Fundamentos de espectroscopia: Vibraciones

Jesús Hernández Trujillo
Facultad de Química, UNAM

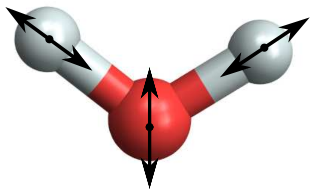
Agosto de 2024

1. **Oscilador Armónico.**
2. **Oscilador amortiguado.**
3. **Oscilador amortiguado forzado.**
4. **Sistemas análogos.**

- **Movimiento oscilatorio:** Una partícula describe un movimiento oscilatorio (vibracional) cuando se mueve alrededor de una posición llamada **punto de equilibrio**.
- **Deformación de materiales:** Un cuerpo elástico se deforma cuando se le aplica una fuerza.

Ejemplos:

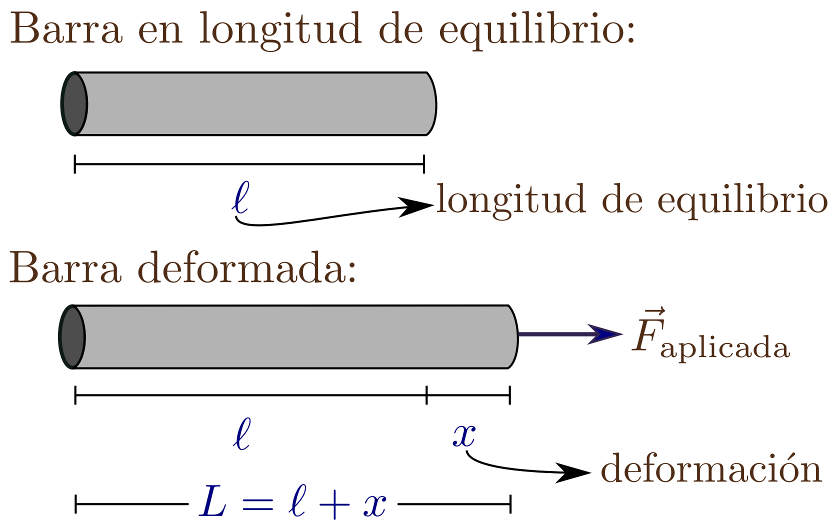
1. Los átomos en una molécula vibran alrededor de sus posiciones de equilibrio.



Estas oscilaciones moleculares pueden estudiarse experimentalmente (espectroscopia infrarroja).

2. Una barra se deforma cuando se le aplica una fuerza, $\vec{F}_{\text{aplicada}}$.

Ej.: una fibra polimérica



Como respuesta, la barra opone una **fuerza de restitución**:

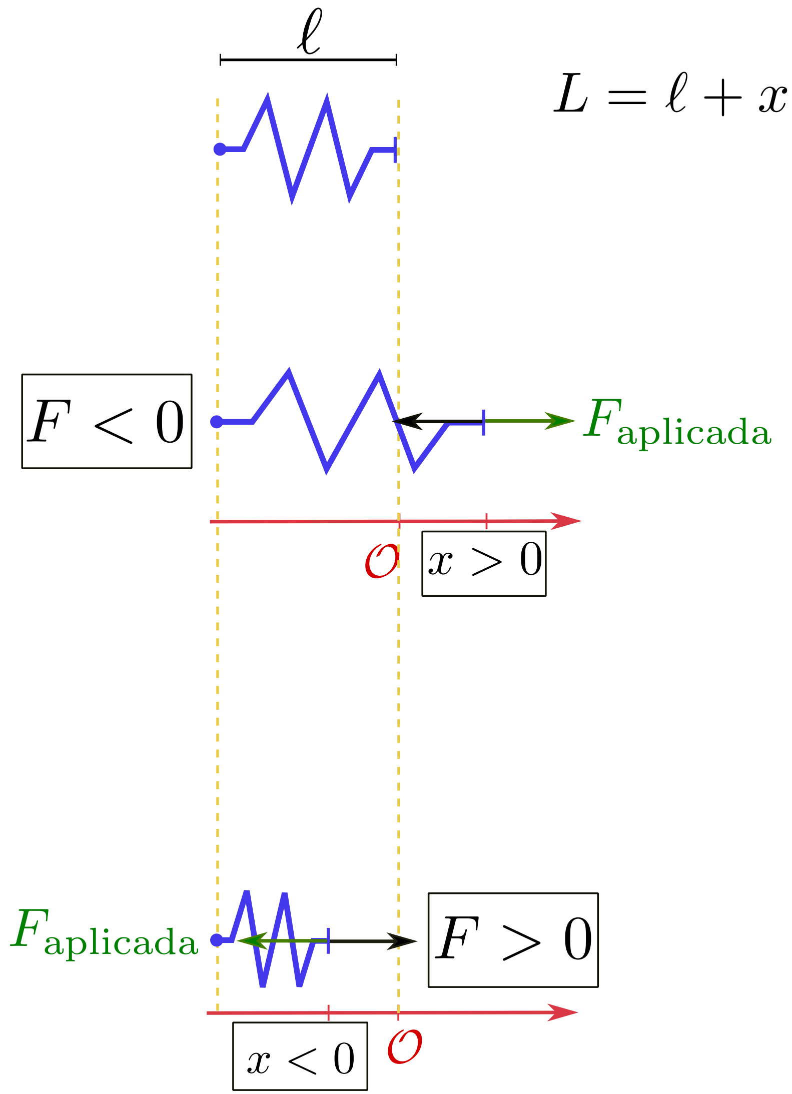
$$\vec{F}_{\text{restitución}} = -\vec{F}_{\text{aplicada}}$$

La **deformación** del objeto se define como la longitud, L, menos la longitud de equilibrio, ℓ:

$$x = L - \ell$$

En adelante, se usa la notación: $F \equiv F_{\text{restitución}}$.

Considera las siguientes situaciones donde se deforma un resorte:



a) Se estira a una longitud mayor que la de equilibrio, $x > 0$:

$$F < 0.$$

b) Se comprime respecto a la longitud de equilibrio, $x < 0$:

$$F > 0.$$

Ley de Hooke:

La fuerza de restitución es directamente proporcional a la deformación:

$$\boldsymbol{F = -kx\,, \quad k > 0}$$

$\boldsymbol{k}$: **constante de rigidez**; depende de la naturaleza del material y las condiciones en que se encuentre.

Unidades:

$$\boldsymbol{k\;[=]\;\mathrm{N/m}}$$

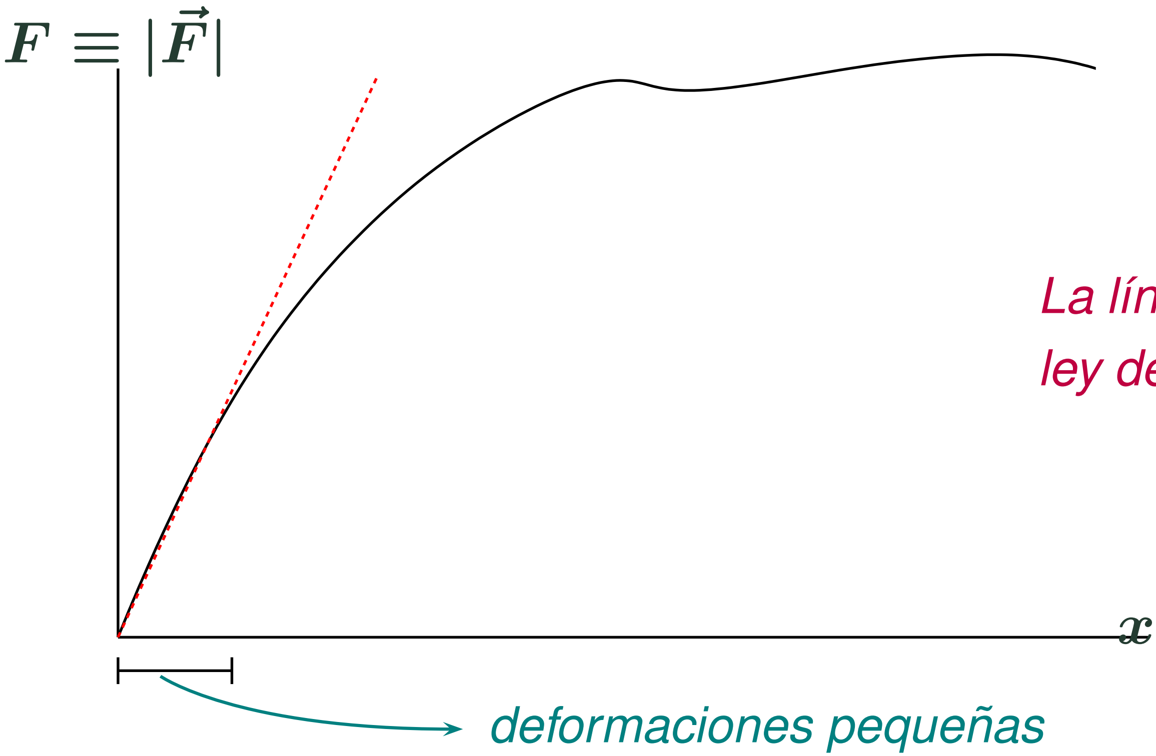
$\Rightarrow$ ***La fuerza de restitución tiene sentido contrario al de la deformación.***

Casos:

- $\boldsymbol{x < 0, \quad F > 0}$: compresión
- $\boldsymbol{x = 0, \quad F = 0}$: equilibrio
- $\boldsymbol{x > 0, \quad F < 0}$: extensión

$\Rightarrow$ La ley de Hooke describe bien la deformación de un material cuando las deformaciones son pequeñas.

Intervalo de validez de la ley de Hooke:



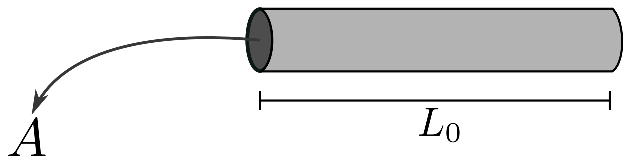
La línea recta representa a la ley de Hooke.

Ejemplos:

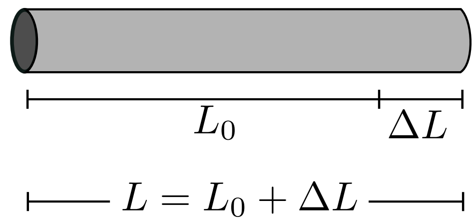
1. Una molécula se rompe.
2. Una viga en un puente se rompe.

- Esfuerzo y deformación de un sólido:

Barra en longitud de equilibrio:



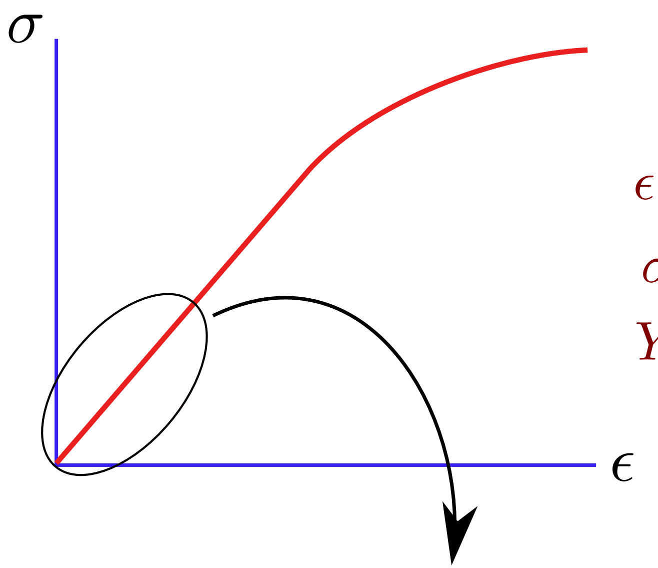
Barra deformada:



ϵ : deformación
σ : esfuerzo
Y : módulo de Young

Una máquina de ensayos de tracción:

permite medir $\boldsymbol{Y}$

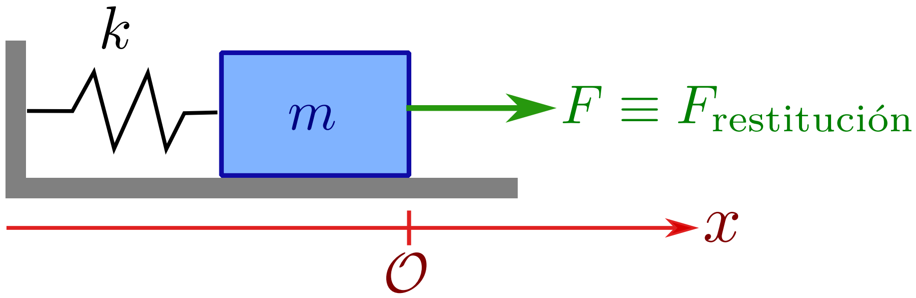


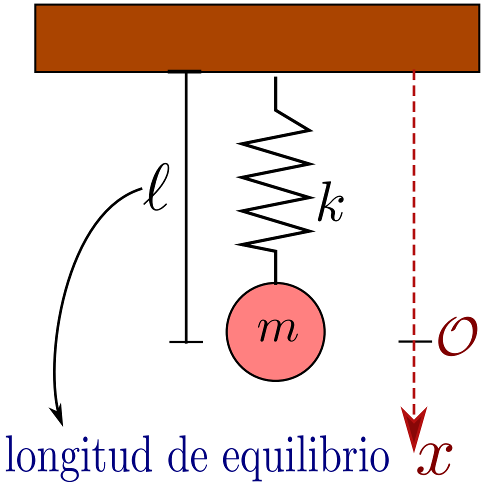
$\epsilon = \Delta L / L_0$
$\sigma = F/A$
$Y = \sigma/\epsilon$

Intervalo de validez del modelo lineal

Movimiento armónico simple

Un objeto bajo la acción de una fuerza que obedece la ley de Hooke:





La 2a. ley de Newton:

$$F = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

y ley de Hooke: $F = -kx\,,$

conducen a

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0, \qquad \omega^2 = \frac{k}{m} \tag{1}$$

Ejercicio:

Resuelve la ecuación diferencial para llegar a

$$x(t) = A\,\mathrm{sen}(\omega t + \phi) \tag{2}$$

donde

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$ es la **frecuencia circular o angular**

Unidades:

$$\omega\ [=]\ \mathrm{rad/s} \equiv \mathrm{s}^{-1}$$

La trayectoria (2) describe el **movimiento armónico simple.**

Contenido
Oscilador armónico
Oscilador amortiguado
Oscilador amortiguado forzado

$$x(t) = A\,\mathrm{sen}(\omega t + \phi)$$

A: Amplitud
ϕ: ángulo de fase

- $x_{\min} = -A$: compresión máxima.
- $x_{\max} = \ \ A$: extensión máxima.

$\{A, \phi\}$: Constantes de integración de la solución general; se obtienen al asignar condiciones iniciales:

$$x(t_0) = x_0$$
$$x'(t_0) = v_0$$

Cinemática del movimiento armónico simple.

- posición:

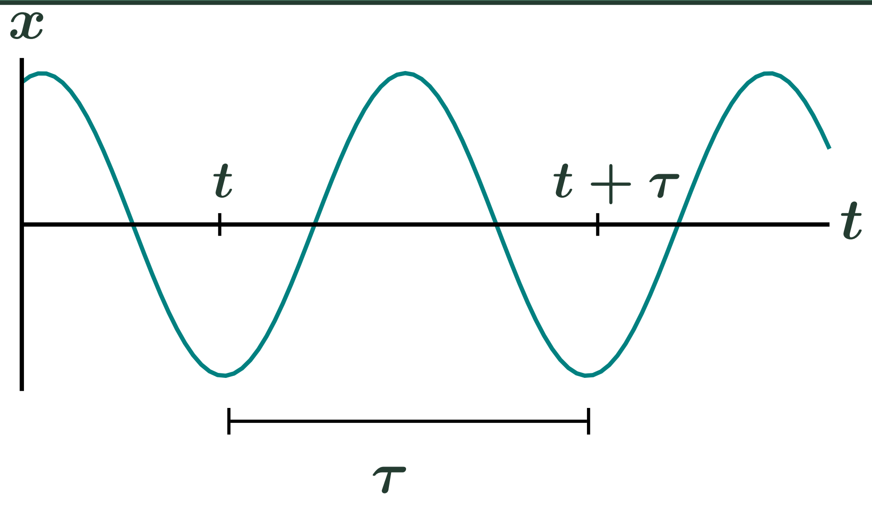
$$x(t) = A \operatorname{sen}(\omega t + \phi)$$

- velocidad:

$$v(t) = \frac{dx}{dt} = A\omega \cos(\omega t + \phi)$$

- aceleración:

$$a(t) = \frac{dv}{dt} = -A\omega^2 \operatorname{sen}(\omega t + \phi)$$



$$\mathrm{sen}(\alpha + 2\pi) = \mathrm{sen}(\alpha)$$
$$\Downarrow$$
$$\omega t + \phi + 2\pi = \omega(t+\tau) + \phi$$
$$\Downarrow$$
$$2\pi = \omega\,\tau$$

Definiciones:

Periodo:

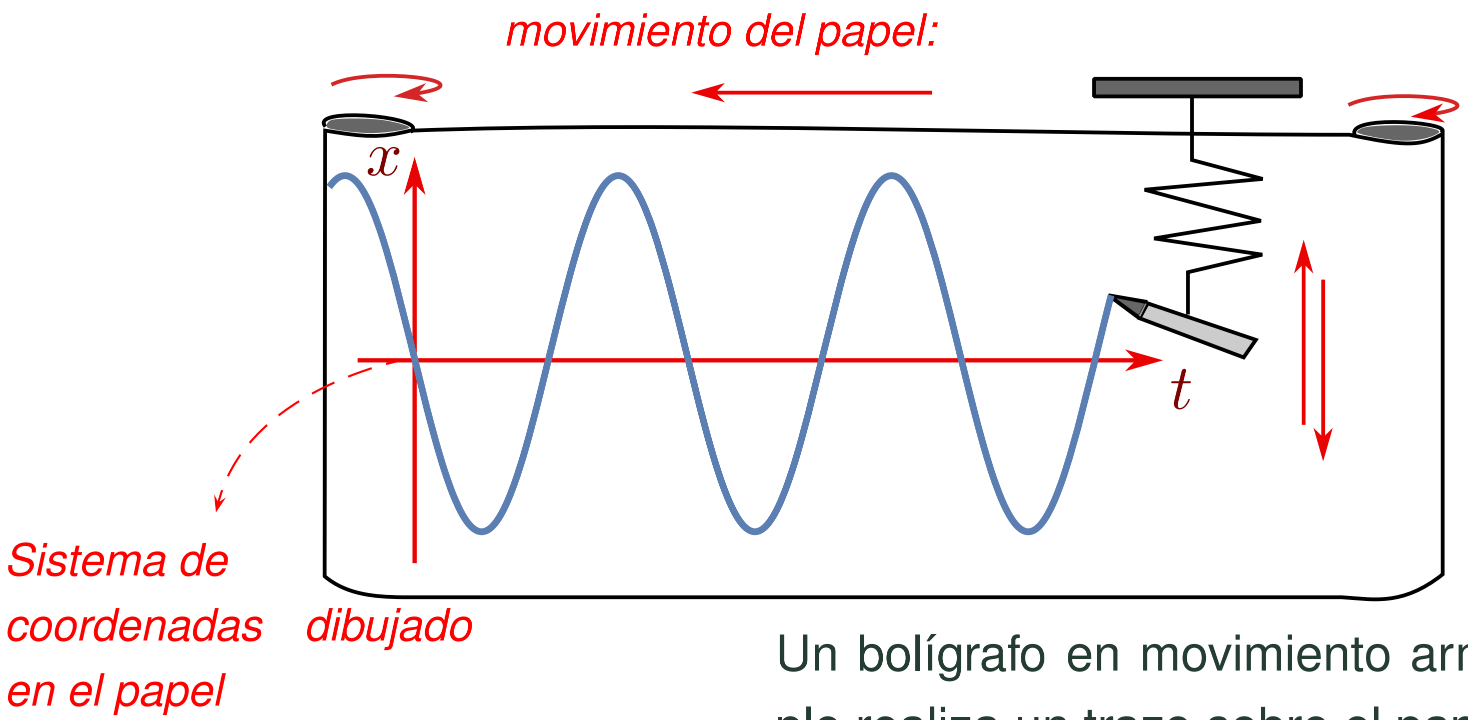
$$\tau = \frac{2\pi}{\omega}; \qquad \tau\,[=]\,\mathrm{s}$$

ω, τ, ν:
independientes de A

Frecuencia:

$$\nu = \frac{1}{\tau} = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}; \qquad \nu\,[=]\,\mathrm{s}^{-1} \equiv \mathrm{Hz}$$

Un rollo de papel que se desplaza entre dos rodillos:



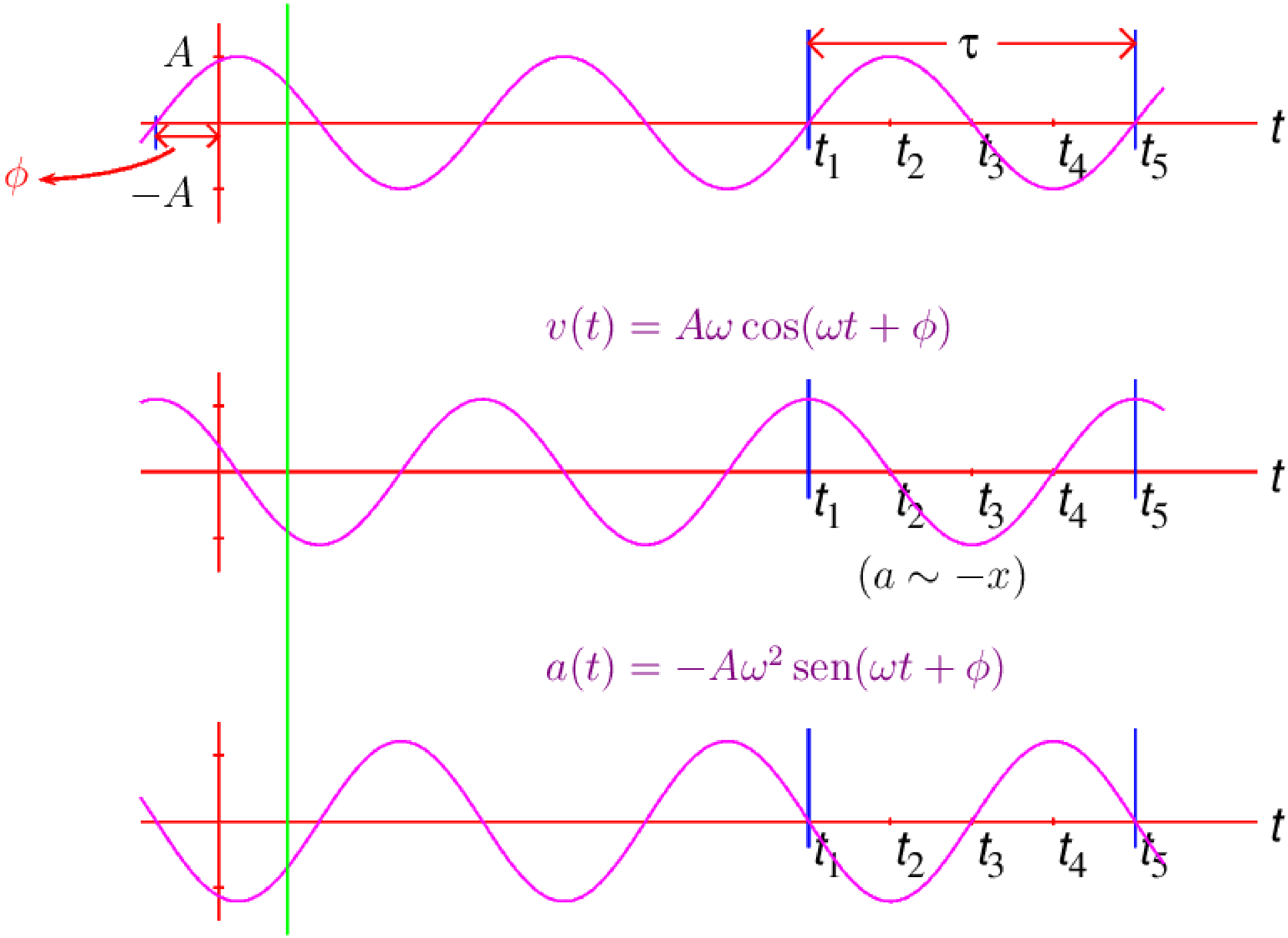
Un bolígrafo en movimiento armónico simple realiza un trazo sobre el papel.

Ver: https://youtu.be/P-Umre5Np_0

$$x(t) = A\,\mathrm{sen}(\omega t + \phi)$$

$$v(t) = A\omega\cos(\omega t + \phi)$$

$$a(t) = -A\omega^2\,\mathrm{sen}(\omega t + \phi)$$

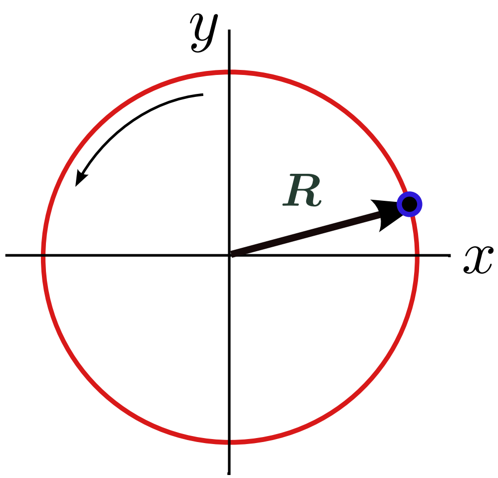


Tarea:

Demuestra que si x_0 y v_0 son la posición y velocidad iniciales, respectivamente, de un cuerpo sometido a un movimiento armónico simple, la amplitud de la oscilación es

$$A = \sqrt{x_0^2 + \left(\frac{v_0}{\omega_0}\right)^2}$$

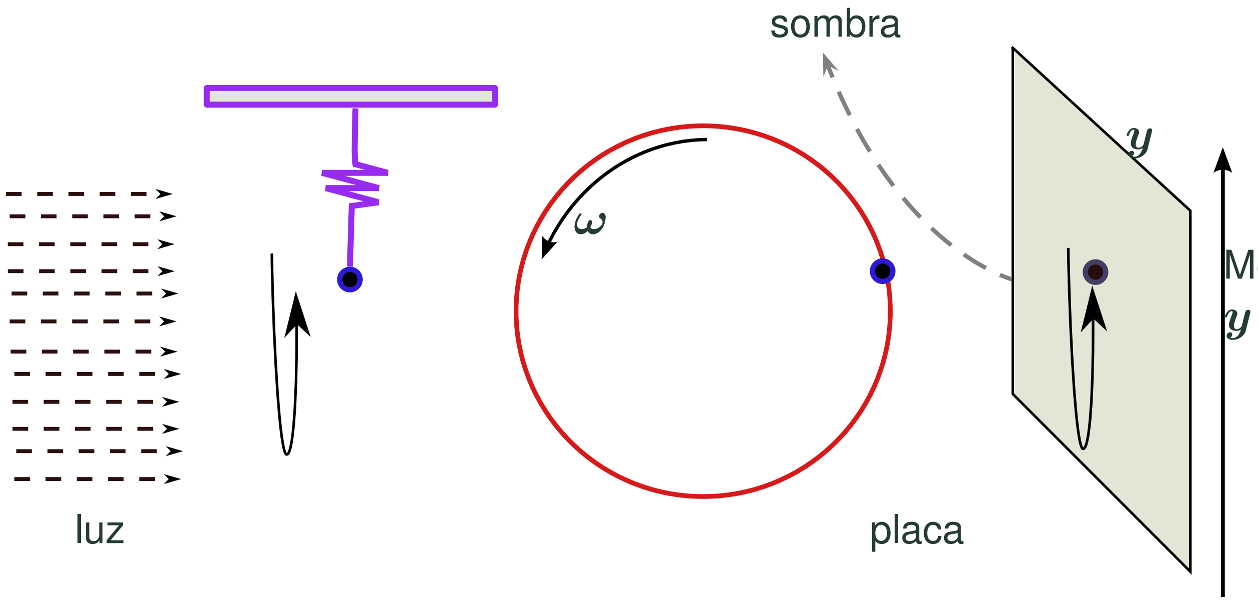
Movimiento armónico simple vs movimiento circular



$$\vec{r}(t) = R\cos\omega t\,\hat{\imath} + R\,\mathrm{sen}\,\omega t\,\hat{\jmath}$$

$$\vec{F}(t) = m\vec{a} = -m\omega^2\vec{r}(t)$$

$$F_y \sim y$$



Movimiento armónico:
$y = R\,\mathrm{sen}\,\omega t,$
$\phi = 0$

https://youtu.be/JSBw-JyFgZk

Energía mecánica del oscilador armónico

- **Energía cinética:**

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mA^2\omega^2\cos^2(\omega t + \phi) \tag{3}$$

- **Energía potencial:**

  La fuerza del oscilador armónico es conservativa:

$$\exists V(x) \quad \text{tal que} \quad F(x) = -\frac{dV(x)}{dx}$$

  Por lo tanto:

$$V(x) = -\int F(x)dx = \int kx dx = \frac{kx^2}{2} + c$$

Al hacer $V(0) = 0$ se obtiene: $c = 0$

Por lo tanto:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}kA^2\,\mathrm{sen}^2(\omega t + \phi) \tag{4}$$

- Energía mecánica:

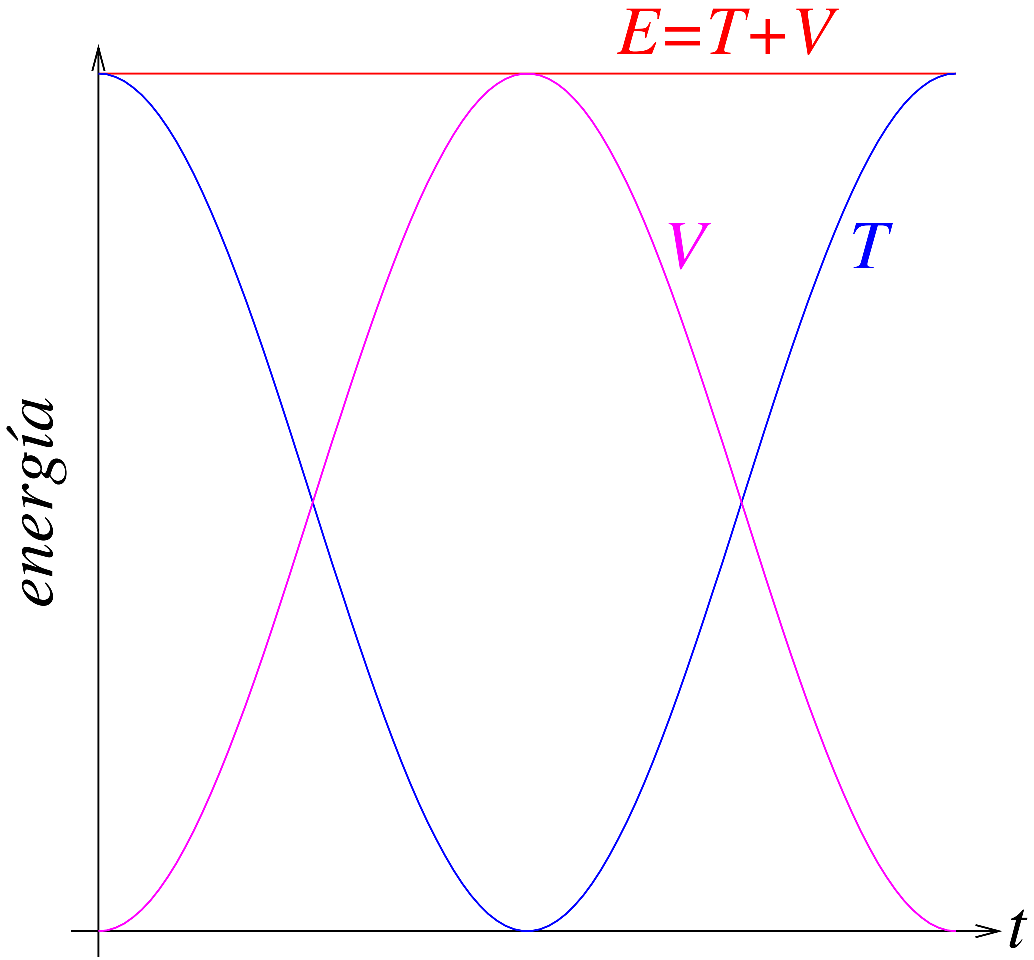
$$E = T + V$$

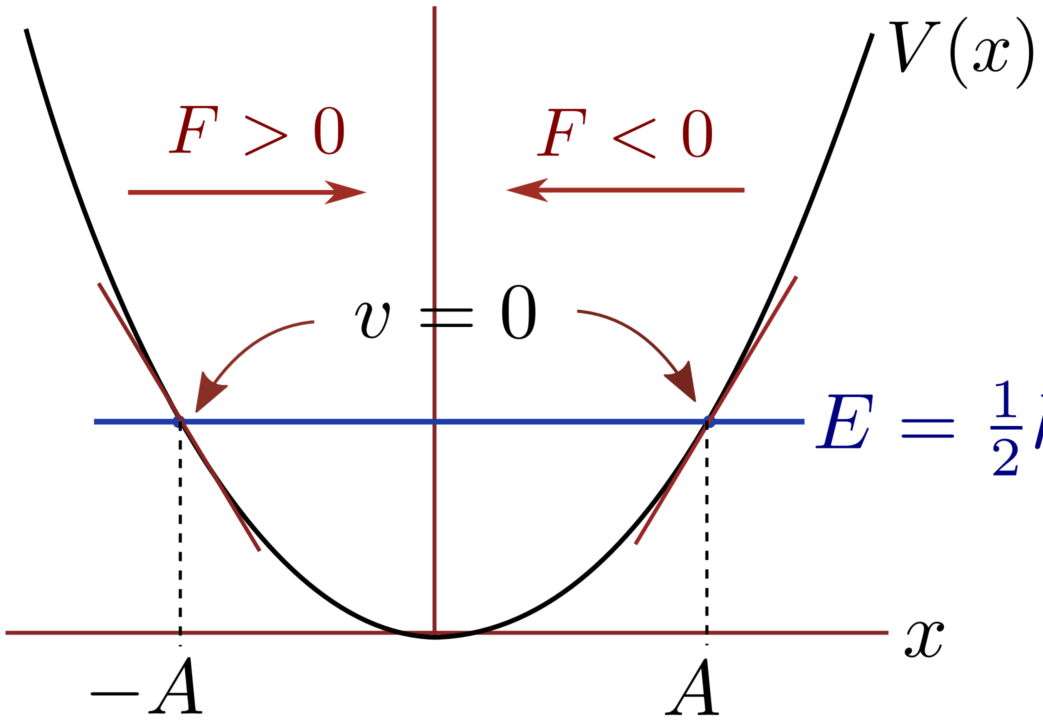
Ejercicio: Utiliza (4) y (5) para obtener:

$$E = \frac{1}{2}kA^2 \tag{5}$$

Es decir, E *es constante en el tiempo*

Gráficamente:





$$F = -\frac{dV}{dx}$$

$$E = \tfrac{1}{2}kA^2 = \tfrac{1}{2}mv^2 + \tfrac{1}{2}kx^2$$

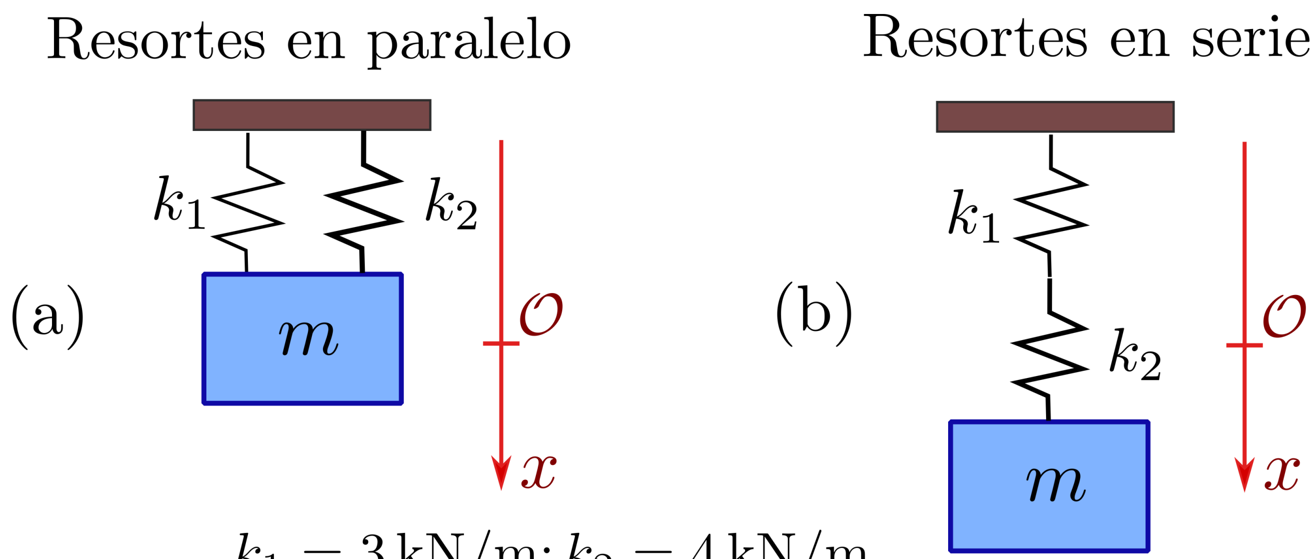
Despejar v de la igualdad anterior:

$$v = \sqrt{\frac{k}{m}\left(A^2 - x^2\right)}$$

Para que v sea un número real: $x \leq A$.

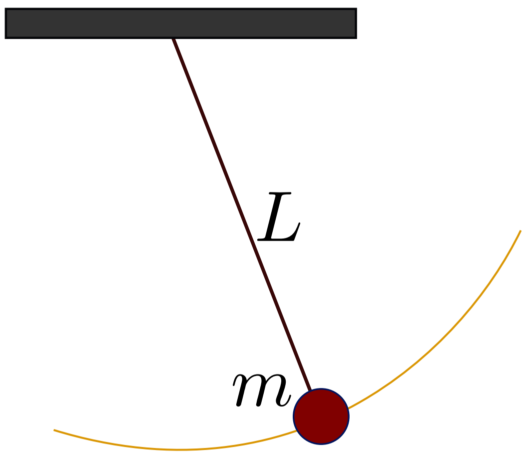
Ejercicio: Resortes en serie y en paralelo

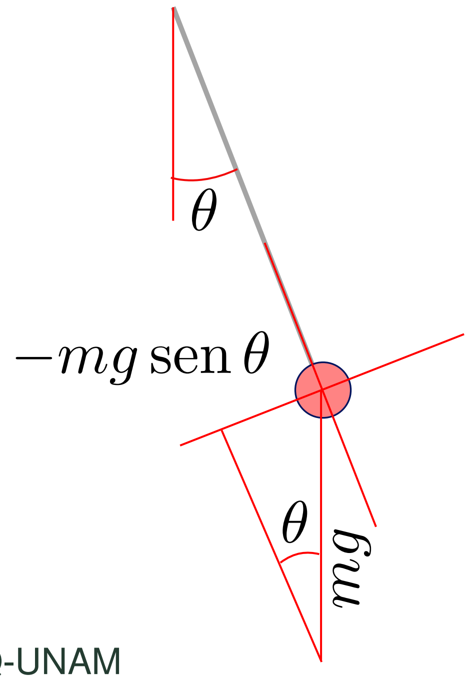
Encuentra el periodo de oscilación de un bloque de 5 kg si éste se tira 2 cm hacia abajo desde el equilibrio y se suelta en las situaciones dadas en la figura.

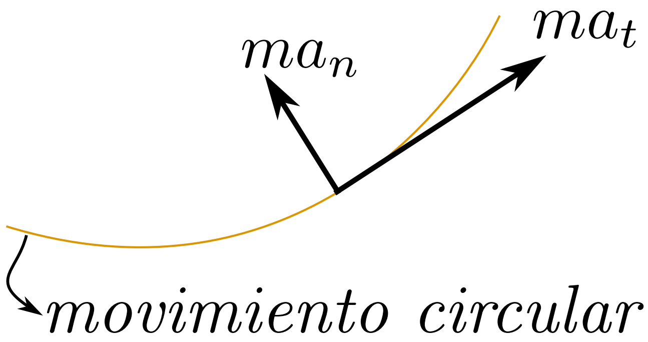


$k_1 = 3\,\mathrm{kN/m}; k_2 = 4\,\mathrm{kN/m}$

Péndulo simple







$$a_t = L\frac{d^2\theta}{dt^2}$$

$$mL\frac{d^2\theta}{dt^2} = -mg\ \mathrm{sen}\,\theta$$

$$mL\frac{d^2\theta}{dt^2} + mg\ \mathrm{sen}\,\theta = 0$$

Para ángulos pequeños: $\operatorname{sen}\theta \approx \theta$

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \omega^2\theta = 0, \qquad \omega^2 = \frac{g}{L}$$

con solución:

$$\theta = \theta_0 \operatorname{sen}(\omega t + \phi)$$

Movimiento oscilatorio con periodo

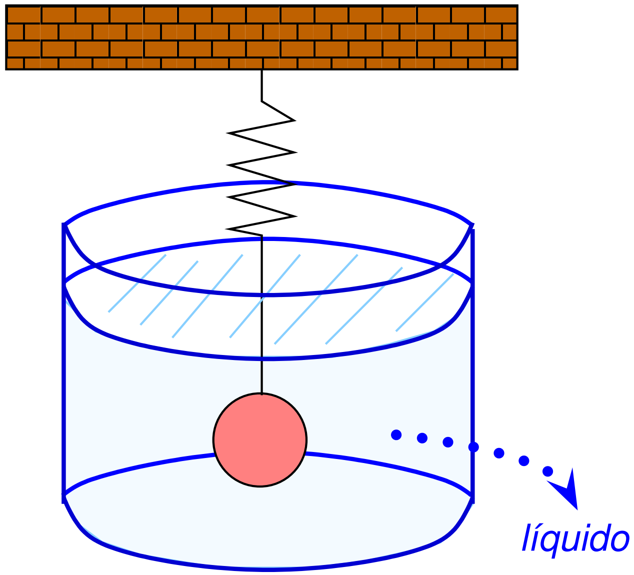
$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi\sqrt{\frac{L}{g}}$$

Tarea: Calcula el valor de g si un péndulo con longitud de 70 cm tiene un periodo 1.7 s.

- *Observación experimental:*

  En un movimiento amortiguado, la amplitud de la oscilación disminuye gradualmente en el tiempo

- La fricción afecta el movimiento
- Ejemplo:



Aproximación:
La fuerza de fricción es proporcional a la velocidad:

$$\boldsymbol{F_{fric} \sim v}$$

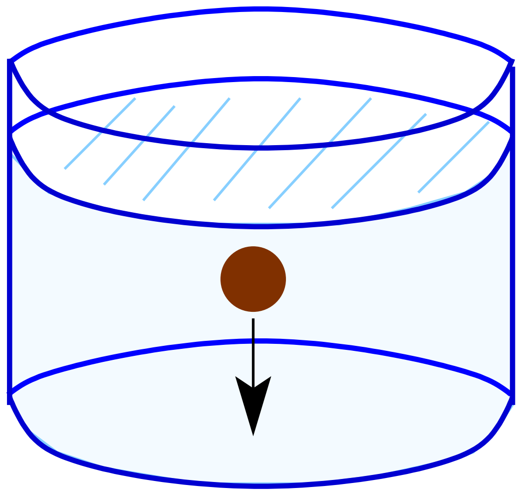
Funciona bien a velocidades pequeñas.

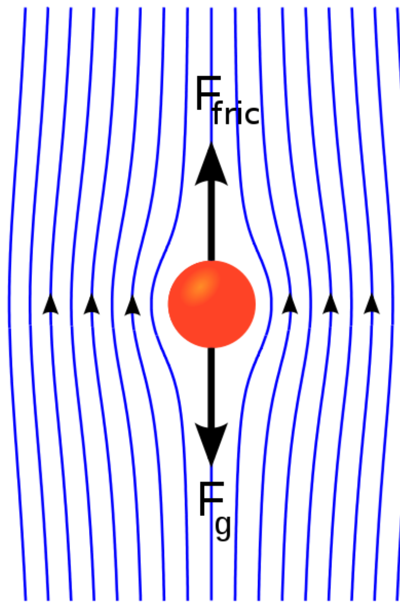
Ejemplo: Ley de Stokes:

$$F_{fric} = -6\pi\eta r v$$

- η: viscosidad
- r: radio de la esfera
- v velocidad

Esfera en un fluido viscoso





η constante, fluido Newtoniano

En contraste, en la salsa catsup: $\eta \sim$ **fuerza**

Segunda ley de Newton para una partícula sujeta a la acción de una fuerza armónica y otra de amortiguamiento lineal:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx - \lambda\frac{dx}{dt}$$

Al reordenar:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\gamma\frac{dx}{dt} + \omega^2 x = 0 \tag{6}$$

Ecuación diferencial homogenea de coeficientes constantes

donde

- $\omega^2 = k/m$
- $2\gamma = \lambda/m$

Ejercicio: Verifica que la ecuación característica

$$\boldsymbol{r^2 + 2\gamma r + \omega^2 = 0}$$

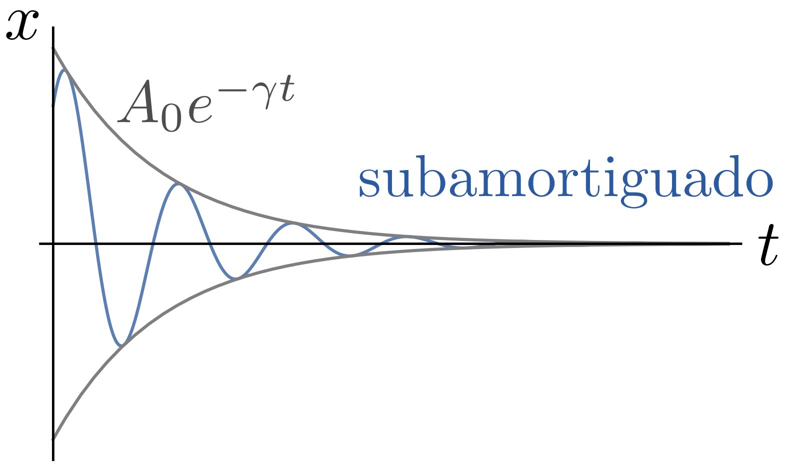
tiene por raíces:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r_1} &= \boldsymbol{-\gamma + \sqrt{\gamma^2 - \omega^2}} \\ \boldsymbol{r_2} &= \boldsymbol{-\gamma - \sqrt{\gamma^2 - \omega^2}} \end{aligned}$$

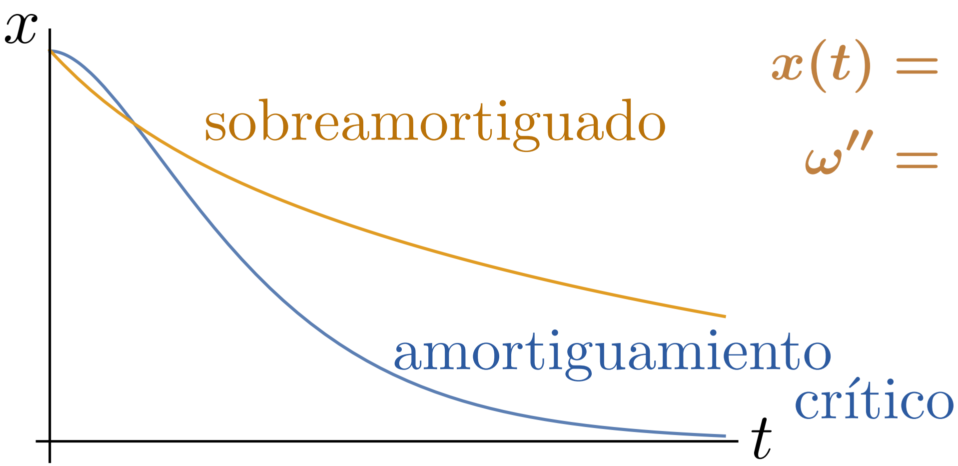
$\mapsto$ **Analizar las situaciones posibles:**

subamortiguamiento: $\gamma < \omega$.
amortiguamiento crítico: $\gamma = \omega$.
sobreamortiguamiento: $\gamma > \omega$.

Resumen:



$$x(t) = A_0 e^{-\gamma t}\,\mathrm{sen}(\omega' t + \phi)$$
$$\omega' = \sqrt{\omega^2 - \gamma^2}$$



$$x(t) = e^{-\gamma t}(c_1 e^{\omega'' t} + c_2 e^{-\omega'' t})$$
$$\omega'' = \sqrt{\gamma^2 - \omega^2}$$

$$x(t) = e^{-\gamma t}(c_1 + c_2 t)$$

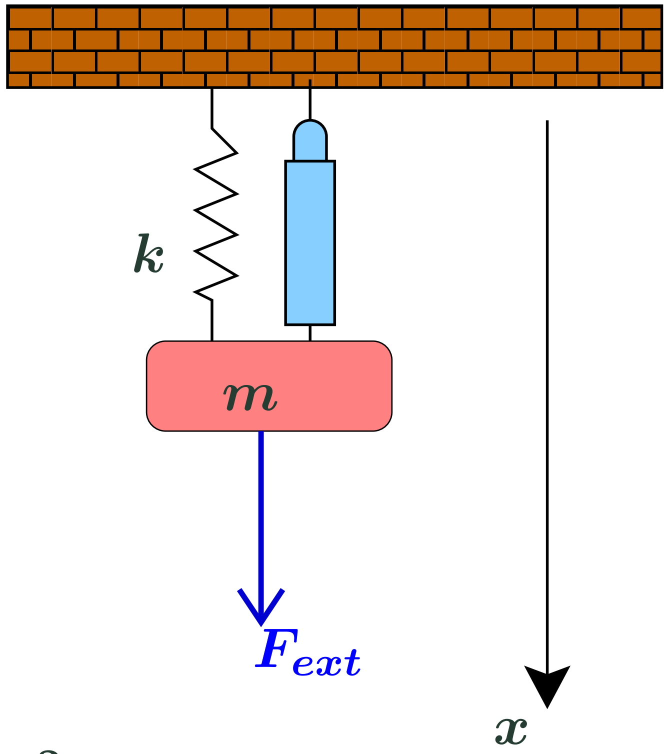
Tarea:

1. Un objeto de 2 kg está colgado deun resorte ($\boldsymbol{k}$= 400 N/m) y oscila con una amplitud inicial de 3 cm. Dado que la energía del objeto disminuye 1 % por periodo, encuentra la constante de amortiguamiento, $\boldsymbol{\lambda}$.
2. Encuentra la expresión de $\boldsymbol{x(t)}$ para el movimiento de un sistema masa-resorte con amortiguación dado por

$$\boldsymbol{x''(t) + 10x'(t) + 16x(t) = 0}$$

si $\boldsymbol{x_0 = 1}$ cm y $\boldsymbol{v_0 = 2}$ cm/s cuando $\boldsymbol{t = 0}$ s. ¿A qué situación de amortiguamiento corresponde?

Oscilador armónico amortiguado sujeto a una fuerza externa F_{ext}.



$$\omega_0^2 = k/m$$

Frecuencia natural del sistema masa-resorte

Segunda ley de Newton:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx - \lambda\frac{dx}{dt} + F_{ext}$$

En el caso:

$$F_{ext} = F_0 \cos\omega_f t$$

Fuerza externa periódica con frecuencia circular ω_f

Por lo tanto:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + kx + \lambda\frac{dx}{dt} = F_0 \cos\omega_f t$$

Ecuación diferencial no homogénea de coeficientes constantes

Solución de la forma

$$x(t) = x_{\text{amort}}(t) + x_f(t)$$

donde

- $x_{\text{amort}}(t)$: solución de la ecuación de movimiento amortiguado
- $x_f(t)$: solución particular del movimiento forzado, se obtiene mediante el **método de los multiplicadores indeterminados**:

$$x_f(t) = c_1 \cos \omega_f t + c_2 \,\mathrm{sen}\, \omega_f t$$

Ejercicio:

Obtén los valores de c_1 y c_2 de $x_f(t)$.

El resultado es

$$c_1 = \frac{F_0(k - \omega_f^2 m)}{(k - \omega_f^2 m)^2 + \omega_f^2 \lambda^2}$$

$$c_2 = \frac{F_0 \omega_f \lambda}{(k - \omega_f^2 m)^2 + \omega_f^2 \lambda^2}$$

Por lo tanto:

$$x_f(t) = \frac{F_0}{(k - \omega_f^2 m)^2 + \omega_f^2 \lambda^2} \times \left[(k - \omega_f^2 m) \cos \omega_f t + \omega_f \lambda \operatorname{sen} \omega_f t \right]$$

Además, el término entre corchetes es

$$[\quad] = a \operatorname{sen}(\omega_f t + \alpha)$$

donde

$$a = \sqrt{(k - \omega_f^2 m)^2 + \omega_f^2 \lambda^2}$$

Finalmente:

$$\boldsymbol{x_f(t) = A\,\mathrm{sen}(\omega_f t + \alpha)}$$

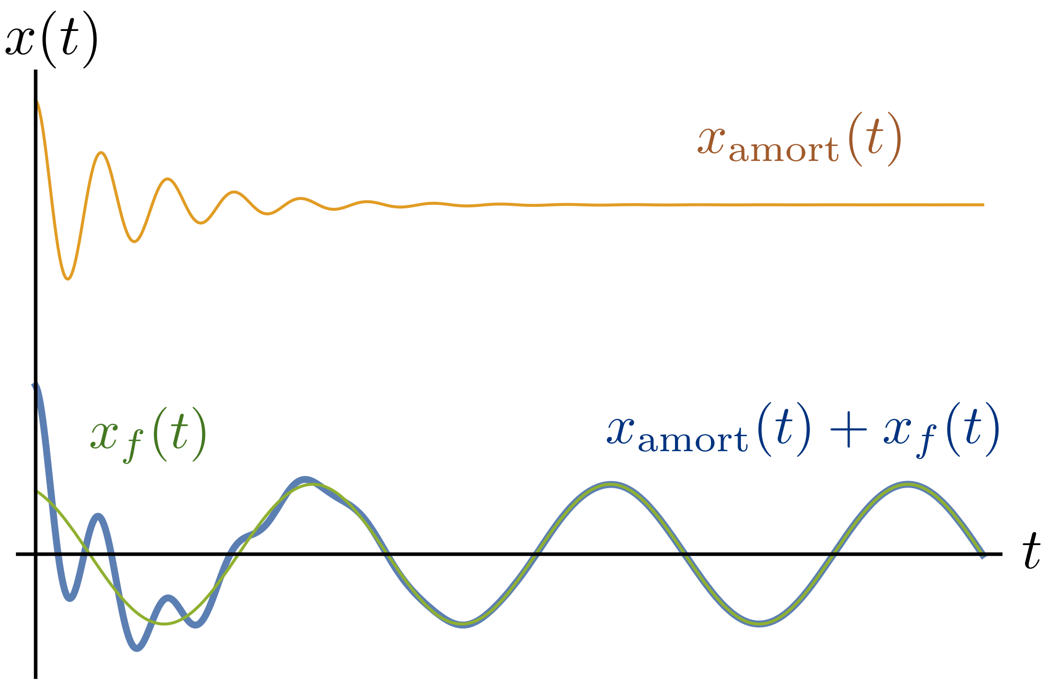
donde

$$\boldsymbol{\alpha = \arctan\frac{k - \omega_f^2 m}{\omega_f \lambda} = \arctan\frac{(\omega_0^2 - \omega_f^2)m}{\lambda\omega_f}}$$

y

$$\boldsymbol{A(\omega_f) = \frac{F_0}{\sqrt{(k/m - \omega_f^2)^2 m^2 + \omega_f^2 \lambda^2}}}$$

Gráficamente:



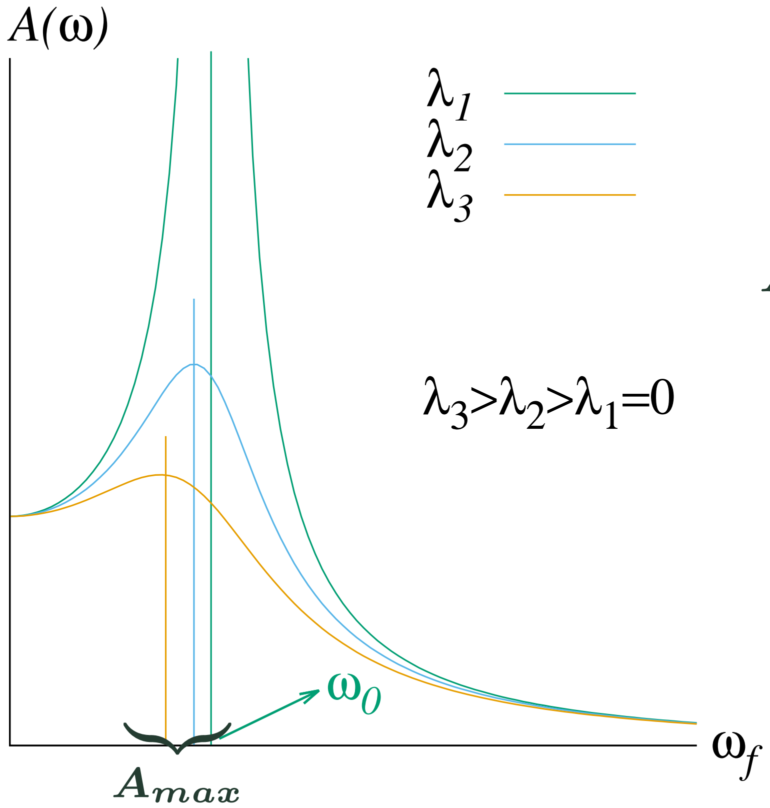
Dado que

$$\lim_{t\to\infty} x_{\text{amort}}(t) = 0$$

entonces

$$\lim_{t\to\infty} x(t) = x_f(t)$$

El sistema amortiguado se mantiene en movimiento si se le suministra energía



$$A(\omega_f) = \frac{F_0}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega_f^2)^2 m^2 + \omega_f^2 \lambda^2}}$$

→ A es grande cuando $\omega_f \sim \omega_0$ **(resonancia)**

Ejercicio:

Demuestra que A_{max} ocurre en

$$\omega_f = \sqrt{\omega_0^2 - 2\gamma^2}$$

Ver:https://youtu.be/jewSVEBkI_s

Observaciones:

- La velocidad máxima del oscilador es

$$v_{max} = \omega_f A = \frac{F_0}{\sqrt{\left(\frac{\omega_0^2 - \omega_f^2}{\omega_f}\right)^2 m^2 + \lambda^2}}$$

- Cuando $\omega_f = \omega_0$ la velocidad y la energía cinética son máximos cuando $\lambda = 0$.
- La gran amplitud en la frecuencia de resonancia se debe a la favorable transferencia de energía hacia el oscilador cuando F_{ext} está en fase con él.

Ejemplos:

- El movimiento de un columpio en fase con la fuerza aplicada.
- Las ondas captadas por el sintonizador de un radio.
- Un cantante que destruye una copa con su voz.
- **Espectroscopia atómica y molecular**.

Ver: https://youtu.be/urYWaHfel6g