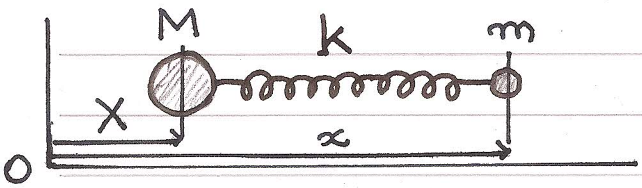
§ Vibrações de uma molécula diatômica (exemplo CO)



Tratamos a molécula como tendo movimento 1-dim, com 2 graus de liberdade. Usamos coordenadas X e x para os átomos, a partir de uma origem comum. O tamanho da molécula é 'a', que corresponde à situação de equilíbrio:

$$X^{(0)} - x^{(0)} = a$$

Calculamos as coordenadas do Centro de Massa (CM) R:

$$(m+M)R = mx + MX.$$

Encontramos as coordenadas internas, relativas ao CM:

$$x' \equiv x - R = \left(1 - \frac{m}{m+M}\right)x - \frac{M}{m+M}X = \frac{M}{m+M}(x - X),$$

$$X' \equiv X - R = \left(1 - \frac{M}{m+M}\right)X - \frac{m}{m+M}x = -\frac{m}{m+M}(x - X).$$

Vemos que as coordenadas internas (x', X') são função da 'coordenada relativa' ρ:

$$\rho \equiv x - X = x' - X'$$

A força interna entre os átomos é proporcional à deformação $(x - X - a)$. Escrevemos as eqs. de movimento:

$$\begin{cases} m\ddot{x} = -k(x - X - a) \\ M\ddot{X} = -k(X - x + a) \end{cases}$$

A eq. de mov. para a coordenada relativa ρ resulta:

$$\ddot{\rho} = \ddot{x} - \ddot{X} = -\frac{k}{m}(x - X - a) + \frac{k}{M}(X - x + a)$$

$$= -k\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)(x - X) + k\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)a$$

e usando a massa reduzida $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}$

$$\boxed{\ddot{\rho} = -\frac{k}{\mu}\rho + \frac{k}{\mu}a}$$

Def. Freqüência de oscilação:

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{\mu}} .$$

Obtemos : $$\boxed{\ddot{\rho} + \omega^2 \rho = \omega^2 a ,} \qquad (*)$$

que é uma eq. de oscilador harmônico de freqüência ω forçado com força constante 'ka'.

Solução : $$\rho(t) = \underbrace{a}_{\text{solução particular de } (*)} + A\cos(\omega t + \theta)$$

Em equilíbrio : $\rho^{(0)} = a$.
Fora do equilíbrio, a molécula executa pequenas oscilações em torno de 'a'.

O deslocamento $\delta\rho \equiv \rho - a$, satisfaz a eq. de um oscilador livre:

$$\ddot{\delta\rho} + \omega^2 \delta\rho = 0 .$$