#### Luis A. Núñez

Escuela de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander, Santander, Colombia



14 de octubre de 2024

#### Agenda



- Marco teórico: Modos normales de oscilación
- Un ejemplo: Modos Normales Oscilación para el CO2
  - Descripción del sistema CO2
  - Energías cinética y potencial
  - Las frecuencias de oscilación  $\omega_k$
  - Modo normal de oscilación para  $\omega_1=0$
- Sección



• Las s ecuaciones de movimiento para un sistema con pequeñas oscilaciones  $\{\eta_1,\ldots,\eta_s\}$  alrededor del equilibrio de  $\{q_{01},\ldots,q_{0s}\}$  son  $\sum_i \left(T_{ij}\ddot{\eta}_j + V_{ij}\eta_j\right) = 0, \quad i=1,2,\ldots,s$ 



- Las s ecuaciones de movimiento para un sistema con pequeñas oscilaciones  $\{\eta_1,\ldots,\eta_s\}$  alrededor del equilibrio de  $\{q_{01},\ldots,q_{0s}\}$  son  $\sum_j (T_{ij}\ddot{\eta}_j + V_{ij}\eta_j) = 0, \quad i=1,2,\ldots,s$
- Si suponemos una solución de la forma  $\eta_j(t) = a_j e^{i\omega t}$  tendremos  $\sum_j \left(V_{ij} \omega^2 T_{ij}\right) a_j = 0 \quad i = 1, 2, \dots, s$



- Las s ecuaciones de movimiento para un sistema con pequeñas oscilaciones  $\{\eta_1,\ldots,\eta_s\}$  alrededor del equilibrio de  $\{q_{01},\ldots,q_{0s}\}$  son  $\sum_j (T_{ij}\ddot{\eta}_j + V_{ij}\eta_j) = 0, \quad i=1,2,\ldots,s$
- Si suponemos una solución de la forma  $\eta_j(t) = a_j e^{i\omega t}$  tendremos  $\sum_i \left(V_{ij} \omega^2 T_{ij}\right) a_j = 0$   $i = 1, 2, \dots, s$
- La condición det  $\left|V_{ij} \omega^2 T_{ij}\right| = 0$  es decir

$$\begin{vmatrix} V_{11} - \omega^2 T_{11} & V_{12} - \omega^2 T_{12} & \dots \\ V_{21} - \omega^2 T_{21} & V_{22} - \omega^2 T_{22} \\ V_{31} - \omega^2 T_{31} & \vdots \end{vmatrix} = 0$$



- Las s ecuaciones de movimiento para un sistema con pequeñas oscilaciones  $\{\eta_1,\ldots,\eta_s\}$  alrededor del equilibrio de  $\{q_{01},\ldots,q_{0s}\}$  son  $\sum_i (T_{ij}\ddot{\eta}_j + V_{ij}\eta_j) = 0, \quad i=1,2,\ldots,s$
- Si suponemos una solución de la forma  $\eta_j(t) = a_j e^{i\omega t}$  tendremos  $\sum_i \left(V_{ij} \omega^2 T_{ij}\right) a_j = 0$   $i = 1, 2, \dots, s$
- La condición det  $\left|V_{ij}-\omega^2T_{ij}\right|=0$  es decir

$$\begin{vmatrix} V_{11} - \omega^2 T_{11} & V_{12} - \omega^2 T_{12} & \dots \\ V_{21} - \omega^2 T_{21} & V_{22} - \omega^2 T_{22} \\ V_{31} - \omega^2 T_{31} & \vdots \end{vmatrix} = 0$$

• Esto permite calcular las s frecuencias de pequeñas oscilaciones  $\omega_k, \quad k=1,2,\ldots,s$  como soluciones al polinomio característico



• Para cada  $\omega_k$ , existe un sistema de s ecuaciones para  $a_j$  ( $\omega_k$ ).

Si 
$$s=2$$
  
 $i=1: (V_{11}-\omega_k^2 T_{11}) \ a_1 + (V_{12}-\omega_k^2 T_{12}) \ a_2 = 0$   
 $i=2: (V_{21}-\omega_k^2 T_{21}) \ a_1 + (V_{22}-\omega_k^2 T_{22}) \ a_1 = 0$   
Para cada  $\omega_k$  tendremos 2 ecuaciones lineales para  $a_1(\omega_k)$  y  $a_2(\omega_k)$ 



• Para cada  $\omega_k$ , existe un sistema de s ecuaciones para  $a_j$  ( $\omega_k$ ).

Si 
$$s=2$$
  
 $i=1: (V_{11}-\omega_k^2 T_{11}) \ a_1 + (V_{12}-\omega_k^2 T_{12}) \ a_2 = 0$   
 $i=2: (V_{21}-\omega_k^2 T_{21}) \ a_1 + (V_{22}-\omega_k^2 T_{22}) \ a_1 = 0$   
Para cada  $\omega_k$  tendremos 2 ecuaciones lineales para  $a_1(\omega_k)$  y  $a_2(\omega_k)$ 



• Para cada  $\omega_k$ , existe un sistema de s ecuaciones para  $a_j(\omega_k)$ .

Si 
$$s=2$$
  $i=1: (V_{11}-\omega_k^2 T_{11}) \ a_1 + (V_{12}-\omega_k^2 T_{12}) \ a_2 = 0$   $i=2: (V_{21}-\omega_k^2 T_{21}) \ a_1 + (V_{22}-\omega_k^2 T_{22}) \ a_1 = 0$  Para cada  $\omega_k$  tendremos 2 ecuaciones lineales para  $a_1(\omega_k)$  y  $a_2(\omega_k)$ 

• La solución general,  $\eta_j(t)$ , será la superposición de las soluciones  $\eta_j(t) = \sum_k c_k a_j(\omega_k) e^{i\omega_k t}$ , donde  $c_k$  son las fases complejas.



• Para cada  $\omega_k$ , existe un sistema de s ecuaciones para  $a_j$  ( $\omega_k$ ).

Si 
$$s=2$$
  $i=1: (V_{11}-\omega_k^2 T_{11}) a_1 + (V_{12}-\omega_k^2 T_{12}) a_2 = 0$   $i=2: (V_{21}-\omega_k^2 T_{21}) a_1 + (V_{22}-\omega_k^2 T_{22}) a_1 = 0$  Para cada  $\omega_k$  tendremos 2 ecuaciones lineales para  $a_1(\omega_k)$  y  $a_2(\omega_k)$ 

- La solución general,  $\eta_j(t)$ , será la superposición de las soluciones  $\eta_j(t) = \sum_k c_k a_j(\omega_k) e^{i\omega_k t}$ , donde  $c_k$  son las fases complejas.
- Si  $\xi_k \equiv c_k e^{i\omega_k t}$ , k = 1, 2, ..., s, tendremos  $\eta_j(t) = \sum_k a_j(\omega_k) \xi_k$  la solución es una combinación lineal de las coordenadas normales



• Para cada  $\omega_k$ , existe un sistema de s ecuaciones para  $a_j$  ( $\omega_k$ ).

Si 
$$s=2$$
  $i=1: (V_{11}-\omega_k^2 T_{11}) a_1 + (V_{12}-\omega_k^2 T_{12}) a_2 = 0$   $i=2: (V_{21}-\omega_k^2 T_{21}) a_1 + (V_{22}-\omega_k^2 T_{22}) a_1 = 0$  Para cada  $\omega_k$  tendremos 2 ecuaciones lineales para  $a_1(\omega_k)$  y  $a_2(\omega_k)$ 

- La solución general,  $\eta_j(t)$ , será la superposición de las soluciones  $\eta_j(t) = \sum_k c_k a_j(\omega_k) e^{i\omega_k t}$ , donde  $c_k$  son las fases complejas.
- Si  $\xi_k \equiv c_k e^{i\omega_k t}$ ,  $k=1,2,\ldots,s$ , tendremos  $\eta_j(t) = \sum_k a_j(\omega_k) \, \xi_k$  la solución es una combinación lineal de las coordenadas normales
- Cada coordenada normal  $\xi_k$  satisface la ecuación  $\ddot{\xi}_k + \omega_k^2 \xi_k = 0$ .



• Para cada  $\omega_k$ , existe un sistema de s ecuaciones para  $a_j$  ( $\omega_k$ ). Si s=2

Si 
$$s=2$$
  $i=1: (V_{11}-\omega_k^2 T_{11}) a_1 + (V_{12}-\omega_k^2 T_{12}) a_2 = 0$   $i=2: (V_{21}-\omega_k^2 T_{21}) a_1 + (V_{22}-\omega_k^2 T_{22}) a_1 = 0$  Para cada  $\omega_k$  tendremos 2 ecuaciones lineales para  $a_1(\omega_k)$  y  $a_2(\omega_k)$ 

- La solución general,  $\eta_j(t)$ , será la superposición de las soluciones  $\eta_j(t) = \sum_k c_k a_j(\omega_k) e^{i\omega_k t}$ , donde  $c_k$  son las fases complejas.
- Si  $\xi_k \equiv c_k e^{i\omega_k t}$ ,  $k=1,2,\ldots,s$ , tendremos  $\eta_j(t) = \sum_k a_j(\omega_k) \, \xi_k$  la solución es una combinación lineal de las coordenadas normales
- Cada coordenada normal  $\xi_k$  satisface la ecuación  $\ddot{\xi}_k + \omega_k^2 \xi_k = 0$ .
- En el caso de s=2, las soluciones generales para los pequeños desplazamientos son

$$\eta_1 = a_1(\omega_1)\xi_1 + a_1(\omega_2)\xi_2, \quad \eta_2 = a_2(\omega_1)\xi_1 + a_2(\omega_2)\xi_2$$



- Para cada  $\omega_k$ , existe un sistema de s ecuaciones para  $a_j$  ( $\omega_k$ ). Si s=2
  - $i = 1 : (V_{11} \omega_k^2 T_{11}) a_1 + (V_{12} \omega_k^2 T_{12}) a_2 = 0$  $i = 2 : (V_{21} - \omega_k^2 T_{21}) a_1 + (V_{22} - \omega_k^2 T_{22}) a_1 = 0$

Para cada  $\omega_k$  tendremos 2 ecuaciones lineales para  $a_1\left(\omega_k\right)$  y  $a_2\left(\omega_k\right)$ 

- La solución general,  $\eta_j(t)$ , será la superposición de las soluciones  $\eta_j(t) = \sum_k c_k a_j(\omega_k) e^{i\omega_k t}$ , donde  $c_k$  son las fases complejas.
- Si  $\xi_k \equiv c_k e^{i\omega_k t}$ , k = 1, 2, ..., s, tendremos  $\eta_j(t) = \sum_k a_j(\omega_k) \xi_k$  la solución es una combinación lineal de las coordenadas normales
- Cada coordenada normal  $\xi_k$  satisface la ecuación  $\ddot{\xi}_k + \omega_k^2 \xi_k = 0$ .
- ullet En el caso de s=2, las soluciones generales para los pequeños desplazamientos son

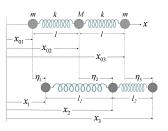
$$\eta_1 = a_1(\omega_1)\xi_1 + a_1(\omega_2)\xi_2, \quad \eta_2 = a_2(\omega_1)\xi_1 + a_2(\omega_2)\xi_2$$

• Para  $\xi_2$  tenemos  $\eta_1 = a_1(\omega_2)\xi_2$ ,  $\eta_2 = a_2(\omega_2)\xi_2$ , 2 pequeños desplazamientos que oscilas con la frecuencia  $\omega_2$  alrededor de su posición de equilibrio con amplitudes  $a_1(\omega_2)$  y  $a_2(\omega_2)$ .

#### Descripción del sistema CO2



• Consideremos el siguiente sistema que representa la molécula de CO2

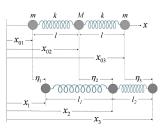


M masa del átomo C; m masa de los átomos O; l la separación entre posiciones de equilibrio; la constante elástica k de interacción C-O;  $l_1$ ,  $l_2$ , las distancias de los átomos fuera del equilibrio.

#### Descripción del sistema CO2



Consideremos el siguiente sistema que representa la molécula de CO2



M masa del átomo C; m masa de los átomos O; l la separación entre posiciones de equilibrio; la constante elástica k de interacción C-O;  $l_1$ ,  $l_2$ , las distancias de los átomos fuera del equilibrio.

• Sean  $x_{01}, x_{02}, x_{03}$  las posiciones de equilibrio de las tres partículas y  $\eta_i = x_i - x_{0i}$ , con i = 1, 2, 3 los desplazamientos del equilibrio.



• La energía cinética es  $T=\frac{1}{2}m\dot{\eta}_1^2+\frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2+\frac{1}{2}m\dot{\eta}_3^2$ 



- La energía cinética es  $T=\frac{1}{2}m\dot{\eta}_1^2+\frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2+\frac{1}{2}m\dot{\eta}_3^2$
- La energía potencial es  $V = \frac{1}{2}k(I_1 I)^2 + \frac{1}{2}k(I_2 I)^2$ .



- La energía cinética es  $T=\frac{1}{2}m\dot{\eta}_1^2+\frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2+\frac{1}{2}m\dot{\eta}_3^2$
- La energía potencial es  $V = \frac{1}{2}k(I_1 I)^2 + \frac{1}{2}k(I_2 I)^2$ .
- Como  $I_1 I = (x_2 x_1) (x_{02} x_{01}) = \eta_2 \eta_1$  y  $I_2 I = (x_3 x_2) (x_{03} x_{02}) = \eta_3 \eta_2$



- La energía cinética es  $T=\frac{1}{2}m\dot{\eta}_1^2+\frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2+\frac{1}{2}m\dot{\eta}_3^2$
- La energía potencial es  $V = \frac{1}{2}k(l_1 l)^2 + \frac{1}{2}k(l_2 l)^2$ .
- Como  $I_1 I = (x_2 x_1) (x_{02} x_{01}) = \eta_2 \eta_1$  y  $I_2 I = (x_3 x_2) (x_{03} x_{02}) = \eta_3 \eta_2$
- Tendremos  $V = \frac{1}{2}k(\eta_2 \eta_1)^2 + \frac{1}{2}k(\eta_3 \eta_2)^2 \Rightarrow V = \frac{1}{2}k(\eta_1^2 + 2\eta_2^2 + \eta_3^2 2\eta_1\eta_2 2\eta_2\eta_3)$
- Entonces, como  $T = \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j$ , y  $V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} \eta_i \eta_j$



- La energía cinética es  $T=\frac{1}{2}m\dot{\eta}_1^2+\frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2+\frac{1}{2}m\dot{\eta}_3^2$
- La energía potencial es  $V = \frac{1}{2}k(l_1 l)^2 + \frac{1}{2}k(l_2 l)^2$ .
- Como  $I_1 I = (x_2 x_1) (x_{02} x_{01}) = \eta_2 \eta_1$  y  $I_2 I = (x_3 x_2) (x_{03} x_{02}) = \eta_3 \eta_2$
- Tendremos  $V = \frac{1}{2}k (\eta_2 \eta_1)^2 + \frac{1}{2}k (\eta_3 \eta_2)^2 \Rightarrow V = \frac{1}{2}k (\eta_1^2 + 2\eta_2^2 + \eta_3^2 2\eta_1\eta_2 2\eta_2\eta_3)$
- Entonces, como  $T = \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j$ , y  $V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} \eta_i \eta_j$

• Tendremos 
$$T_{ij} = \begin{pmatrix} T_{11} = m & T_{12} = 0 & T_{13} = 0 \\ T_{21} = 0 & T_{22} = M & T_{23} = 0 \\ T_{31} = 0 & T_{32} = 0 & T_{33} = m \end{pmatrix}$$



- La energía cinética es  $T=rac{1}{2}m\dot{\eta}_1^2+rac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2+rac{1}{2}m\dot{\eta}_3^2$
- La energía potencial es  $V = \frac{1}{2}k(l_1 l)^2 + \frac{1}{2}k(l_2 l)^2$ .
- Como  $l_1 l = (x_2 x_1) (x_{02} x_{01}) = \eta_2 \eta_1$  y  $l_2 l = (x_3 x_2) (x_{03} x_{02}) = \eta_3 \eta_2$
- Tendremos  $V = \frac{1}{2}k(\eta_2 \eta_1)^2 + \frac{1}{2}k(\eta_3 \eta_2)^2 \Rightarrow V = \frac{1}{2}k(\eta_1^2 + 2\eta_2^2 + \eta_3^2 2\eta_1\eta_2 2\eta_2\eta_3)$
- Entonces, como  $T = \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j$ , y  $V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} \eta_i \eta_j$
- Tendremos  $T_{ij} = \begin{pmatrix} T_{11} = m & T_{12} = 0 & T_{13} = 0 \\ T_{21} = 0 & T_{22} = M & T_{23} = 0 \\ T_{31} = 0 & T_{32} = 0 & T_{33} = m \end{pmatrix}$
- y  $V_{ij} = \begin{pmatrix} V_{11} = k & V_{12} = -k & V_{13} = 0 \\ V_{21} = -k & V_{22} = 2k & V_{23} = -k \\ V_{31} = 0 & V_{32} = -k & V_{33} = k \end{pmatrix}$

## Las frecuencias de oscilación $\omega_k$



• La condición det 
$$\begin{vmatrix} V_{ij} - \omega^2 T_{ij} \end{vmatrix} = 0$$
, implica 
$$\begin{vmatrix} k - \omega^2 m & -k & 0 \\ -k & 2k - \omega^2 M & -k \\ 0 & -k & k - \omega^2 m \end{vmatrix} = 0$$
 para las frecuencias  $\omega_k$ 

## Las frecuencias de oscilación $\omega_k$



• La condición det  $\left|V_{ij}-\omega^2T_{ij}\right|=0$ , implica

$$\begin{vmatrix} k - \omega^2 m & -k & 0 \\ -k & 2k - \omega^2 M & -k \\ 0 & -k & k - \omega^2 m \end{vmatrix} = 0 \text{ para las frecuencias } \omega_k$$

• La ecuación característica cúbica para  $\omega_k$ , es  $\left(k - \omega^2 m\right) \left[\left(2k - \omega^2 M\right) \left(k - \omega^2 m\right) - k^2\right] - k^2 \left(k - \omega^2 m\right) = 0$   $\Rightarrow \quad \omega^2 \left(k - \omega^2 m\right) \left[k(M+2m) - \omega^2 M m\right] = 0$ 

## Las frecuencias de oscilación $\omega_k$



• La condición det  $\left|V_{ij}-\omega^2T_{ij}\right|=0$ , implica

$$\begin{vmatrix} k - \omega^2 m & -k & 0 \\ -k & 2k - \omega^2 M & -k \\ 0 & -k & k - \omega^2 m \end{vmatrix} = 0 \text{ para las frecuencias } \omega_k$$

- La ecuación característica cúbica para  $\omega_k$ , es  $\left(k \omega^2 m\right) \left[\left(2k \omega^2 M\right) \left(k \omega^2 m\right) k^2\right] k^2 \left(k \omega^2 m\right) = 0$   $\Rightarrow \quad \omega^2 \left(k \omega^2 m\right) \left[k(M + 2m) \omega^2 Mm\right] = 0$
- Con soluciones  $\omega_1=0, \quad \omega_2=\sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \omega_3=\sqrt{\frac{k}{m}\left(1+\frac{2m}{M}\right)}$

## Modo normal de oscilación para $\omega_1=0$



• Las amplitudes  $a_i$  surgen de las 3 ecuaciones para cada  $\omega_k$ ,

$$i = 1$$
:  $(k - \omega_k^2 m) a_1 - k a_2 = 0$   
 $i = 2$ :  $-k a_1 + (2k - \omega_k^2 M) a_2 - k a_3 = 0$   
 $i = 3$ :  $-k a_2 + (k - \omega_k^2 m) a_3 = 0$ 

## Modo normal de oscilación para $\omega_1=0$



• Las amplitudes  $a_i$  surgen de las 3 ecuaciones para cada  $\omega_k$ ,

$$i = 1$$
:  $(k - \omega_k^2 m) a_1 - k a_2 = 0$   
 $i = 2$ :  $-k a_1 + (2k - \omega_k^2 M) a_2 - k a_3 = 0$   
 $i = 3$ :  $-k a_2 + (k - \omega_k^2 m) a_3 = 0$ 

• La frecuencia angular  $\omega_1=0$  es una traslación uniforme de la molécula ya que  $\dot{\zeta}_1=0\Rightarrow\dot{\zeta}_1={
m cte}\ \Rightarrow$  reposo o velocidad constante

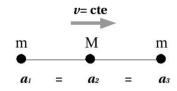
## Modo normal de oscilación para $\omega_1 = 0$



• Las amplitudes  $a_i$  surgen de las 3 ecuaciones para cada  $\omega_k$ ,

$$i = 1$$
:  $(k - \omega_k^2 m) a_1 - k a_2 = 0$   
 $i = 2$ :  $-k a_1 + (2k - \omega_k^2 M) a_2 - k a_3 = 0$   
 $i = 3$ :  $-k a_2 + (k - \omega_k^2 m) a_3 = 0$ 

- La frecuencia angular  $\omega_1=0$  es una traslación uniforme de la molécula ya que  $\ddot{\zeta}_1=0\Rightarrow \dot{\zeta}_1=$  cte  $\Rightarrow$  reposo o velocidad constante
- Entonces para  $\omega_1=0$ , tenemos  $a_1(\omega_1)=a_2(\omega_1)=a_3(\omega_1)$



# Modo normal de oscilación para $\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}$

