \frac{3^2}{4^2} \frac{5^2}{6^2} k^6 + \dots \right]$$
 (13)

c) Estima el periodo de un péndulo con valores $L=1\,\mathrm{m}$ y $\theta_0=10^\circ$, compara con la aproximación $T\approx 2\pi\sqrt{L/g}$, haz lo mismo para $\theta_0=42^\circ$.

Serie de Taylor

La serie de Taylor de una función f(x) alrededor de un valor x_0 , se define a través de la siguiente expresión:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x)|_{x_0} (x - x_0) + \frac{f''(x)}{2!} \Big|_{x_0} (x - x_0)^2 + \frac{f^{(3)}(x)}{3!} \Big|_{x_0} (x - x_0)^3 + \dots$$
 (14)

El símbolo de factorial: "!" en el denominador de cada termino indica la operación matemática factorial y corresponde al producto de todos los enteros anteriores al numero indicado incluyendo el mismo número, con algunos ejemplos queda claro:

 $2! = 1 \cdot 2 = 2$

 $3! = 1 \cdot 2 \cdot 3 = 6$

 $4! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 = 24$

ahora intenten calcular: 10! =?

La importancia de la serie de Taylor radica en que podemos aproximar una función f(x) como suma de potencias de la variable x y en la practica se usan solo algunos de los terminos de la serie de Taylor para hacer aproximaciones.

La serie de Taylor (14) se puede usar para aproximar un valor x cercano a x_0 . Los factores que multiplica a cada una de las potencias $(x - x_0)^n$ son constantes que se calculan derivando la función tantas veces como se indica $(f^{(n)})$ es la n ésima derivada) y después se evaluando en el punto x_0 . En el caso en que $x_0 = 0$ la serie (14) toma una forma más simple:

$$f(x) = f(0) + f'(x)|_{0} x + \frac{f''(x)}{2!}|_{0} x^{2} + \frac{f^{(3)}(x)}{3!}|_{0} x^{3} + \dots$$
 (15)

Ejemplo, la función:

$$f(x) = \frac{1}{1-x} = (1-x)^{-1} \tag{16}$$

Queremos el valor de la función cerca de $x_0 = 0$, supongamos en x = 0.1, es decir queremos calcular f(0.1), una manera es hacer la fracción directamente:

$$\frac{1}{1-0.1} = \frac{1}{1-1/10} = \frac{10}{10-1} = \frac{10}{9} = 1.11111\dots$$
 (17)

haciendo la división 10/9 se obtiene: 1.1111...

Ahora calculemos el valor f(0.1) usando la serie de Taylor. Como el valor 0.1 es cercano al origen usamos la expresión (15), para ello se calcula cada una de los factores de la serie derivando y después evaluamos en cero:

$$f(x) = (1-x)^{-1} f(0) = (1-0)^{-1} = 1$$

$$f'(x) = (-1)(-1)(1-x)^{-2} f'(0) = (-1)^{2}(1-0)^{-2} = 1$$

$$f''(x) = (-2)(-1)(-1)^{2}(1-x)^{-3} f''(0) = (-2)(-1)^{3}(1-0)^{-3} = 2 = 2!$$

$$f'''(x) = (-3)(-2)(-1)(-1)^{3}(1-x)^{-3} f''(0) = 2 \cdot 3(-1)^{2}(-1)^{4}(1-0)^{-3} = 3 \cdot 2 = 3!$$

$$\vdots f^{n}(x) = n!(1-x)^{-n} f^{n}(0) = n!(1-0)^{-n} = n!$$

$$(18)$$

sustituyendo cada uno de estos términos se obtiene la serie de Taylor (15) de la función (16):

$$f(x) = \frac{1}{1-x} = f(0) + f'(x)|_{0} x + \frac{f''(x)}{2!}|_{0} x^{2} + \frac{f^{(3)}(x)}{3!}|_{0} x^{3} + \dots$$

$$= \frac{1}{1-0} + 1 \cdot x + \frac{2!}{2!}x^{2} + \frac{3!}{3!}x^{3} + \dots$$

$$= 1 + x + x^{2} + x^{3} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} x^{n}$$
(19)

la ultima expresión es importante ya que representa la función f(x) = 1/(1-x) como una suma de potencias x^n , en este caso se trata de una serie geométrica. Al expresar cualquier función como suma de potencias en

la variable x entonces es posible calcular cualquier función en un valor dado, con el grado de aproximación que queramos dependiendo de cuantos términos incluyamos, con solo sumas y productos, es lo que hace una calculadora!

Ahora calculamos el valor f(0.1) usando su serie de Taylor (19) empleando uno, dos y tres términos de la suma:

$$f\left(0.1\right) = \frac{1}{1 - 0.1} \approx 1 \qquad \text{orden cero de aproximación}$$

$$\frac{1}{1 - 0.1} \approx 1 + 0.1 = 1.1 \qquad \text{primer orden de aproximación}$$

$$\frac{1}{1 - 0.1} \approx 1 + 0.1 + (0.1)^2 = 1.11 + 0.01 = 1.11 \qquad \text{segundo orden de aproximación}$$

$$(20)$$

De las series de Taylor más importantes -y que deben saber- son las funciones $\sin(x)$, $\cos(x)$ y el binomio $(1+x)^n$