

## Artigos Gerais

# El estudio y enseñanza de los modos vibracionales de la molécula triatómica

(The study and teaching of the vibrational modes of the triatomic molecule)

Roberto Lavín y Julio Pozo<sup>1</sup>

*Instituto de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Diego Portales, Santiago, Chile*

Recibido em 17/6/2010; Aceito em 27/12/2010; Publicado em 21/3/2011

En este trabajo se muestra que a través del dominio de la teoría general de pequeñas oscilaciones es posible resolver analíticamente los modos vibracionales de la molécula triangular, y que a la luz de resultados comparativos entre la molécula lineal y triangular se puede evaluar la dinámica de la molécula triangular y simplificar el análisis. Para ilustrar lo anterior, se modela mecánicamente una molécula triatómica, utilizando la formulación de Lagrange y asumiendo un tipo de molécula en la cual las masas (átomos) están ubicadas en los vértices de un triángulo rectángulo. Para un desarrollo analítico del problema se utiliza la teoría de pequeñas oscilaciones, considerando las masas y las constantes de acoplamiento iguales. Esto último permite escribir el Lagrangiano del sistema en forma adecuada y posteriormente determinar las ecuaciones diferenciales de movimiento, que describen el comportamiento de la molécula y permiten determinar las frecuencias propias de vibración. También se analiza y discute el caso de una molécula triatómica lineal, determinando los correspondientes modos normales de vibración. Finalmente, se comparan las soluciones de ambos sistemas.

**Palabras-clave:** molécula triatómica triangular y lineal; oscilaciones pequeñas; modos vibracionales.

This work shows that by means of knowledge of the general theory of small oscillations is possible to solve analytically the vibrational modes of the triangular molecule, and from comparative results between the linear and triangular molecule can access the dynamics of the triangular molecule and simplify the analysis. To illustrate this, is modeled mechanically a triatomic molecule using the Lagrangian formulation and assuming a type of molecule in which the masses (atoms) are located at the vertices of a triangle. For an analytical treatment of the problem we use the theory of small oscillations, considering equal masses (atoms) and coupling constants. This allows to write the Lagrangian, and then to obtain dynamical equations for determining normal vibration frequencies. The case of the linear triatomic molecule is analyzed and discussed, determining the corresponding vibrational normal modes. Finally, the solutions for both cases are compared.

**Keywords:** triangular and linear triatomic molecule, small oscillations; vibrational modes.

## 1. Introducción

En los textos universitarios de mecánica -más comunes- los capítulos sobre pequeñas oscilaciones se limitan generalmente a describir en detalle la resolución de sistemas de masas puntuales alineadas (sobre una línea), dando la impresión que sólo estos sistemas son resolubles fácil y analíticamente. Por otro lado, el estudio de estructuras moleculares es un tópico de investigación importante [1-3], debido a que muchas de las propiedades físicas de los materiales sólidos dependen del ordenamiento atómico y de los modos vibracionales de las moléculas que los componen [4, 5]. Así el estudio de estructuras moleculares ha tenido en las últimas décadas un importante lugar debido al avance

en las técnicas de fabricación de estructuras del orden de los nanómetros [6, 7] -orden de magnitud en el cual la estructura y dinámica molecular se tornan muy importantes- permitiendo el estudio experimental sobre estructuras que contienen un número limitado de moléculas. Dentro de estas, el estudio de la molécula triatómica ha tenido un importante sitio debido a que se presenta con frecuencia en la naturaleza. El objetivo de este trabajo es mostrar en detalle a los alumnos de física, química, e ingeniería que es posible estudiar y evaluar analíticamente los modos vibracionales de la molécula triatómica para distintas configuraciones estructurales, a través de la teoría de pequeñas oscilaciones [8], es decir, a través de las herramientas básicas entregadas en nivel de pregrado, permitiendo un primer

<sup>1</sup>E-mail: julio.pozo@udp.cl.

acercamiento a este t3pico de investigaci3n, y sentando un precedente did3ctico para estudios m3s avanzados; como a trav3s de la formulaci3n cu3ntica. Para este prop3sito se ha modelado anal3ticamente una mol3cula triat3mica, (asociada generalmente a la mol3cula de agua), sobre la cual se ha entregado bastante informaci3n, pero que en la mayor3a de los estudios realizados se consideran aspectos demasiados generales y/o num3ricos, haci3ndolos poco did3cticos. A diferencia de otros trabajos, aqu3 se muestra que es posible evaluar anal3ticamente la din3mica de una mol3cula "compleja" a trav3s de simplificaciones y comparaciones que permiten entender el comportamiento del sistema, ilustrando as3, que a pesar de las aparentes dificultades de c3lculo la soluci3n anal3tica es susceptible de ser encontrada f3cilmente.

## 2. Modelo y teor3a

El sistema considerado corresponde a la mol3cula triat3mica triangular compuesta por tres masas iguales  $m_i = m$ ,  $i = 1, 2, 3$ , la cual conforma (en el equilibrio) un tri3ngulo rect3ngulo de lados  $a$  y  $\sqrt{2}a$ . Los enlaces entre las masas son representados por 3 constantes de acoplamiento  $k$  iguales. Los sistemas de referencia de cada masa ( $x_i, y_i$ ) respecto de sus posiciones de equilibrio y el sistema general ( $X, Y$ ) tienen la misma orientaci3n. El sistema general tiene origen en la posici3n de equilibrio 1, y las desviaciones de cada part3cula respecto de sus posiciones de equilibrio son denotadas respectivamente por  $\eta_i$ , como se muestra en la Fig. 1.

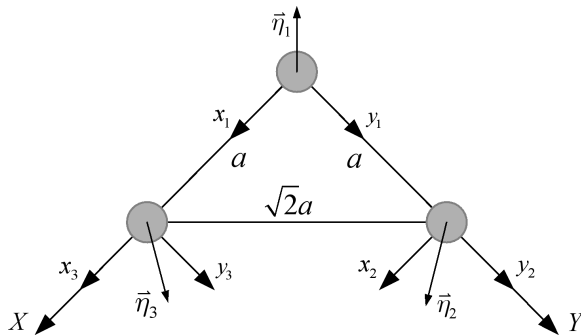


Figura 1 - Esquema de mol3cula triat3mica compuesta por tres masas iguales denotadas por  $m_1$ ,  $m_2$ , y  $m_3$ , cuyos enlaces son representados por 3 constantes de acoplamiento  $k$  iguales. Y correspondientes sistemas de coordenadas denotados por  $x_i$  y  $y_i$ .

### 2.1. Oscilaciones peque1as con varios grados de libertad

La teor3a de los osciladores libres de un sistema con  $n$  grados de libertad es an3loga a la de los osciladores

lineales con un grado de libertad. A trav3s de la formulaci3n de Lagrange para peque1as oscilaciones se encuentra que las ecuaciones de movimiento del sistema est3n dadas por [8]

$$\sum_k m_{ik} \ddot{x}_k + \sum_k k_{ik} x_k = 0 \quad (1)$$

Estas ecuaciones constituyen un sistema de  $n$  ( $i = 1, 2, 3, \dots, n$ ) ecuaciones diferenciales lineales homog3neas con coeficientes constantes, esto es; una ecuaci3n diferencial para cada grado de libertad. Para resolver las ecuaciones diferenciales involucradas, se proponen soluciones de la forma

$$x_k = A_k e^{i\omega t} \quad \vee \quad x_k = A_k \cos \omega t \quad (2)$$

Sustituyendo estas soluciones en la expresi3n (1), se encuentra que para que el sistema tenga soluciones distintas de cero (no triviales), el determinante de sus coeficientes debe anularse

$$|k_{ik} - \omega^2 m_{ik}| = 0. \quad (3)$$

La cual es la llamada ecuaci3n caracter3stica de grado  $n$  respecto a  $\omega^2$ , y que en general tiene  $n$  ra3ces reales y positivas denotadas por  $\omega_i^2$  ( $i = 1, 2, 3, \dots, n$ ). De esta forma, las frecuencias propias del sistema corresponden a las magnitudes  $\omega_i$ .

## 3. Desarrollo y resultados

### 3.1. Mol3cula triat3mica triangular

Utilizando el formalismo propuesto anteriormente para la mol3cula triat3mica de la Fig. 1, la energ3a cin3tica est3 dada por

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{x}_3^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{y}_2^2 + \dot{y}_3^2). \quad (4)$$

La energ3a potencial de los enlaces se puede escribir en la forma

$$V = \frac{1}{2} k \{ (|\mathbf{r}_{12} + \boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_1| - a)^2 + (|\mathbf{r}_{13} + \boldsymbol{\eta}_3 - \boldsymbol{\eta}_1| - a)^2 + (|\mathbf{r}_{12} + \boldsymbol{\eta}_2 - \mathbf{r}_{13} - \boldsymbol{\eta}_3| - \sqrt{2}a)^2 \}, \quad (5)$$

donde  $\boldsymbol{\eta}_i$  representan las desviaciones respecto de las posiciones de equilibrio, y  $\mathbf{r}_{ij}$  es el vector que va desde el sistema de referencia  $i$  al  $j$ . Despreciando los t3rminos cuadr3ticos de  $\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j$ , los t3rminos en valor absoluto de la ecuaci3n (5) pueden ser reescritos como

$$|\mathbf{r}_{12} + \boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_1| = r_{12} \left( 1 + \frac{2\hat{u}_{12} \cdot (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_1)}{r_{12}} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

$$|\mathbf{r}_{13} + \boldsymbol{\eta}_3 - \boldsymbol{\eta}_1| = r_{13} \left( 1 + \frac{2\hat{u}_{13} \cdot (\boldsymbol{\eta}_3 - \boldsymbol{\eta}_1)}{r_{13}} \right)^{1/2}, \quad (7)$$

$$|\mathbf{r}_{12} + \boldsymbol{\eta}_2 - \mathbf{r}_{13} - \boldsymbol{\eta}_3| = |\mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_{13}| \left( 1 + \frac{2\hat{u}_{23} \cdot (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_3)}{|\mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_{13}|} \right)^{1/2}, \quad (8)$$

donde hemos considerado que  $(\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j)^2 \simeq 0$ , ya que los términos  $(\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j)^2$  son despreciables frente a los términos  $r_{ij}^2$ ,  $2\mathbf{r}_{ij} \cdot |\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j|$ , y  $2(\mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_{13}) \cdot (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_3)$ . Ahora, considerando que  $\sqrt{1+\alpha} \simeq 1 + (1/2)\alpha$  para  $-1 \leq \alpha \leq 1$  (despreciando términos mayores o iguales a los cuadráticos de  $\alpha$ ), las expresiones (6), (7) y (8) pueden reescribirse nuevamente como

$$|\mathbf{r}_{12} + \boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_1| = r_{12} \left( 1 + \frac{\hat{u}_{12} \cdot (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_1)}{r_{12}} \right), \quad (9)$$

$$|\mathbf{r}_{13} + \boldsymbol{\eta}_3 - \boldsymbol{\eta}_1| = r_{13} \left( 1 + \frac{\hat{u}_{13} \cdot (\boldsymbol{\eta}_3 - \boldsymbol{\eta}_1)}{r_{13}} \right), \quad (10)$$

$$|\mathbf{r}_{12} + \boldsymbol{\eta}_2 - \mathbf{r}_{13} - \boldsymbol{\eta}_3| = |\mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_{13}| \left( 1 + \frac{\hat{u}_{23} \cdot (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_3)}{|\mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_{13}|} \right). \quad (11)$$

Ahora, como  $\mathbf{r}_{12} = a\hat{y}$  es el vector que va desde la posición de equilibrio 1 a 2,  $\mathbf{r}_{13} = a\hat{x}$  es el vector de 1 a 3, y  $\mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_{13} = a(\hat{y} - \hat{x})$  es el vector desde el sistema 3 al 2, y consiguientemente  $\hat{u}_{12} = \hat{y}$ ,  $\hat{u}_{13} = \hat{x}$  y  $\hat{u}_{23} = (1/\sqrt{2})(\hat{y} - \hat{x})$  las expresiones (9), (10) y (11) se reducen finalmente a

$$|\mathbf{r}_{12} + \boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_1| = a + \hat{u}_{12} \cdot (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_1), \quad (12)$$

$$|\mathbf{r}_{13} + \boldsymbol{\eta}_3 - \boldsymbol{\eta}_1| = a + \hat{u}_{13} \cdot (\boldsymbol{\eta}_3 - \boldsymbol{\eta}_1), \quad (13)$$

$$|\mathbf{r}_{12} + \boldsymbol{\eta}_2 - \mathbf{r}_{13} - \boldsymbol{\eta}_3| = \sqrt{2}a + \hat{u}_{23} \cdot (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_3). \quad (14)$$

Reemplazando las expresiones (12), (13) y (14) en el potencial  $V$  (ecuación (5)), encontramos

$$V = \frac{1}{2}k \left\{ (\hat{u}_{12} \cdot (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_1))^2 + (\hat{u}_{13} \cdot (\boldsymbol{\eta}_3 - \boldsymbol{\eta}_1))^2 + (\hat{u}_{23} \cdot (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_3))^2 \right\}, \quad (15)$$

el cual finalmente se reduce a

$$V = \frac{1}{2}k \left\{ (y_2 - y_1)^2 + (x_3 - x_1)^2 + \frac{1}{2}(y_2 - y_3 + x_3 - x_2)^2 \right\}. \quad (16)$$

El Lagrangiano del sistema es  $L = T - V$ . A través de las ecuaciones de Lagrange [9, 10], obtenemos las ecuaciones diferenciales de movimiento

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_1 + k(x_1 - x_3) &= 0 \\ m\ddot{x}_2 + k\left(\frac{1}{2}x_1 - \frac{1}{2}x_3 - \frac{1}{2}y_2 + \frac{1}{2}y_3\right) &= 0 \\ m\ddot{x}_3 + k\left(-x_1 - \frac{1}{2}x_2 + \frac{3}{2}x_3 + \frac{1}{2}y_2 - \frac{1}{2}y_3\right) &= 0 \\ m\ddot{y}_1 + k(y_1 - y_2) &= 0 \\ m\ddot{y}_2 + k\left(-\frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{2}x_3 - y_1 + \frac{3}{2}y_2 - \frac{1}{2}y_3\right) &= 0 \\ m\ddot{y}_3 + k\left(\frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{2}x_3 - \frac{1}{2}y_2 + \frac{1}{2}y_3\right) &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

Proponiendo soluciones oscilatorias de la forma  $A_i \cos(\omega t)$  para  $x_i$  e  $y_i$  se obtiene el siguiente determinante

$$\begin{vmatrix} (k - m\omega^2) & 0 & -k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (k/2 - m\omega^2) & -k/2 & 0 & -k/2 & k/2 \\ -k & -k/2 & (3k/2 - m\omega^2) & 0 & k/2 & -k/2 \\ 0 & 0 & 0 & (k - m\omega^2) & -k & 0 \\ 0 & -k/2 & k/2 & -k & (3k/2 - m\omega^2) & -k/2 \\ 0 & k/2 & -k/2 & 0 & -k/2 & (k/2 - m\omega^2) \end{vmatrix} = 0. \quad (18)$$

Desarrollando el determinante se obtiene

$$\omega^6 (m\omega^2 - 2k) (m^2\omega^4 - 4km\omega^2 + 3k^2) = 0. \quad (19)$$

cuyas soluciones son

$$\begin{aligned} \omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = 0, \quad \omega_4 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \\ \omega_5 = \sqrt{\frac{2k}{m}}, \quad \omega_6 = \sqrt{\frac{3k}{m}}. \end{aligned} \quad (20)$$

En este punto de la resolución podríamos seguir con el desarrollo analítico para encontrar las amplitudes de vibración de la molécula triatómica triangular. Además, quitando el enlace inferior (entre los átomos 2 y 3) podríamos simplificar el análisis –quedando una molécula similar a la del agua–. En vez de ello, analizaremos la molécula triatómica lineal, la cual tiene una simetría similar a la molécula triangular sin el enlace entre los átomos 2 y 3 (enlace central), la cual desde el punto de vista de la matemática, es más fácil de resolver. De este modo compararemos los modos vibracionales de ambas moléculas.

### 3.2. Molécula triatómica lineal simétrica

En la Fig. 2 se representa una molécula triatómica lineal. En la configuración de equilibrio hay dos átomos de masa  $m$  situados simétricamente a ambos lados de la masa  $M$ . Los grados de libertad (desviaciones respecto de sus posiciones de equilibrio) están representados por  $x_1, x_2$  y  $x_3$ .

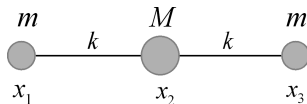


Figura 2 - Modelo de la molécula triatómica lineal.

El Lagrangiano del sistema esá dado por

$$L = \frac{1}{2}m (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{1}{2}M\dot{x}_2^2 - \frac{1}{2}k(x_2 - x_1)^2 - \frac{1}{2}k(x_3 - x_2)^2. \quad (21)$$

Utilizando las ecuaciones de Lagrange se obtienen 3 ecuaciones diferenciales de movimiento dadas por

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_1 - k(x_2 - x_1) &= 0, \\ m\ddot{x}_3 + k(x_3 - x_2) &= 0, \\ M\ddot{x}_2 + 2kx_2 - k(x_1 + x_3) &= 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Proponiendo soluciones de la forma  $x_i = A_i \cos(\omega t)$ , se obtiene el siguiente determinante

$$\begin{vmatrix} (k - m\omega^2) & -k & 0 \\ -k & (2k - M\omega^2) & -k \\ 0 & -k & (k - m\omega^2) \end{vmatrix} = 0. \quad (23)$$

Desarrollando el determinante se obtiene

$$\omega^2 (k - m\omega^2) (mM\omega^2 - k(M + 2m)) = 0, \quad (24)$$

de donde se encuentra que las frecuencias propias están dadas por

$$\omega_1 = 0, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{k}{m} \left(1 + \frac{2m}{M}\right)}. \quad (25)$$

La primera frecuencia propia  $\omega_1 = 0$  se debe al movimiento de traslación de la molécula en forma rígida sobre su propio eje sin cambio de su energía potencial. Luego, como no hay fuerza restauradora, entonces la frecuencia de vibración es nula. La frecuencia  $\omega_2 = \sqrt{k/m}$  corresponde a la frecuencia de oscilación de un sistema masa-resorte (oscilador armónico simple), por lo cual para este modo de vibración sólo intervienen los átomos que están ubicados en los extremos, permaneciendo el átomo central de masa  $M$  en reposo. Entonces, sólo en el tercer modo de vibración,  $\omega_3$ , el átomo central de masa  $M$  puede participar en la oscilación. Por otro lado, al trabajar con los vectores propios correspondientes se verifica lo establecido anteriormente respecto de las frecuencias propias. Al considerar coordenadas normales del tipo  $x_k = A_k e^{(i\omega t + \phi)}$ , se encuentra el sistema de ecuaciones

$$(k - m\omega_k^2) A_{1k} - kA_{2k} = 0, \quad (26)$$

$$-kA_{1k} + (2k - M\omega_k^2) A_{2k} - kA_{3k} = 0, \quad (27)$$

$$-kA_{2k} + (k - m\omega_k^2) A_{3k} = 0. \quad (28)$$

Que entrega los coeficientes de los modos normales de vibración. La condición de normalización está dada por

$$m(A_{1k}^2 + A_{3k}^2) + MA_{2k}^2 = 1. \quad (29)$$

Sí  $\omega_1 = 0$ , entonces de (26) y (28) se obtiene que  $A_{11} = A_{21} = A_{31}$ , mostrando la naturaleza traslacional del movimiento, esquematizado en la Fig. 3 (a). Sustituyendo estos coeficientes en la ecuación (29) encontramos que

$$A_{11} = A_{21} = A_{31} = \frac{1}{\sqrt{2m + M}}. \quad (30)$$

Para  $\omega_2 = \sqrt{k/m}$ , se tiene que  $(k - m\omega_k^2) = 0$ , y de (26), (27), y (28) se obtiene que  $A_{22} = 0$  y que  $A_{12} = -A_{32}$ , luego, de (29) se encuentra que sus valores están dados por

$$A_{12} = \frac{1}{\sqrt{2m}}, \quad A_{22} = 0, \quad \text{y} \quad A_{32} = -\frac{1}{\sqrt{2m}}. \quad (31)$$

En este caso el átomo central se encuentra en reposo, y los dos átomos de los extremos vibran opuestamente, tal como se muestra en la Fig. 3 (b). Para  $\omega_3$ , siguiendo el mismo procedimiento anterior se obtiene

$$A_{13} = A_{33} = \frac{1}{\sqrt{2m \left(1 + \frac{2m}{M}\right)}},$$

y

$$A_{23} = \frac{-2}{\sqrt{2M \left(2 + \frac{M}{m}\right)}}. \quad (32)$$

En este caso los dos átomos ubicados en los extremos vibran con la misma amplitud, mientras que el central oscila en oposición de fase con los otros dos y con diferente amplitud, tal como se representa en la Fig. 3 (c).

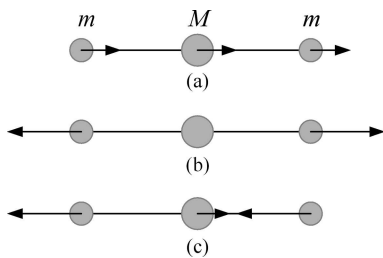


Figura 3 - Modos normales longitudinales de la molécula triatómica lineal: (a) movimiento de traslación, (b) modo vibracional simétrico con el átomo central en reposo, y (c) modo vibracional con el átomo central en oposición de fase y diferente amplitud de oscilación.

### 3.3. Relación entre los dos casos estudiados

La simetría entre la molécula lineal y la triangular (esta última sin el enlace central como se muestra en la Fig. 4) es evidente, por lo cual es fácil realizar la comparación de los modos normales de vibración de ambos sistemas. Si en la molécula triatómica lineal (L) de la Fig. 2 (Ec. (25)) consideramos las masas iguales, encontramos que las frecuencias son iguales a las frecuencias obtenidas para la molécula triatómica triangular (T) de la Fig. 1 (Ec. (20)). Igualando las masas encontramos que

$$\omega_{1,2,3(T)} = \omega_{1(L)} = 0, \quad (33)$$

$$\omega_{4(T)} = \omega_{2(L)} = \sqrt{k/m}, \quad (34)$$

$$\omega_{6(T)} = \omega_{3(L)} = \sqrt{3k/m}. \quad (35)$$

Por lo cual se deduce que los modos normales de vibración de la molécula triangular de la Fig. 1 - al quitar el acoplamiento entre las masas  $m_2$  y  $m_3$  - son similares al de la molécula lineal de la Fig. 3, tal como se muestra en la Fig. 4.

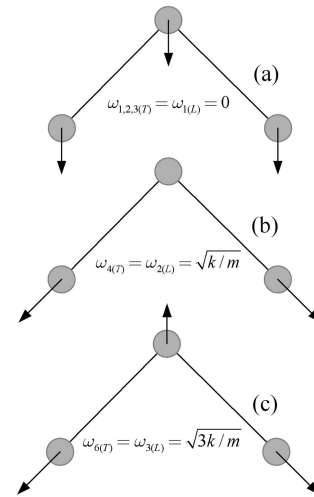


Figura 4 - Modos normales de la molécula triatómica triangular: (a) movimiento de traslación, (b) modo vibracional simétrico con el átomo central en reposo, y (c) modo vibracional asimétrico con el átomo central en oposición de fase.

## 4. Conclusiones

A través de la teoría de oscilaciones pequeñas es posible resolver de forma analítica la dinámica de oscilación de una molécula triatómica con tres y dos acoplamientos. La solución de la molécula lineal otorga soluciones similares a la de la molécula triangular con dos enlaces, esto es mostrado al comparar las frecuencias normales de ambos sistemas, después de quitar el enlace central en la molécula triangular (e igualar las masas en la molécula lineal). De esta forma se muestra que el problema de encontrar los modos vibracionales en un caso general complicado, puede ser reducido completamente a un problema lineal más simple, cuyos modos normales son más fáciles de resolver. De esta manera se muestra que podemos recurrir a la simetría entre diferentes configuraciones geométricas para soslayar las dificultades de cálculo en los casos más complicados.

Se muestra que es posible incluir en los textos de nivel de pregrado la resolución explícita de los modos de vibración de moléculas con configuraciones geométricas distintas a las lineales pero manteniendo una simetría con estas últimas; de una manera accesible a los estudiantes a través de las mismas herramientas mostradas en estos textos de pregrado (teoría de oscilaciones pequeñas), enseñándoles a los estudiantes a enfrentar un problema físico a través de distintas perspectivas de resolución.

## Referencias

- [1] F. Pittaway, L.O. Paz-Borbón, R.L. Johnston, H. Arslan, R. Ferrando, Ch. Mottet, G. Barcaro and A. Fortunelli, *J. Phys. Chem. C* **113**, 9141 (2009).
- [2] F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).

- [3] B. Shan, L. Wang, S. Yang, J. Hyun, N. Kapur, Y. Zhao, J.B. Nicholas and K. Cho, *Phys. Rev. B* **80**, 035404 (2009).
- [4] M. Sánchez-Castellanos, R. Lemus, M. Carvajal, F. Pérez-Bernal, *Journal of Molecular Spectroscopy* **253**, 1 (2009).
- [5] T. Sedivcová-Uhlíková, H.Y. Abdullah and N. Manini, *J. Phys. Chem. A* **113**, 6142 (2009).
- [6] J.K. Basu, S. Hazra and M.K. Sanyal, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4675 (1999).
- [7] B. Kim, V. Putkaradze and T. Hikiyara, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 215502 (2009).
- [8] H. Goldstein, *Mecánica Clásica* (Editorial Reverté, Barcelona, 1990).
- [9] G.J. Sussman and J. Wisdom, *Structure and Interpretation of Classical Mechanics* (The MIT Press, Cambridge, 2001).
- [10] K. Symon, *Mechanics* (Addison Wesley, Massachusetts, 1965).