

Tema 2

Oscilaciones

Como aplicación de lo que hemos estudiado en el tema anterior vamos a considerar el movimiento de sistemas que se separan poco de la posición de equilibrio. Esto nos permitirá usar ciertas aproximaciones (linealización) para reducir las ecuaciones de movimiento de nuestro problema a un sistema de ecuaciones lineales. Restringiremos nuestro estudio al caso de sistemas conservativos.

2.1. Oscilaciones pequeñas en sistemas conservativos

Consideraremos un sistema conservativo con una energía potencial que sólo depende de las posiciones. Si usamos las coordenadas generalizadas $\{q_i\}_{i=1}^n$, la energía potencial se escribe como $U = U(q_1, q_2, \dots, q_n)$. Las fuerzas generalizadas asociadas $\mathcal{F}_i = -\frac{\partial U}{\partial q_i}$ serán cero si el sistema está en equilibrio: $\mathcal{F}_i = 0, \quad \forall i$. Estamos interesados en estudiar el movimiento del sistema cuando, estando en equilibrio, lo separamos ligeramente de éste. Llamaremos $q_{1,0}, q_{2,0}, \dots, q_{n,0}$ las coordenadas generalizadas en la posición de equilibrio. Estando en equilibrio se nos presentan dos casos muy distintos en el comportamiento del sistema. Diremos que el equilibrio es estable si cualquiera que sea el ligero desplazamiento que hagamos de la posición de equilibrio, el sistema presenta un movimiento oscilatorio alrededor del equilibrio. Para que esto ocurra, la función U debe tener un mínimo relativo en el punto $(q_{1,0}, q_{2,0}, \dots, q_{n,0})$. En caso contrario, el equilibrio no es estable.

Para estudiar el movimiento del sistema alrededor de un punto de equilibrio estable es conveniente redefinir nuestras coordenadas generalizadas

como la separación respecto al punto de equilibrio. Así, definiremos las coordenadas generalizadas $\{\eta_i\}_{i=1}^n$ como

$$q_i = q_{i,0} + \eta_i. \quad (2.1)$$

Nuestro objetivo es obtener las ecuaciones de movimiento para estas coordenadas. Como vamos a suponer que la separación respecto a la posición de equilibrio es pequeña, lo que haremos será obtener las ecuaciones de movimiento a orden más bajo posible para que nos den ecuaciones no triviales.

Desarrollemos entonces U alrededor de la posición de equilibrio:

$$U(q_{1,0} + \eta_1, q_{2,0} + \eta_2, \dots, q_{n,0} + \eta_n) = U(q_{1,0}, q_{2,0}, \dots, q_{n,0}) + \sum_i \left(\frac{\partial U}{\partial q_i} \right)_0 \eta_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0 \eta_i \eta_j + \dots \quad (2.2)$$

El primer término es la la energía potencial en el punto de equilibrio y podemos redefinir la energía potencial tomando el origen en el punto de equilibrio. El segundo término es cero al estar en un punto de equilibrio. El tercer término es distinto de cero y, como primera aproximación, podemos despreciar los términos de orden superior y tomar como energía potencial la expresión

$$U(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0 \eta_i \eta_j = \frac{1}{2} \sum_{i,j} U_{ij} \eta_i \eta_j. \quad (2.3)$$

La matriz U_{ij} es simétrica ya que

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0 = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial q_j \partial q_i} \right)_0. \quad (2.4)$$

La energía cinética la podemos escribir como

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i,j} m_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j, \quad (2.5)$$

donde los coeficientes m_{ij} dependen de las coordenadas generalizadas. Si desarrollamos alrededor de la posición de equilibrio

$$m_{ij}(q_1, q_2, \dots, q_n) = m_{ij}(q_{1,0}, q_{2,0}, \dots, q_{n,0}) + \sum_k \left(\frac{\partial m_{ij}}{\partial q_k} \right)_0 \eta_k. \quad (2.6)$$

A orden más bajo tendremos que quedarnos sólo con el primer término que denotamos por

$$m_{ij}(q_{1,0}, q_{2,0}, \dots, q_{n,0}) = T_{ij}, \quad (2.7)$$

que serán constantes y siempre se pueden elegir simétricos ya que si $T_{ij} \neq T_{ji}$ podemos redefinirlos de la siguiente manera

$$\frac{1}{2}(T_{ij} + T_{ji}) \longrightarrow T_{ij}. \quad (2.8)$$

Con esto se tiene

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j. \quad (2.9)$$

2.2. Lagrangiana y ecuaciones de Lagrange

Escribamos la lagrangiana del sistema en la aproximación que hemos desarrollado. Se tendrá

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j - \frac{1}{2} \sum_{i,j} U_{ij} \eta_i \eta_j, \quad (2.10)$$

y las ecuaciones de Lagrange serán

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_k} - \frac{\partial L}{\partial \eta_k} &= 0 \Rightarrow \\ \sum_j T_{kj} \ddot{\eta}_j + \sum_j U_{kj} \eta_j &= 0, \quad k = 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (2.11)$$

o bien, en forma matricial

$$\mathbf{T} \ddot{\boldsymbol{\eta}} + \mathbf{U} \boldsymbol{\eta} = 0, \quad (2.12)$$

donde \mathbf{T} y \mathbf{U} son matrices de dimensión $n \times n$ simétricas y reales y $\boldsymbol{\eta}$ es una matriz columna de dimensión $n \times 1$ cuyos elementos de matriz son las coordenadas generalizadas η_i . La matriz columna $\mathbf{0}$, es de dimensión $n \times 1$ y todos sus elementos son nulos.

2.3. Modos normales

Se tiene, por tanto, un sistema de n ecuaciones lineales de segundo orden con coeficientes constantes. Busquemos soluciones de la forma¹

$$\eta_j = A_j e^{-i\omega t}. \quad (2.13)$$

¹Como las soluciones que buscamos son reales, debemos tener en cuenta que al final del proceso nos debemos quedar sólo con la parte real de la solución.

El sustituir obtenemos

$$-\sum_j T_{kj}\omega^2 A_j + \sum_j U_{kj}A_j = 0 \Rightarrow \sum_j (U_{kj} - \omega^2 T_{kj}) A_j = 0, \quad k = 1, \dots, n \quad (2.14)$$

o bien, en forma matricial,

$$(\mathbf{U} - \omega^2 \mathbf{T}) \mathbf{A} = 0, \quad (2.15)$$

que es un sistema lineal homogéneo. Para que tenga solución diferente de la trivial se debe anular el determinante

$$|\mathbf{U} - \omega^2 \mathbf{T}| = 0. \quad (2.16)$$

Ésta no es más que la ecuación característica y sus soluciones nos proporcionan las frecuencias propias del sistema. Al ser las matrices reales y simétricas y sus formas cuadráticas definidas positivas se tiene que los valores propios, ω^2 , son reales y positivos. En general se tendrán n valores de ω^2 , aunque puede ocurrir que algunos coincidan (degeneración).

Partiendo de

$$\mathbf{U} \mathbf{A} = \omega^2 \mathbf{T} \mathbf{A}, \quad (2.17)$$

y multiplicando por la matriz hermítica de \mathbf{A} , $\mathbf{A}^+ \equiv (\mathbf{A}^T)^*$, se tiene que

$$\omega^2 = \frac{\mathbf{A}^+ \mathbf{U} \mathbf{A}}{\mathbf{A}^+ \mathbf{T} \mathbf{A}}. \quad (2.18)$$

Pero, al ser la matriz \mathbf{U} real y simétrica,

$$\mathbf{A}^+ \mathbf{U} \mathbf{A} = (\mathbf{A}^+ \mathbf{U} \mathbf{A})^T = \mathbf{A} \mathbf{U} \mathbf{A}^* = (\mathbf{A}^+ \mathbf{U} \mathbf{A})^*. \quad (2.19)$$

Luego $\mathbf{A}^+ \mathbf{U} \mathbf{A}$ es real. De modo análogo, al ser la matriz \mathbf{T} real y simétrica se obtiene que $\mathbf{A}^+ \mathbf{T} \mathbf{A}$ es también real. Así, ω^2 es real. El vector propio asociado puede elegirse real ya que si \mathbf{A} es un vector propio complejo,

$$\begin{aligned} \mathbf{U} \mathbf{A} = \omega^2 \mathbf{T} \mathbf{A} &\Rightarrow \mathbf{U} \mathbf{A}^* = \omega^2 \mathbf{T} \mathbf{A}^* \Rightarrow \\ \mathbf{U} (\mathbf{A} + \mathbf{A}^*) &= \omega^2 \mathbf{T} (\mathbf{A} + \mathbf{A}^*), \end{aligned} \quad (2.20)$$

es decir, $\mathbf{A} + \mathbf{A}^*$, que es real, también será vector propio.

Si \mathbf{A} es un vector propio real asociado a ω^2 se tiene que

$$\omega^2 = \frac{\mathbf{A}^T \mathbf{U} \mathbf{A}}{\mathbf{A}^T \mathbf{T} \mathbf{A}} > 0, \quad (2.21)$$

ya que las formas cuadráticas asociadas a las matrices \mathbf{U} y \mathbf{T} son definidas positivas.

A cada valor de ω^2 , solución de la ecuación característica, le corresponde un vector propio que cumple la ecuación

$$(\mathbf{U} - \omega^2 \mathbf{T}) \mathbf{A} = 0. \quad (2.22)$$

Es claro que sólo la dirección de \mathbf{A} está determinada ya que si lo multiplicamos por una constante seguirá cumpliendo la ecuación. Una propiedad muy importante es que los vectores propios asociados a valores propios diferentes cumplen la ecuación

$$\mathbf{A}_{(1)}^T \mathbf{T} \mathbf{A}_{(2)} = 0 \quad (2.23)$$

donde $\mathbf{A}_{(1)}$ es el vector propio asociado al valor propio ω_1^2 y $\mathbf{A}_{(2)}$ el asociado a ω_2^2 con $\omega_1^2 \neq \omega_2^2$.

Si hay algún valor propio con multiplicidad $m > 1$ se podrá encontrar m vectores propios asociados a este valor propio cumpliendo también esta propiedad. Tendremos entonces n vectores propios reales y ‘ortogonales’ según la métrica \mathbf{T} .

Ya hemos dicho que los vectores propios no están completamente determinados ya que sólo la dirección lo está. Podemos eliminar esta ambigüedad, en parte², imponiendo que tengan módulo unidad con la métrica \mathbf{T} , esto es,

$$\mathbf{A}^T \mathbf{T} \mathbf{A} = 1. \quad (2.24)$$

Usando estos valores y vectores propios, la solución general de las ecuaciones de Lagrange la podemos escribir como

$$\boldsymbol{\eta} = \text{Re} \sum_k C_k \mathbf{A}_{(k)} e^{-i\omega_k t}, \quad (2.25)$$

donde $\mathbf{A}_{(k)}$ es el vector propio correspondiente al valor propio ω_k^2 (de las soluciones $\omega_k = \pm\sqrt{\omega_k^2}$ elegimos quedarnos con la positiva) y C_k son constantes, en general, complejas. Como las matrices $\mathbf{A}_{(k)}$ son reales, podemos escribir

$$\eta_i = \sum_k c_k A_{(k)i} \cos(\omega_k t + \delta_k). \quad (2.26)$$

Los valores de c_k (reales) y de δ_k (reales) se obtendrán, para una solución particular, a partir de las condiciones iniciales: $\eta_i(t_0)$, $\dot{\eta}_i(t_0)$.

²Todavía podemos elegir arbitrariamente el sentido del vector \mathbf{y} , en caso de degeneración, se pueden realizar transformaciones ortogonales en cada subespacio.

Como las c_k vienen dadas por las condiciones iniciales podemos ajustar éstas de modo que sólo una de las c_k sea diferente de cero. En ese caso se tendrá que todas las partículas del sistema vibrarán con la misma frecuencia, aunque, en general, con diferente amplitud ya que ésta dependerá del valor de $A_{(k)i}$. A cada una de estas vibraciones, que está caracterizada por la frecuencia, se le llama modo normal de vibración. En general, si perturbamos el sistema, la vibración será una superposición lineal de modos normales de vibración.

Obtengamos la energía del sistema. Si

$$\eta_i = \sum_k c_k A_{(k)i} \cos(\omega_k t + \delta_k), \quad (2.27)$$

y los vectores propios $A_{(k)}$ están normalizados,

$$A_{(k)}^T \mathbb{T} A_{(k)} = 1, \quad (2.28)$$

tenemos que

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{\eta}}^T \mathbb{T} \dot{\boldsymbol{\eta}} = \\ &= \sum_k c_k \omega_k A_{(k)}^T \sin(\omega_k t + \delta_k) \mathbb{T} \sum_{k'} c_{k'} \omega_{k'} A_{(k')} \cos(\omega_{k'} t + \delta_{k'}) = \\ &= \sum_{k,k'} c_k c_{k'} \omega_k \omega_{k'} \sin(\omega_k t + \delta_k) \sin(\omega_{k'} t + \delta_{k'}) A_{(k)}^T \mathbb{T} A_{(k')} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_k c_k^2 \omega_k^2 \sin^2(\omega_k t + \delta_k), \end{aligned} \quad (2.29)$$

y, de forma análoga, se llega a que

$$U = \frac{1}{2} \sum_k c_k^2 \omega_k^2 \cos^2(\omega_k t + \delta_k). \quad (2.30)$$

La energía total del sistema será, por tanto,

$$E = \sum_k \frac{1}{2} c_k^2 \omega_k^2 = \sum_k E_k, \quad (2.31)$$

luego la energía total es la suma de las energías de cada modo.

2.4. Coordenadas normales

A partir de la solución general se observa que la evolución temporal de cada coordenada generalizada η_i involucra, en general, todas las frecuencias del sistema. Nos podemos plantear si existen otras coordenadas generalizadas de manera que aparezca una sola frecuencia en la evolución temporal de cada coordenada. Así, la evolución temporal de cada coordenada será armónica. Busquemos una transformación lineal de las coordenadas $\boldsymbol{\eta}$ a $\boldsymbol{\zeta}$. Se tendrá

$$\boldsymbol{\eta} = \mathbf{B} \boldsymbol{\zeta}, \quad (2.32)$$

siendo \mathbf{B} una matriz constante.

Con estas nuevas coordenadas, el sistema de ecuaciones queda de la forma

$$\mathbf{T} \mathbf{B} \ddot{\boldsymbol{\zeta}} + \mathbf{U} \mathbf{B} \boldsymbol{\zeta} = 0, \quad (2.33)$$

y multiplicando por \mathbf{B}^T

$$\mathbf{B}^T \mathbf{T} \mathbf{B} \ddot{\boldsymbol{\zeta}} + \mathbf{B}^T \mathbf{U} \mathbf{B} \boldsymbol{\zeta} = 0. \quad (2.34)$$

Si pudiéramos encontrar una matriz \mathbf{B} que diagonalizara al mismo tiempo \mathbf{T} y \mathbf{U} tendríamos ecuaciones separadas para cada coordenada ζ_i .

Si \mathbf{B} es una matriz cuyas columnas son los vectores propios $\mathbf{A}_{(k)}$ obtenidos anteriormente se tiene que

$$\mathbf{B}^T \mathbf{T} \mathbf{B} = \mathbf{1}, \quad (2.35)$$

donde $\mathbf{1}$ es la matriz identidad, ya que

$$\mathbf{A}_{(k)}^T \mathbf{T} \mathbf{A}_{(k')} = \delta_{kk'}. \quad (2.36)$$

Además tendremos que

$$\mathbf{U} \mathbf{B} - \mathbf{T} \mathbf{B} \boldsymbol{\Lambda} = 0, \quad (2.37)$$

siendo $\boldsymbol{\Lambda}$ la matriz diagonal formada por los valores propios ω^2 , ya que

$$\mathbf{U} \mathbf{A}_{(k)} - \omega_k^2 \mathbf{T} \mathbf{A}_{(k)} = 0. \quad (2.38)$$

Si multiplicamos por \mathbf{B}^T

$$\mathbf{B}^T \mathbf{U} \mathbf{B} - \mathbf{B}^T \mathbf{T} \mathbf{B} \boldsymbol{\Lambda} = 0 \Rightarrow \mathbf{B}^T \mathbf{U} \mathbf{B} = \boldsymbol{\Lambda}.$$

Es decir, \mathbf{B} diagonaliza simultáneamente a \mathbf{T} y a \mathbf{U} .

La energía cinética en términos de estas nuevas coordenadas será

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{\eta}}^T \mathbf{T} \dot{\boldsymbol{\eta}} = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{\zeta}}^T \mathbf{B}^T \mathbf{T} \mathbf{B} \dot{\boldsymbol{\zeta}} = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{\zeta}}^T \dot{\boldsymbol{\zeta}} = \frac{1}{2} \sum_k \dot{\zeta}_k^2, \quad (2.39)$$

y la potencial

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i,j} U_{ij} \eta_i \eta_j = \frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{U} \boldsymbol{\eta} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta}^T \mathbf{B}^T \mathbf{U} \mathbf{B} \boldsymbol{\zeta} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta}^T \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\zeta} = \frac{1}{2} \sum_k \omega_k^2 \zeta_k^2. \quad (2.40)$$

La lagrangiana del sistema será

$$L = \frac{1}{2} \sum_k \left(\dot{\zeta}_k^2 - \omega_k^2 \zeta_k^2 \right), \quad (2.41)$$

y las ecuaciones de Lagrange

$$\ddot{\zeta}_k + \omega_k^2 \zeta_k = 0, \quad (2.42)$$

con las soluciones

$$\zeta_k = \text{Re} \left(C_k e^{-i\omega_k t} \right), \quad (2.43)$$

o bien

$$\zeta_k = c_k \cos(\omega_k t + \delta_k), \quad (2.44)$$

con c_k y δ_k reales y determinados por las condiciones iniciales³.

A las coordenadas ζ_k se les llama coordenadas normales y cada una es una función armónica del tiempo.

2.5. Vibraciones moleculares

Si intentamos aplicar lo que hemos desarrollado anteriormente al estudio de las vibraciones de moléculas, que consideraremos como un conjunto de partículas (átomos) que interactúan sólo entre ellas, nos encontramos con el siguiente problema. Al desplazar por igual todas las partículas del sistema, la energía potencial permanece constante. Lo mismo ocurre si giramos toda la molécula, manteniendo las posiciones relativas entre las partículas. Ya hemos visto que la consecuencia es la conservación del momento lineal y angular. Habrá entonces soluciones de las ecuaciones de movimiento no representen vibraciones sino traslaciones o rotaciones. Además, la energía

³Las constantes que aquí aparecen, c_k y δ_k , no son, en general, iguales de las que nos han aparecido anteriormente con el mismo nombre.

potencial no tendrá un mínimo relativo estricto en el punto de equilibrio ya que hay movimientos (traslación o rotación) que mantendrán invariante la energía potencial. La forma cuadrática asociada a la energía potencial no sería definida positiva sino semidefinida positiva. Es conveniente eliminar estos ‘grados de libertad’, tres de traslación y tres de rotación, a fin de quedarnos sólo con los grados de libertad vibracionales, que son objeto de estudio.

Para conseguir este objetivo basta imponer que tanto el momento lineal como el angular se anulan. Estas seis restricciones eliminan los seis grados de libertad que no son de nuestro interés y se expresan como

$$\begin{aligned}\sum m_i \vec{v}_i &= \vec{0}, \\ \sum m_i \vec{r}_i \times \vec{v}_i &= \vec{0}.\end{aligned}\tag{2.45}$$

Si tomamos $\vec{r}_i = \vec{r}_{i,0} + \vec{u}_i$, donde $\vec{r}_{i,0}$ es la posición de equilibrio, podemos escribir las condiciones anteriores, a primer orden, como

$$\begin{aligned}\sum m_i \vec{u}_i &= \vec{0}, \\ \sum m_i \vec{r}_{i,0} \times \vec{u}_i &= \vec{0},\end{aligned}\tag{2.46}$$

donde hemos elegido adecuadamente y sin pérdida de generalidad el origen de coordenadas.

Para ilustrar este proceso estudiaremos las vibraciones de una molécula lineal formada por tres átomos, dos de ellos con masa m y el otro con masa M en el centro de la molécula. Nos restringiremos al estudio de las vibraciones lineales y supondremos que la interacción entre átomos vecinos viene dada por un potencial cuadrático, de constante k . En ese caso, tomando como coordenadas las posiciones sobre el eje q_1, q_2, q_3 , la lagrangiana es

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_3^2) + \frac{1}{2}M\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}k((q_1 - q_2)^2 + (q_2 - q_3)^2).\tag{2.47}$$

Si definimos la separación sobre la posición de equilibrio η_i como $q_i = q_{i,0} + \eta_i$ llegamos a

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2 - \frac{1}{2}k((\eta_1 - \eta_2)^2 + (\eta_2 - \eta_3)^2).\tag{2.48}$$

A fin de eliminar el modo traslacional imponemos la condición

$$m(\eta_1 + \eta_3) + M\eta_2 = 0,\tag{2.49}$$

con lo que la lagrangiana la podemos escribir en función sólo de η_1 η_3 y sus derivadas temporales,

$$L = \frac{1}{2}m \left(1 + \frac{m}{M}\right) (\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{m^2}{M} \dot{\eta}_1 \dot{\eta}_2 \quad (2.50)$$

$$- \frac{1}{2}k \left[\left(1 + 2\frac{m}{M} + 2\frac{m^2}{M^2}\right) (\eta_1^2 + \eta_3^2) + 4 \left(1 + \frac{m}{M}\right) \frac{m}{M} \eta_1 \eta_3 \right].$$

Las matrices \mathbf{U} y \mathbf{T} correspondientes son

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} k \left(1 + 2\frac{m}{M} + 2\frac{m^2}{M^2}\right) & 2k \left(\frac{m}{M} + \frac{m^2}{M^2}\right) \\ 2k \left(\frac{m}{M} + \frac{m^2}{M^2}\right) & k \left(1 + 2\frac{m}{M} + 2\frac{m^2}{M^2}\right) \end{pmatrix}, \quad (2.51)$$

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \frac{m(m+M)}{\frac{M}{m^2}} & \frac{\frac{m^2}{M}}{\frac{m(m+M)}{M}} \\ \frac{m(m+M)}{M} & \frac{m^2}{M} \end{pmatrix}.$$

Tenemos entonces dos modos de vibración lineal con frecuencias

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{k(2m+M)}{mM}} \quad (2.52)$$

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

El primero corresponde al modo *antisimétrico* en el que los átomos extremos se mueven en el mismo sentido mientras que el central se mueve en sentido contrario. El segundo modo corresponde al modo *simétrico* y los átomos extremos se mueven en sentidos opuestos, quedando el átomo central en reposo.