



Problema 3: Molécula Diatómica.

Una molécula diatómica consta de dos átomos enlazados químicamente. Estos enlaces químicos sólo pueden estudiarse con exactitud utilizando mecánica cuántica. Sin embargo, se pueden hacer aproximaciones de mecánica clásica adecuadas para varias aplicaciones.

Un modelo común de enlace diatómico es tratarlos como si los dos átomos estuvieran atados por un resorte de constante k a una separación de equilibrio r_0 . Este modelo es muy usado para estudiar las vibraciones moleculares de baja energía, pero falla en donde hay rompimiento de enlaces o para vibraciones de alta energía. La energía potencial de este modelo, el cual no es más que el oscilador armónico, se puede escribir como:

$$U(r) = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$$

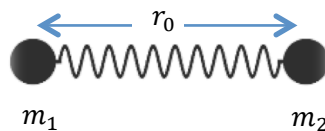
donde r es la separación instantánea entre los dos átomos. De la expresión anterior podemos obtener la magnitud de la fuerza entre los dos átomos:

$$F(r) = -k(r - r_0)$$

Cuando se quiere modelar vibraciones de alta energía (o de alta amplitud) se puede recurrir al potencial de Morse:

$$U(r) = D_e [1 - e^{-a(r-r_0)}]^2$$

en donde D_e y a son cantidades constantes. Nótese que cuando la distancia interatómica crece hasta el infinito, la energía potencial tiende a D_e .



Representación de una molécula diatómica.

- a) Considere una molécula diatómica con átomos de masas m_1 y m_2 y separación de equilibrio r_0 . Determine la ubicación del centro de masas de la molécula respecto de m_1 . **(2 puntos)**
- b) Si esta molécula, supuesta rígida, gira a una velocidad rotacional ω alrededor de un eje perpendicular a la línea que une los átomos y pasa por su centro de masa, encuentre la expresión de la energía cinética rotacional en término de m_1 , m_2 , r_0 y ω . **(2 puntos)**
- c) Suponga ahora que la molécula no rota pero sus átomos pueden vibrar. Determine su frecuencia angular de vibración ω_0 para bajas energías. **(2 puntos)**
- d) Un efecto muy estudiado en espectroscopia es el hecho de que el movimiento rotacional hace que la distancia entre los átomos aumente. Este fenómeno se conoce como *distorsión centrífuga*. Encuentre esta nueva distancia r'_0 en función de ω , ω_0 y r_0 , suponiendo que la molécula no vibra. **(2 puntos)**
- e) Para oscilaciones pequeñas el potencial de Morse se comporta de manera muy parecida al potencial del oscilador armónico. Encuentre la constante equivalente k en función de D_e y a para oscilaciones pequeñas del oscilador de Morse. **(2 puntos)**

Ayuda: $e^x \approx 1 + x$ para x muy pequeña.

Soluciones

- a) Sean \vec{R}_1 y \vec{R}_2 las posiciones de los átomos. El centro de masa del sistema es

$$\vec{R}_{cm} = \frac{m_1\vec{R}_1 + m_2\vec{R}_2}{m_1 + m_2}.$$

Para obtener el centro de masa relativo a m_1 simplemente restamos \vec{R}_1 de \vec{R}_{cm} y obtenemos:

$$r_{cm} = |\vec{R}_{cm} - \vec{R}_1| = \left| \frac{m_2(\vec{R}_2 - \vec{R}_1)}{m_1 + m_2} \right| = \frac{m_2 r}{m_1 + m_2},$$

En donde r es la separación entre los átomos.

- b) Como el sistema no vibra (se comporta como un cuerpo rígido), la distancia entre los átomos tiene que ser constante:

$$|\vec{R}_1 - \vec{R}_2| = r_0$$

Entonces las distancias de cada átomo al centro de masa es:

$$r_1 = |\vec{R}_1 - \vec{R}_{cm}| = \frac{m_2}{m_1 + m_2} r_0$$

$$r_2 = |\vec{R}_2 - \vec{R}_{cm}| = \frac{m_1}{m_1 + m_2} r_0$$

Esto nos permite calcular el momento de inercia alrededor del centro de masa del sistema:

$$I = \sum_i m_i r_i^2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r_0^2$$

Por lo que la energía cinética rotacional es

$$E_{rot} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r_0^2 \omega^2$$

- c) La fuerzas sobre las masas se pueden escribir:

$$m_1 a_1 = k(-r_1 + r_2 - r_0)$$

$$m_2 a_2 = -k(-r_1 + r_2 + r_0)$$

En donde las posiciones aquí tienen como origen al centro de masa (no confundir con las distancias al centro de masa del problema anterior, ya que las distancias no pueden ser negativas). Para poder obtener la frecuencia de oscilación debemos convertir estas ecuaciones a la forma:

$$a_x = -\omega_0^2 (x - x_0)$$

Podemos combinar estas ecuaciones despejamos las aceleraciones en cada ecuación y las restamos:

$$a_2 - a_1 = \left(-\frac{k}{m_2} - \frac{k}{m_1} \right) (r_2 - r_1 - r_0),$$

$$a_2 - a_1 = -\frac{m_2 + m_1}{m_1 m_2} k (r_2 - r_1 - r_0).$$

Definiendo a $a = a_2 - a_1$ y $r = r_2 - r_1$, la ecuación ahora luce

$$a = -\frac{m_2 + m_1}{m_1 m_2} k (r - r_0).$$

Podemos concluir entonces que la frecuencia de oscilación es:

$$\omega_0^2 = \frac{m_1+m_2}{m_1m_2} k.$$

- d) El origen de la distorsión centrífuga tiene que ver con el hecho de que el resorte se extiende porque la aumenta la aceleración centrípeta a medida que aumenta la velocidad angular ω . Lo que se debe hacer es igualar la fuerza del resorte con la aceleración centrípeta total. La fuerza del resorte es:

$$F_e = -k(r'_0 - r_0).$$

La aceleración centrípeta de cada átomo, tomando las distancias calculadas en el acápite b) son:

$$\begin{aligned} a_{c1} &= -r_1\omega^2, \\ a_{c2} &= -r_2\omega^2. \end{aligned}$$

La fuerza centrípeta neta es

$$F_c = m_1a_{c1} + m_2a_{c2} = -\frac{m_1m_2}{m_1+m_2} r'_0\omega^2.$$

Igualando F_e y F_c , y usando el resultado del acápite c) obtenemos:

$$r'_0 = \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} r_0.$$

- e) Para oscilaciones de bajas energía $r - r_0$ tiene que ser una cantidad pequeña, lo que nos permite establecer

$$U(r) = D_e[1 - e^{-a(r-r_0)}]^2 \approx D_e a^2 (r - r_0)^2.$$

Comparando con $U(r) = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$, tenemos:

$$k = 2D_e a^2.$$