PROBLEMA 5.142

Molecola triangolare ⋆⋆⋆

Un semplice modello di molecola è costituito da tre masse identiche m collegate da tre molle di costante elastica k e lunghezza a riposo ℓ_0, in modo da formare un triangolo equilatero. Studiare le piccole oscillazioni attorno a questa posizione di equilibrio.

Soluzione

Il sistema ha sei gradi di libertà, dato che ciascuna massa può muoversi nel piano in due direzioni indipendenti. Scegliamo le coordinate delle tre masse nella forma

$$
\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= (d+\delta u_1)\,\hat{u}_1 + \delta v_1 \hat{v}_1 \\
\vec{r}_2 &= (d+\delta u_2)\,\hat{u}_2 + \delta v_2 \hat{v}_2 \\
\vec{r}_3 &= (d+\delta u_3)\,\hat{u}_3 + \delta v_3 \hat{v}_3
\end{aligned}
$$

dove δu_i, δv_i parametrizzano le piccole oscillazioni. Per la definizione dei versori $\hat{u}_i$ e $\hat{v}_i$ fare riferimento alla Figura 5.121.

Possiamo adesso scrivere l'energia potenziale

$$
U = \frac{k}{2} \sum_{(i,j)\in\mathcal{L}} \left[\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right| - \ell_0\right]^2
$$

con $\mathcal{L} \in \{(1,2),(2,3),(3,1)\}$. Sostituendo le coordinate nel potenziale otteniamo l'espressione

$$
\begin{aligned}
U &= \frac{k}{2} \sum_{(i,j)\in\mathcal{L}} \left\{ \sqrt{\left[(d+\delta u_i)\,\hat{u}_i + \delta v_i \hat{v}_i - (d+\delta u_j)\,\hat{u}_j - \delta v_j \hat{v}_j\right]^2} - \ell_0 \right\}^2 \\
&= \frac{k}{2} \sum_{(i,j)\in\mathcal{L}} \left\{ \sqrt{\left[d\left(\hat{u}_i - \hat{u}_j\right) + \delta u_i \hat{u}_i - \delta u_j \hat{u}_j + \delta v_i \hat{v}_i - \delta v_j \hat{v}_j\right]^2} - \ell_0 \right\}^2
\end{aligned}
$$

Dato che nella posizione di equilibrio

$$
d\left|\hat{u}_i - \hat{u}_j\right| = d\sqrt{3} = \ell_0
$$

per ottenere lo sviluppo del potenziale al secondo ordine nelle coordinate δu_i, δv_i è sufficiente espandere la radice quadrata al primo ordine. Abbiamo allora

$$
\begin{aligned}
U &\simeq \frac{k}{2} \sum_{(i,j)\in\mathcal{L}} \left\{ \sqrt{\ell_0^2 + 2d\left(\hat{u}_i - \hat{u}_j\right)\cdot\left(\delta u_i \hat{u}_i - \delta u_j \hat{u}_j + \delta v_i \hat{v}_i - \delta v_j \hat{v}_j\right)} - \ell_0 \right\}^2 \\
&\simeq \frac{1}{2} k \sum_{(i,j)\in\mathcal{L}} \left\{ \ell_0 \sqrt{1 + \frac{2d}{\ell_0^2}\left(\hat{u}_i - \hat{u}_j\right)\cdot\left(\delta u_i \hat{u}_i - \delta u_j \hat{u}_j + \delta v_i \hat{v}_i - \delta v_j \hat{v}_j\right)} - \ell_0 \right\}^2 \\
&= \frac{1}{2}\frac{k}{3} \sum_{(i,j)\in\mathcal{L}} \left[\left(\delta u_i + \delta u_j\right)\left(1 - \hat{u}_i\cdot\hat{u}_j\right) - \delta v_i \hat{u}_j \cdot \hat{v}_i - \delta v_j \hat{u}_i \cdot \hat{v}_j\right]^2
\end{aligned}
$$

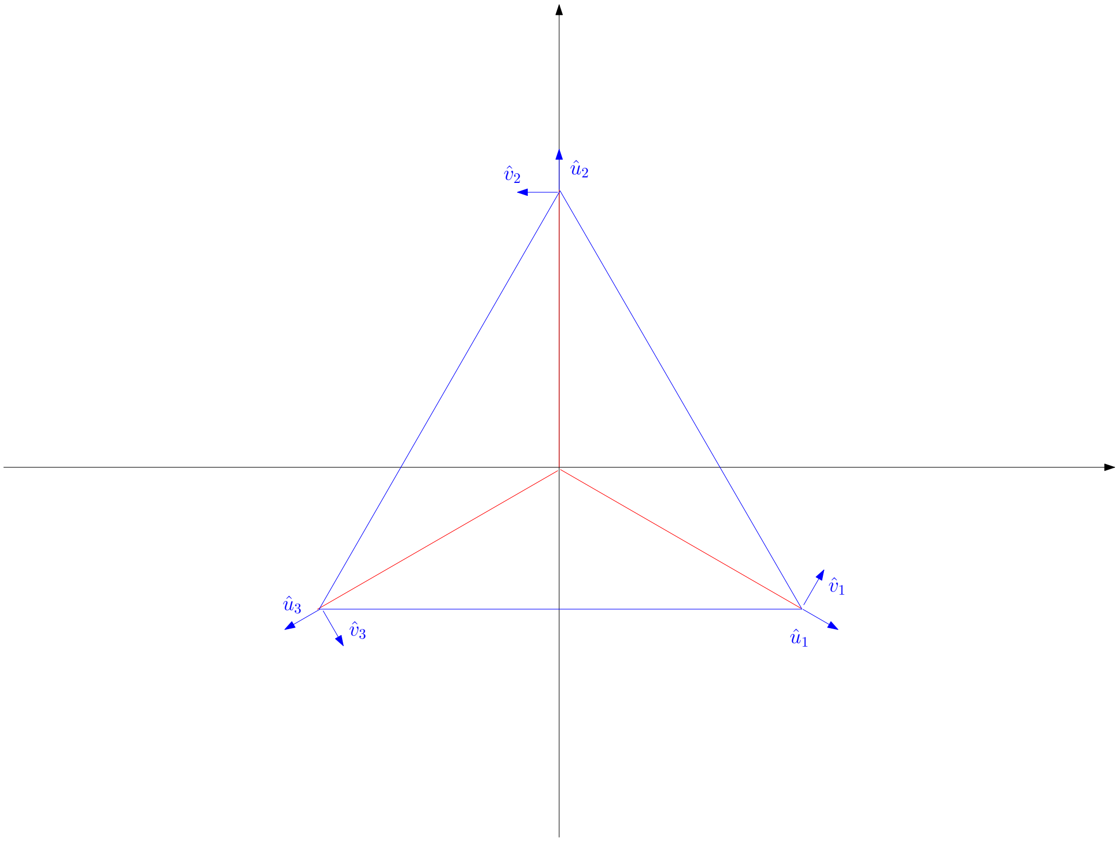

Figura 5.121.: La parametrizzazione utilizzata per studiare il sistema. Notare che i versori $\hat{u}_i$, $\hat{v}_i$ non sono indipendenti tra loro.

Tenendo conto che

$$\begin{aligned}
\hat{u}_1 \cdot \hat{u}_2 = \hat{u}_2 \cdot \hat{u}_3 = \hat{u}_3 \cdot \hat{u}_1 &= -\frac{1}{2} \\
\hat{v}_1 \cdot \hat{v}_2 = \hat{v}_2 \cdot \hat{v}_3 = \hat{v}_3 \cdot \hat{v}_1 &= -\frac{1}{2} \\
\hat{u}_1 \cdot \hat{v}_2 = \hat{u}_2 \cdot \hat{v}_3 = \hat{u}_3 \cdot \hat{v}_1 &= -\frac{\sqrt{3}}{2} \\
\hat{v}_1 \cdot \hat{u}_2 = \hat{v}_2 \cdot \hat{u}_3 = \hat{v}_3 \cdot \hat{u}_1 &= \frac{\sqrt{3}}{2}
\end{aligned}$$

otteniamo infine

$$
\begin{aligned}
U &\simeq \frac{1}{2}\frac{k}{4}\sum_{(i,j)\in\mathcal{L}}\left[\sqrt{3}\left(\delta u_i+\delta u_j\right)-\left(\delta v_i-\delta v_j\right)\right]^2 \\
&= \frac{1}{2}\frac{k}{4}\left\{\left[\sqrt{3}\left(\delta u_1+\delta u_2\right)-\left(\delta v_1-\delta v_2\right)\right]^2\right. \\
&+\left[\sqrt{3}\left(\delta u_2+\delta u_3\right)-\left(\delta v_2-\delta v_3\right)\right]^2 \\
&+\left.\left[\sqrt{3}\left(\delta u_3+\delta u_1\right)-\left(\delta v_3-\delta v_1\right)\right]^2\right\}
\end{aligned}
$$

Possiamo adesso scrivere le equazioni del moto. Ad esempio

$$
\begin{aligned}
m\delta\ddot{u}_1 &= -\frac{\partial U}{\partial u_1}=-\frac{k}{4}\left\{\left(6\delta u_1+3\delta u_2+3\delta u_3\right)+\sqrt{3}\left(\delta v_2-\delta v_3\right)\right\} \\
m\delta\ddot{v}_1 &= -\frac{\partial U}{\partial v_1}=-\frac{k}{4}\left\{\sqrt{3}\left(\delta u_3-\delta u_2\right)+\left(2\delta v_1-\delta v_2-\delta v_3\right)\right\}
\end{aligned}
$$

e similmente per le altre. Possiamo rappresentare l'insieme completo di equazioni nella forma

$$
\delta\ddot{\boldsymbol{q}}+\frac{1}{4}\omega_0^2\begin{pmatrix}
6 & 3 & 3 & 0 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} \\
3 & 6 & 3 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{3} \\
3 & 3 & 6 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} & 0 \\
0 & -\sqrt{3} & \sqrt{3} & 2 & -1 & -1 \\
\sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} & -1 & 2 & -1 \\
-\sqrt{3} & \sqrt{3} & 0 & -1 & -1 & 2
\end{pmatrix}\delta\boldsymbol{q}=0
$$

dove

$$
\delta\boldsymbol{q}^T=\begin{pmatrix}\delta u_1 & \delta u_2 & \delta u_3 & \delta v_1 & \delta v_2 & \delta v_3\end{pmatrix}
$$

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

Per trovare un numero sufficiente di soluzioni proveremo adesso ad ipotizzare la forma dei modi di oscillazione a frequenza fissata del tipo

$$
\delta\boldsymbol{q}=\boldsymbol{Q}e^{i\omega t}
$$

dove $\boldsymbol{Q}$ è un vettore costante. Sostituendo vediamo che $\boldsymbol{Q}$ deve soddisfare l'equazione

$$
\frac{1}{4}\omega_0^2\begin{pmatrix}
6 & 3 & 3 & 0 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} \\
3 & 6 & 3 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{3} \\
3 & 3 & 6 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} & 0 \\
0 & -\sqrt{3} & \sqrt{3} & 2 & -1 & -1 \\
\sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} & -1 & 2 & -1 \\
-\sqrt{3} & \sqrt{3} & 0 & -1 & -1 & 2
\end{pmatrix}\boldsymbol{Q}=\omega^2\boldsymbol{Q}
$$

cioè deve essere un autovettore della matrice che rappresenta le forze di richiamo delle molle. Prima di tutto ci aspettiamo che una soluzione possa essere una semplice rotazione della molecola attorno al centro. In questo caso avremo

$$Q_1^T \propto \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

e si verifica immediatamente che questo è un autovettore (con autovalore nullo), dato che la somma degli elementi delle ultime tre colonne è nullo su ogni riga. Analogamente avremo soluzioni che corrisponderanno ad una semplice traslazione. Per esempio per una traslazione nella direzione x avremo

$$Q_2^T \propto \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & -1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

ed anche in questo caso abbiamo un autovettore con autovalore nullo. Analogamente per una traslazione nella direzione y abbiamo

$$Q_3^T \propto \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

Vogliamo adesso andare oltre tenendo conto delle simmetrie del problema. Dato un possibile modo di oscillazione, ci aspettiamo che applicando una trasformazione di simmetria del problema possano succedere due cose:

1. il modo resta uguale a se stesso, cioè la molecola oscilla mantenendo completamente la sua simmetria;

2. il modo cambia, ma si trasforma in una combinazione di altri modi della stessa frequenza.

La prima possibilità si realizza in una eventuale oscillazione nella quale le tre masse oscillano in sincrono in direzione radiale: istante per istante la forma della molecola è sempre quella di un triangolo equilatero. Questo modo dovrebbe essere descritto da un vettore del tipo

$$Q_4^T \propto \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

che effettivamente è un autovettore corrispondente a $\omega^2 = 3\omega_0^2$.

Restano ancora da trovare due modi di oscillazione per risolvere completamente il problema. Non possiamo più mantenere completamente la simmetria, ma possiamo cercare un modo che ne conserva una parte, per esempio la simmetria di riflessione attorno all'asse passante per l'origine e orientato come $\hat{u}_2$. Il vettore $\boldsymbol{Q}$ dovrebbe essere del tipo

$$Q_5^T \propto \begin{pmatrix} \beta & \alpha & \beta & \gamma & 0 & -\gamma \end{pmatrix}$$

ed imponendo che il centro di massa del sistema non si sposti abbiamo

$$\alpha m + 2m\left(-\frac{1}{2}\beta + \frac{\sqrt{3}}{2}\gamma\right) = 0$$

$$\alpha = \beta - \sqrt{3}\gamma$$

e quindi, a meno di una costante moltiplicativa,

$$\boldsymbol{Q}_5^T \propto \begin{pmatrix} \beta & \beta - \sqrt{3} & \beta & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Il valore di γ si può determinare imponendo che $\boldsymbol{Q}$ sia in effetti un autovettore. Troviamo che

$$\begin{pmatrix} 6 & 3 & 3 & 0 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} \\ 3 & 6 & 3 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{3} \\ 3 & 3 & 6 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} & 0 \\ 0 & -\sqrt{3} & \sqrt{3} & 2 & -1 & -1 \\ \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} & -1 & 2 & -1 \\ -\sqrt{3} & \sqrt{3} & 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \beta - \sqrt{3} \\ \beta \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2\left(\sqrt{3} - 6\beta\right) \\ -8\sqrt{3} + 12\beta \\ -2\left(\sqrt{3} - 6\beta\right) \\ 6 \\ 0 \\ -6 \end{pmatrix}$$

e quindi $\beta = \sqrt{3}/3$,

$$\boldsymbol{Q}_5^T \propto \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{2}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

e $\omega^2 = 3\omega_0^2/2$.

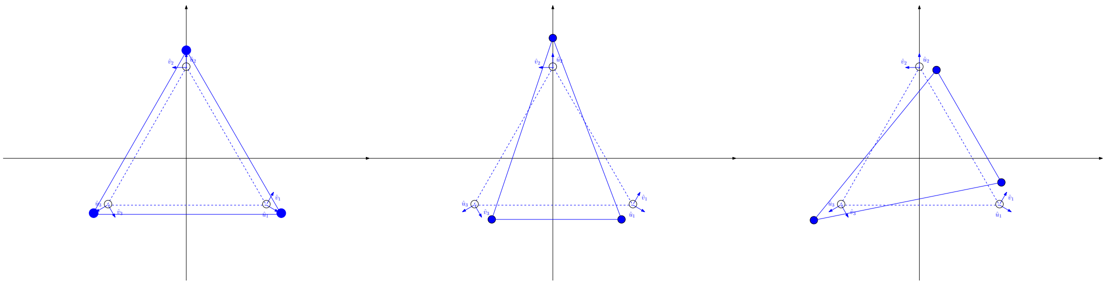

Figura 5.122.: I modi di oscillazione corrispondenti ai vettori $\boldsymbol{Q}_4$, $\boldsymbol{Q}_5$ e $\boldsymbol{Q}_6$. Il modo $\boldsymbol{Q}_6$ si ottiene dal $\boldsymbol{Q}_5$ con una rotazione antioraria di $2\pi/3$.

L'ultimo modo di oscillazione si trova facilmente osservando che ruotando di $2\pi/3$ quello appena trovato se ne deve ottenere un'altro indipendente, della stessa frequenza. La trasformazione è equivalente al cambiamento di variabili

$$\begin{aligned} \delta u_1 &\rightarrow \delta u_2 \\ \delta u_2 &\rightarrow \delta u_3 \\ \delta u_3 &\rightarrow \delta u_1 \\ \delta v_1 &\rightarrow \delta v_2 \\ \delta v_2 &\rightarrow \delta v_3 \\ \delta v_3 &\rightarrow \delta v_1 \end{aligned}$$

e quindi

$$Q_6^T \propto \begin{pmatrix} -\frac{2}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

e si può verificare direttamente che questo è ancora una volta un autovettore, sempre con $\omega^2 = 3\omega_0^2/2$. In questo modo abbiamo trovato sei vettori linearmente indipendenti[23]. Se omettiano i modi corrispondenti alle due traslazioni e alla rotazione rigida della molecola, possiamo scrivere la soluzione generale nella forma

$$\begin{aligned} \delta \boldsymbol{q}(t) = \boldsymbol{Q}_4 & \left(A_4 \cos \omega_0 \sqrt{3} t + B_4 \sin \omega_0 \sqrt{3} t \right) \\ + \boldsymbol{Q}_5 & \left(A_5 \cos \omega_0 \sqrt{3/2} t + B_5 \sin \omega_0 \sqrt{3/2} t \right) \\ + \boldsymbol{Q}_6 & \left(A_6 \cos \omega_0 \sqrt{3/2} t + B_6 \sin \omega_0 \sqrt{3/2} t \right) \end{aligned}$$

Le costanti A_k e B_k possono essere determinate imponendo le condizioni iniziali, che devono essere compatibili con l'assenza di traslazioni e rotazioni.

[23] Che cosa si otttiene mediante un'altra rotazione di $2\pi/3$?