

# ESTUDOS DE PEQUENAS OSCILAÇÕES COM APLICAÇÃO EM MOLÉCULAS<sup>i</sup>

Bruno Bueno Ipaves Nascimento<sup>1</sup>  
 Lucy Vitória Credidio Assali (orientadora)<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, Universidade de São Paulo, [bruno.bueno.nascimento@usp.br](mailto:bruno.bueno.nascimento@usp.br)

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidade de São Paulo, [lassali@if.usp.br](mailto:lassali@if.usp.br)

## 1. Motivação

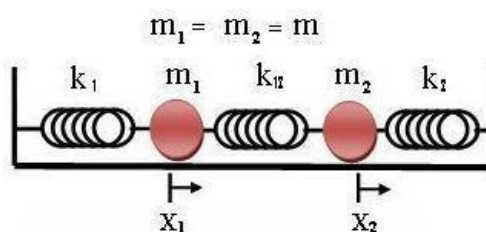
O objetivo deste projeto é desenvolver um estudo das propriedades de sistemas oscilatórios dentro da aproximação de pequenas oscilações, com posterior aplicação em moléculas, como, por exemplo, as moléculas  $CO_2$  e  $CH_4$ . No desenvolvimento deste estudo aplicamos um aprendizado que apresenta um tipo de encadeamento em espiral, descrevendo com diferentes ferramentas matemáticas o mesmo fenômeno, num crescente de dificuldade, mostrando a importância pedagógica, e visa à fixação dos conceitos de acordo com o amadurecimento do aluno.

## 2. Metodologia

A primeira etapa do trabalho foi aprender os conceitos de pequenas oscilações para estudar e desenvolver analiticamente as expressões dos modos normais de vibração de moléculas diatômicas. Primeiramente foi realizado um estudo de oscilações acopladas (unidimensional), pois este é um caso mais simples e que foi analisado de acordo com a mecânica Newtoniana. No presente momento, estuda-se as Equações de Lagrange e Hamilton, estas novas ferramentas matemáticas permitem a aplicação dos conceitos de pequenas oscilações para moléculas um pouco mais complicadas, como, por exemplo, a molécula de  $CO_2$ , utilizando os conceitos de coordenadas normais.

## 3. Dois Osciladores Harmônicos Acoplados

Um exemplo físico de um sistema acoplado é um sólido no qual os átomos interagem por forças elásticas entre si e oscilam sobre suas posições de equilíbrio. Consideremos um sistema acoplado unidimensional composto por duas massas conectadas por molas uma a outra e por molas em posições fixas (Fig. 1). Vamos restringir ao movimento longitudinal, portanto, o sistema tem dois graus de liberdade representados pelas coordenadas  $x_1$  e  $x_2$ .



**Figura 1:** Duas massas conectadas, uma a outra, por uma mola de constante  $k_{12}$ , mais duas molas de constante  $k_1 = k_2 = k$ , ambas fixas em um ponto e ligadas, no outro ponto, as massas.

### 3.1. Aplicação da Mecânica Newtoniana

Considere o sistema da figura 1, se as massas são deslocadas do ponto de equilíbrio, as equações do movimento são dadas por:

$$\begin{cases} m\ddot{x}_1 + (k + k_{12})x_1 - k_{12}x_2 = 0 \\ m\ddot{x}_2 + (k + k_{12})x_2 - k_{12}x_1 = 0 \end{cases} \quad (3.1.1)$$

Como se espera um movimento oscilatório, tenta – se uma solução da forma:

$$\begin{cases} x_1 = B_1 e^{i\omega t} \\ x_2 = B_2 e^{i\omega t} \end{cases} \quad (3.1.2)$$

Onde  $\omega$  é a frequência e as amplitudes são  $B_1$  e  $B_2$ .

Substituindo a (3.1.2) na (3.1.1) e realizando alguns cálculos encontramos a equação:

$$\begin{cases} (k + k_{12} - m\omega^2)B_1 - k_{12}B_2 = 0 \\ -k_{12}B_1 + (k + k_{12} - m\omega^2)B_2 = 0 \end{cases} \quad (3.1.3)$$

Podemos escrever o sistema (3.1.3) desta forma:

$$\begin{vmatrix} k + k_{12} - m\omega^2 & -k_{12} \\ -k_{12} & k + k_{12} - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (3.1.4)$$

Temos com solução do sistema duas frequências características para o sistema:

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{k + 2k_{12}}{m}} \text{ e } \omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (3.1.5)$$

Agora que temos a frequência característica do sistema, é possível calcular as amplitudes  $B_1$  e  $B_2$  substituindo a (3.1.5) na (3.1.3) e escrever a solução geral, dada por:

$$\begin{cases} x_1 = B_1^+ e^{i\omega_1 t} + B_1^- e^{-i\omega_1 t} + B_2^+ e^{i\omega_2 t} + B_2^- e^{-i\omega_2 t} \\ x_2 = -B_1^+ e^{i\omega_1 t} - B_1^- e^{-i\omega_1 t} + B_2^+ e^{i\omega_2 t} + B_2^- e^{-i\omega_2 t} \end{cases} \quad (3.1.6)$$

A solução geral dada pela (3.1.6) é claramente acoplada, pois temos quatro constantes arbitrárias de que necessitamos para o ajuste as condições iniciais.

Para conseguir equações desacopladas, vamos analisar os pares de coordenadas definidos por:

$$\begin{cases} \eta_1 \equiv x_1 - x_2 \\ \eta_2 \equiv x_1 + x_2 \end{cases} \text{ ou } \begin{cases} x_1 = \frac{1}{2}(\eta_2 + \eta_1) \\ x_2 = \frac{1}{2}(\eta_2 - \eta_1) \end{cases} \quad (3.1.7)$$

Substituindo a (3.1.7) na equação de movimento (3.1.1) e realizando alguns cálculos encontramos:

$$\begin{cases} m\ddot{\eta}_1 + (k + 2k_{12})\eta_1 = 0 \\ m\ddot{\eta}_2 + k\eta_2 = 0 \end{cases} \quad (3.1.8)$$

As coordenadas  $\eta_1$  e  $\eta_2$  são desacopladas e são, portanto, independentes. As soluções são:

$$\begin{cases} \eta_1 \cong C_1^+ e^{i\omega_1 t} + C_1^- e^{-i\omega_1 t} \\ \eta_2 \cong C_2^+ e^{i\omega_2 t} + C_2^- e^{-i\omega_2 t} \end{cases} \quad (3.1.9)$$

Se como condição inicial temos  $x_1 \cong -x_2$  e  $\dot{x}_1 \cong -\dot{x}_2$ , nós encontramos  $\eta_2 \cong 0$  e  $\dot{\eta}_2 \cong 0$ , o que leva  $C_2^+ = C_2^- = 0$ , logo,  $\eta_2 \cong 0$ , a partícula oscila sempre fora de fase com frequência  $\omega_1$ , este é o modo *antissimétrico* de oscilação. De forma análoga, se temos  $x_1 \cong x_2$  e  $\dot{x}_1 \cong \dot{x}_2$ , nós encontramos  $\eta_1 \cong 0$  e a partícula oscila em fase com frequência  $\omega_2$ , este é o modo *simétrico* (Fig. 2).

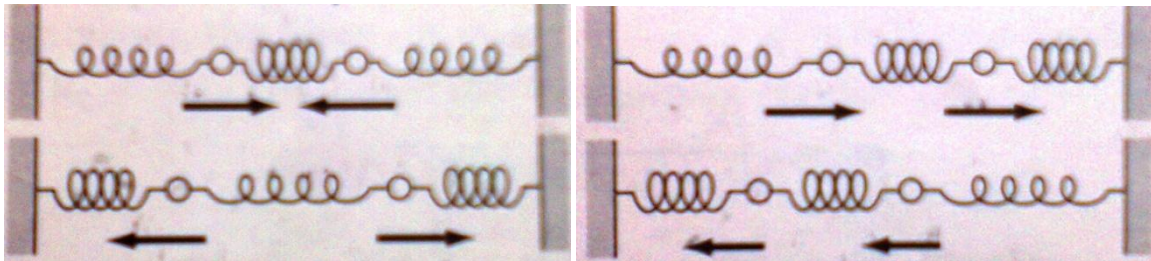


Figura 2: Modo Antissimétrico com frequência de oscilação  $\omega_1$  à esquerda e Modo simétrico com frequência de oscilação  $\omega_2$  à direita.

### 3.2. Aplicação das Equações de Lagrange

A equação de Lagrange, sabendo – se que a Energia Cinética  $T$  é uma função apenas de velocidades generalizadas e a Energia Potencial  $U$  é uma função apenas das coordenadas generalizadas, é:

$$\frac{\partial U}{\partial q_k} + \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} = 0 \quad (3.2.1)$$

As equações do movimento são:

$$\sum_j A_{jk} q_j + m_{jk} \ddot{q}_j = 0 \quad (3.2.2)$$

Como se espera um movimento oscilatório, tenta – se uma solução da forma:

$$q_j \cong a_j e^{i(\omega t - \delta)} \quad (3.2.3)$$

Onde  $a_j$  é a amplitude e  $\delta$  é a fase do sistema. Substituindo a (3.2.3) na (3.2.2), encontramos:

$$\sum_j A_{jk} - \omega^2 m_{jk} a_j = 0 \quad (3.2.4)$$

Podemos escrever a (3.2.4) desta forma:

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \omega^2 m_{11} & A_{12} - \omega^2 m_{12} & A_{13} - \omega^2 m_{13} \dots \\ A_{21} - \omega^2 m_{21} & A_{22} - \omega^2 m_{22} & A_{23} - \omega^2 m_{23} \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{vmatrix} = 0 \quad (3.2.5)$$

### Exemplo

Considere o sistema da figura 1, a Energia Potencial do sistema é dada por:

$$\begin{cases} U = \frac{1}{2} kx_1^2 + \frac{1}{2} k_{12} (x_2 - x_1)^2 + \frac{1}{2} kx_2^2 \\ U = \frac{1}{2} (k + k_{12}) x_1^2 + \frac{1}{2} (k + k_{12}) x_2^2 - k_{12} x_1 x_2 \end{cases} \quad (3.2.6)$$

Podemos determinar o  $A_{jk}$ , que é dado por:

$$A_{11} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial x_1^2} \right|_0 = k + k_{12} ; \quad A_{12} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial x_1 \partial x_2} \right|_0 = -k_{12} = A_{21} \quad \text{e} \quad A_{22} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial x_2^2} \right|_0 = k + k_{12} \quad (3.2.7)$$

A Energia Cinética do sistema é:

$$T = \frac{1}{2} m\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2} m\dot{x}_2^2 \quad (3.2.8)$$

Analisando as (3.2.8), (3.2.7) e (3.2.6) e usando a (3.2.5), encontramos:

$$\begin{vmatrix} k + k_{12} - m\omega^2 & -k_{12} \\ -k_{12} & k + k_{12} - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (3.2.9)$$

Que é exatamente a mesma equação dada pela (3.1.4).

### 4. Conclusão

As equações de Lagrange facilitam a resolução de problemas mecânicos, pois trabalhamos somente com escalares (Energia Potencial e Cinética), enquanto que na mecânica Newtoniana usamos a noção vetorial (Força), as equações de Lagrange são uma reformulação da mecânica Newtoniana, ou seja, uma maneira diferente, mas equivalente, de expressar essas mesmas leis. As de Hamilton, além de facilitar na resolução de problemas mecânicos, permitem um ponto de partida útil para estabelecer as leis da Mecânica Estatística e da Mecânica Quântica. Depois de aprender os formalismos Lagrangeano e Hamiltoniano dentro da aproximação de pequenas oscilações, será possível iniciar o estudo de teoria de grupos aplicada às moléculas, entendendo como obter as representações irredutíveis do grupo pontual de uma molécula, para funções de onda vibracionais.

### 5. Referências

- THORNTON MARION; Classical Dynamics Of Particles and Systems, Thomson, 5ª. Edição, 468 (2004).  
 KEITH R. SYMON; Mecânica, Campus, 2ª. Edição, Rio de Janeiro, 389 (1986).  
 H. MOYSÉS NUSSENZVEIG; Curso de Física Básica, V.2; Blucher, 4ª. Edição, 88 (2002)

<sup>i</sup> Projeto desenvolvido no âmbito do Programa Ensinar com Pesquisa, da Pró-Reitoria de Graduação da Universidade de São Paulo.