TRAB
II2005
B4

UNIVERSIDAD CATÓLICA
"ANDRÉS BELLO"

Universidad Católica Andrés Bello
BIBLIOTECA
Caracas

UNA APLICACIÓN DEL LAGRANGIANO DE PEQUEÑAS OSCILACIONES. CASO: MOLÉCULA TRIATÓMICA

(Trabajo de Ascenso para optar a la categoría de Profesor Agregado)

Autor: Prof. Jorge Benedicto

Caracas, Julio de 2005

A mis alumnos de la Facultad de Ingeniería.

INDICE GENERAL

Pp.

RESUMEN iv

INTRODUCCIÓN 01

CAPITULO

I FORMALISMO DE LAGRANGE 04

II LAGRANGIANO DE PEQUEÑAS OSCILACIONES 12

III FRECUENCIA DE OSCILACIÓN: MOLECULA TRIATOMICA 22

IV CONCLUSIONES 27

REFERENCIAS 33

ANEXOS

A Cálculo de los V_{ij} 35

B Matriz, Determinante y Ecuación Secular 57

UNIVERSIDAD CATÓLICA "ANDRÉS BELLO"

UNA APLICACIÓN DEL LAGRANGIANO DE PEQUEÑAS OSCILACIONES. CASO: MOLÉCULA TRIATÓMICA

Autor: Prof. Jorge Benedicto
Fecha: Julio 2005

RESUMEN

Se inicia con una revisión completa del formalismo de Lagrange para contextualizar el problema desde el punto de vista teórico, también para introducir los términos y definiciones *ad-hoc* requeridos en la manipulación la técnica de Pequeñas Oscilaciones. Seguidamente se presenta el desarrollo matemático propio de las Pequeñas Oscilaciones que servirá de guía para la obtención de las frecuencias de oscilación de una molécula triatómica específica. Se establecen las condiciones de validez y las aproximaciones pertinentes en nuestro estudio, para posteriormente proponer extensiones a otras moléculas más complejas así como también variantes y/o simplificaciones de nuestro modelo. Se hace uso del software matemático Scientific Notebook para el cálculo, extremadamente farragoso, de los autovalores y de los V_{ij} asociados con cada grado de libertad.

Descriptores: Formalismo Lagrangiano, Lagrangiano de pequeñas oscilaciones, autovalores, serie de potencias.

INTRODUCCIÓN

En la época preinformática la introducción de un Lagrangiano para el cálculo de las frecuencias de resonancia de diferentes moléculas, no pasaba de ser un simple ejercicio académico donde la principal fortaleza radicaba en el valor del desarrollo teórico. Principalmente porque estaba sustentada en la formulación Lagrangiana de la mecánica la cual ya había cosechado éxitos en distintas áreas de la física.

Como afirma (Lanczos, C. 1974), uno de los más bellos ejemplos del poder de los métodos analíticos es la aplicación de las ecuaciones de Lagrange a la teoría de pequeñas oscilaciones alrededor de un estado de equilibrio estable. Lo más sorprendente de esta teoría es su gran generalidad. No importa cuan simple o cuan complicado sea el sistema a estudiar, su evolución temporal cerca de un estado de equilibrio es siempre describible en los mismos términos. Una profunda desventaja se presenta cuando el número de grados de libertad es grande, pues se hace prácticamente imposible el cálculo de las frecuencias de oscilación del sistema.

También Goldstein (1992) asegura que mucho ingenio matemático es el que ha de ponerse en juego cuando el numero de grados de libertad aumenta y por consiguiente el orden del determinante de la matriz secular también. Mucho de este ingenio ameritaba profundos conocimientos en la Teoría de Grupos de Simetría cuya finalidad estriba en reducir el orden del determinante, bien sea por la vía de la reducción de grados de libertad o bien por la vía de hallar matrices bloque equivalentes a la matriz secular original:

"La teoría de los grupos de simetría se ha aplicado con gran éxito en la diagonalización del gran determinante secular en bloques menores que puedan que se puedan diagonalizar por separado". Goldstein, (1992).

Si bien la aplicación de la teoría de grupos de simetría encierra de por si bastante complejidad teórica, en la época preinformática, cuando había que

resolver el problema a mano, todo método que redujera el volumen de los cálculos era naturalmente objeto de interés y estudio intenso.

Hoy en día, con el uso de softwares matemáticos, parece que la tendencia es resolver el problema "a lo bestia" afirma (Goldstein, (1992): calcular las frecuencias de resonancia a partir de la matriz secular tal y como se obtiene al aplicar el Lagrangiano de pequeñas oscilaciones; sin hacer uso de simplificación alguna ni consideraciones de simetría. Ejemplo de lo cual lo constituye el presente trabajo.

Esta parece ser la dirección que en el futuro tomen los cálculos de las frecuencias de oscilación en los problemas de Físico-Química.

Es bien conocido el poderío y versatilidad que ofrece el formalismo Lagrangiano en el abordaje de diversos problemas en distintas áreas de la física. En el presente trabajo se muestra una técnica, basada en dicho formalismo, para calcular las frecuencias de oscilación de una molécula triatómica, siempre y cuando estás oscilaciones se presenten en las vecindades de un punto de equilibrio. Es decir, estamos interesados en aquellas configuraciones del sistema cercanas a la configuración de equilibrio. Dicha técnica nos proporcionará una expresión para el Lagrangiano de Pequeñas Oscilaciones el cuál aplicaremos a un caso particular. Este será uno de los objetivos del presente trabajo.

El otro objetivo es proporcionar material específico para el curso de Mecánica II, perteneciente al Departamento de Física de la Facultad de Ingeniería. En este curso se contempla, entre otros tópicos, un tema dedicado al formalismo de Lagrange.

En cuanto a la nomenclatura y uso de caracteres matemáticos nos ajustamos al de libros como Análisis Matemático, Volumen 2 (Haaser, La Salle y Sullivan 1973) por considerar que va más allá de los textos usuales de Cálculo; y Mecánica Clásica (Goldstein 1992) por considerarlo el texto de Mecánica Analítica más actualizado y referenciado hoy por hoy.

Desde el punto de vista metodológico, se trata de una investigación eminentemente documental y para la estructuración del trabajo se han seguido las normas internacionales de la APA así como de la UPEL-Venezuela.

Este trabajo está organizado como sigue:

- En el Capítulo I se presenta una breve revisión acerca del Formalismo de Lagrange que culmina con la expresión de la función de Lagrange (Lagrangiana) y de las correspondientes ecuaciones del movimiento (Ecuaciones de Lagrange).

- En el Capítulo II se presenta el desarrollo teórico completo y en detalle para el cálculo del Langragiano para Pequeñas Oscilaciones. En favor de la claridad en la exposición, dicha deducción se hace para un sistema con dos grados de libertad y la generalización a n-grados de libertad es inmediata en virtud de los resultados obtenidos.

- En el Capítulo III se calculan de manera explícita las frecuencias de oscilación de una molécula triatómica, de configuración específica, utilizando la técnica desarrollada en el Capítulo II. En el capítulo IV se presentan las conclusiones y se proponen generalizaciones que plantean posibles variantes para abordar el mismo problema pero aplicado a otras moléculas.

- En los Apéndices A y B se muestran detalladamente los cálculos requeridos para la obtención de los autovalores y los V_{ij}. Con este fin, se hizo uso del software matemático Scientific Notebook por cuanto es el utilizado en los cursos de Física General I, Mecánica II, Cálculo III y Cálculo IV de esta Facultad

- Culminamos con lo que constituye una muestra de la bibliografía consultada.

CAPÍTULO I

FORMALISMO DE LAGRANGE

En realidad, la formulación que hace Lagrange de la mecánica (en lo referente a sistemas standard) no añade nada nuevo a la física que interviene, sino que con ella sólo obtenemos otro método para trabajar con los principios físicos ya establecidos. Aún así, sus métodos han demostrado ser más potentes y de notable sencillez para la resolución de problemas, sobretodo de tipo práctico, como el que nos ocupa en el presente trabajo.

En este nuevo formalismo la ecuación de evolución del sistema toma la forma

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s}\right)-\frac{\partial L}{\partial q_s}=0 \qquad (1.1)$$

donde las q´s representan un conjunto de coordenadas independientes, llamadas coordenadas generalizadas y L es una función escalar que depende de las q´s, $\dot{q}$´s y eventualmente de t. Dicha función recibe el nombre de Lagrangiano del sistema. Este conjunto de coordenadas generalizadas nos permite definir de manera única el estado dinámico del sistema, y que al introducirlas en un problema dado, estamos incorporando de una vez, las restricciones que puedan existir sobre el movimiento del mismo. Al número de coordenadas generalizadas se le denomina grados de libertad.

El espacio subtendido por el conjunto de coordenadas generalizadas recibe el nombre de espacio de configuraciones y su dimensionalidad está dada por el número de grados de libertad.

Dentro de toda la gama de restricciones al movimiento ocupan un lugar privilegiado (por ser las que aparecen en la mayoría de los casos de interés, por ser susceptibles de un tratamiento sistemático y porque siempre van a permitir la obtención de un sistema de coordenadas generalizadas que contenga implícitamente las condiciones de ligadura) aquellas que reciben el nombre de holónomas y pueden ser expresadas como igualdades entre las coordenadas, es decir

$$\phi(q_1, q_2, \ldots, q_n; t) = 0 \qquad (1.2)$$

Desde el punto de vista físico, estas restricciones al movimiento del sistema, pueden manifestarse en forma de fuerzas entre los elementos constitutivos del mismo y reciben el nombre de fuerzas de ligadura (Ruggeri, 1984).

Aunque parezca trivial, es importante notar que (1.1) no es en ningún sentido un conjunto de ecuaciones diferenciales para L. El Lagrangiano es una función dada con ayuda de la cual encontramos las q´s.

Las ecuaciones de Lagrange constituyen un conjunto de n ecuaciones diferenciales de segundo orden que pueden ser escritas en la forma

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_m} \ddot{q}_m = G_m(q, \dot{q}; t) \qquad (1.3)$$

donde las G_m son funciones conocidas si el Lagrangiano lo es (Saletan-Cromer, 1971).

Si se da el caso en el cual

$$\det\left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_m}\right] \neq 0 \qquad (1.4)$$

Entonces estamos en presencia de un Lagrangiano tipo Standard, que siguiendo la terminología usada por Sudarshan y Mukunda (1974), es aquel donde uno puede resolver las aceleraciones $\ddot{q}_i$ en términos de las q´s y las $\dot{q}'s$. En el caso de un sistema en el cual no se verifique (4), por ejemplo, un Lagrangiano lineal en las $\dot{q}'s$, el formalismo de Lagrange es insuficiente.

Aunque según Goldstein (1992), "... estos casos hay que evitarlos como si fuera una plaga..." (p. 441), se han ideado otras formulaciones de la mecánica (Dirac, 1964) que contempla los casos <u>no-standard</u> de manera sistemática.

Cuando el sistema es conservativo, existe una prescripción para construir Lagrangianos standards. En estos casos estará dado por

$$L\left(q_s, \dot{q}_s; t\right) = T\left(q_s, \dot{q}_s; t\right) - V(q_s, t) \qquad (1.5)$$

donde T es la energía cinética y V es el potencial escalar del cual derivan todas las fuerzas (salvo las de ligadura), y que además debe ser función exclusivamente de la posición y eventualmente del tiempo (sistemas monógenos conservativos. Lanczos, 1974).

Esta condición no es necesaria, afirman Corben y Sthele (1994), ya que también existe un análogo a (1.5) para aquellas fuerzas Q_s^* que deriven de

un potencial generalizado de la forma $V^*(q_s, q_s; t)$, siempre y cuando puedan expresarse de acuerdo con

$$Q_s^* = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial V^*}{\partial \dot{q}_s}\right) - \frac{\partial V^*}{\partial q_s} \qquad (1.6)$$

En este caso, el Lagrangiano está dado por:

$$L\left(q_s, \dot{q}_s; t\right) = T\left(q_s, \dot{q}_s; t\right) - V(q_s, t) - V^*(q_s, \dot{q}_s; t) \qquad (1.7)$$

Desde el punto de vista de la manipulación matemática de la función L, y como se apuntó anteriormente, las q´s forman un conjunto de coordenadas independientes. Pues bien, en la formulación Lagrangiana subyace el hecho de que las q´s junto con las $\dot{q}'s$ también se toman como independientes en el sentido (Barger-Olsson, 1995)

$$\frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = 0 \qquad (1.8)$$

aunque no en el sentido de que las velocidades son siempre derivadas temporales de las coordenadas (Sudarshan-Mukunda, 1974), es decir

$$\dot{q}(t) = \frac{dq(t)}{dt} \qquad (1.9)$$

Por otra parte, el carácter escalar del Lagrangiano nos permite afirmar que es invariante (así como también sus naturaleza no-standard) frente a cambios de coordenadas en general, contengan o no el tiempo (transformaciones puntuales: Q=Q(q;t)). En el mismo orden de ideas, el

carácter covariante de las ecuaciones del movimiento de Lagrange nos permite asegurar que las (1.1) no cambian su forma ante estos cambios de coordenadas (Ruggeri, 1984).

La obtención de las ecuaciones del movimiento de Lagrange se alcanza, entre otras formas, a través de dos principios variacionales. Uno de carácter diferencial: principio de D´Alembert; y el otro de carácter integral como lo es el principio de Hamilton.

D´Alembert, para establecer su principio, toma como guía otro principio diferencial que, para el caso de la Estática, representa una caracterización alternativa más ventajosa que la Newtoniana del estado de equilibrio de un sistema mecánico. Dicho principio se conoce con el nombre de principio de los trabajos virtuales y establece como condición de equilibrio estático que

$$\delta W = \sum_i \vec{F}_i . \delta \vec{r}_i = 0 \quad (1.10)$$

donde $\vec{F}_i$ representa la resultante de todas las fuerzas sobre la i-ésima partícula y los $\delta \vec{r}$ son desplazamientos virtuales arbitrarios del sistema.

Es una cualidad y ventaja de esta concepción acerca del equilibrio de un sistema, que puedan ser eliminadas las fuerzas de ligadura del contexto de la teoría. Para ello basta tomar desplazamientos virtuales que no violen las restricciones al movimiento, logrando así que en (1.10) las $\vec{F}_i$ representen únicamente las fuerzas aplicadas.

Extendiendo este principio al caso de un sistema en movimiento, obtenemos como condición de equilibrio dinámico (Konopinsky, 1969).

$$\delta W = \sum_i (\vec{F}_i - \vec{P}_i) . \delta \vec{r}_i = 0 \quad (1.11)$$

donde las $\vec{F}_i$ representan una vez más las fuerzas aplicadas y $\vec{P}_i$ las fuerzas de inercia o reacciones al movimiento.

La ecuación (1.11) es la expresión matemática del principio de D´Alembert que como se afirma en Ruggeri (1984), es el único nuevo postulado de la mecánica clásica introducido con posterioridad a Newton y no es más que una generalización del principio de acción y reacción.

Este principio puede considerarse como una remembranza Aristotélica, de aquel que establece: el todo es suma de partes; y que en el contexto de la mecánica permite asumir el movimiento como una sucesión de estados de equilibrio instantáneo.

El programa standarizado (Synge y Griffitd, 1965; Sudarshan y Mukunda, 1974; Pardo, González y Bruque, 1975; Takwale y Puranik, 1979; Goldstein, 1992) para la obtención de las ecuaciones de Lagrange vía el principio de D´Alembert, en forma resumida, implica partir de la segunda ley de Newton; seguidamente introducen las coordenadas generalizadas que, por su carácter independiente para sistemas con ligaduras holónomas, nos conduce directamente a las ecuaciones de Lagrange.

Quizás más fundamental es el principio de Hamilton, ya que en ciertos casos, es condición necesaria y suficiente para las ecuaciones de Lagrange. Este carácter fundamental está dado por el hecho de que nos permite construir la mecánica de él, en vez de las ecuaciones de Newton(Goldstein, 1992).

A pesar de que la literatura es bastante extensa en lo referente a la deducción de las ecuaciones de Lagrange a partir del principio de Hamilton, presentamos la secuencia seguida en Sudarshan y Mukunda (1974), por ser quizás las más clara y concisa.

Estos autores en principio definen una funcional de la forma

$$\Phi[c] = \int_{t_1}^{t_2} L(q_s(t), \dot{q}_s(t); t)\,dt \qquad (1.12)$$

la cual denominan funcional de acción y L es el Lagrangiano del sistema. Seguidamente consideran un camino variado genérico C′ que difiere del verdadero C en infinetésimos de primer orden y, además, tiene variación nula en los extremos.

De esta forma se obtiene que los cambios de primer orden en la funcional de acción están dados por

$$\Delta\Phi = \Phi(c) - \Phi(c') = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_s \left(\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_s} \right) \delta q_s \quad (1.13)$$

Bajo estas condiciones el principio de Hamilton establece, que si C es la trayectoria real seguida por el sistema, entonces

$$\Delta\Phi = 0 \quad (1.14)$$

es decir la funcional de acción Φ es estacionaria y posiblemente tiene un extremo.

De este principio y de (1.14) obtenemos el siguiente resultado

$$\Delta\Phi = 0 \Leftrightarrow \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_s} = 0 \quad (1.15)$$

que según afirma Goldstein (1992), lo vamos a considerar el teorema más importante de la mecánica, ya que establece la total equivalencia (en sistemas con ligaduras holónomas) entre las ecuaciones de Lagrange y el principio de Hamilton.

Para culminar, no está demás señalar que, aún cuando los procedimientos expuestos anteriormente son válidos para sistemas con

ligaduras holónomas, existe la posibilidad de un tratamiento sistemático, también para ligaduras que sean no-holónomas, siempre y cuando se puedan expresar en la forma

$$\sum_k a_{lk} dq_k + a_{lt} dt = 0 \qquad (1.16)$$

es decir, una relación lineal entre las diferenciales de las q´s; donde las a_{lk} y a_{lt} son funciones de las q´s y del tiempo. Tal tratamiento involucra el uso de los llamados multiplicadores de Lagrange (Ruggeri, 1984).

Cualquier otro tipo de ligaduras no-holónomas requiere de técnicas ad hoc para su manipulación (Takwale y Puranik, 1979); es por ello que los aspectos más formales de la mecánica clásica se supone casi invariablemente que toda ligadura, si existe, es holónoma (Goldstein, 1992).

CAPÍTULO II

LAGRANGIANO DE PEQUEÑAS OSCILACIONES

Este capítulo lo iniciamos hallando una expresión para la energía potencial $V(q_i)$ la cual debe ser consistente con el hecho de que las oscilaciones respecto al punto de equilibrio deben considerarse sólo a la primera aproximación no nula. Seguidamente se expresa la energía cinética de manera apropiada para, por último, presentar explícitamente un Lagrangiano para Oscilaciones Pequeñas. Como se estableció en la introducción del presente trabajo se presenta el desarrollo matemático para un sistema con dos grados de libertad. Posteriormente y en virtud de la forma compacta de los resultados obtenidos, se hace la generalización a n grados de libertad.

Se ha omitido, con toda intención, las operaciones con índices así como también el convenio de suma de Einstein por considerar que puede oscurecer el propósito principal del trabajo a presentar.

Consideramos un potencial generalizado $V = V(q_1, q_2)$ conservativo y no dependiente explícitamente del tiempo, el cual tiene un mínimo en el punto (q_{10}, q_{20}) del espacio de configuraciones.

Decimos que (q_{10}, q_{20}) es un punto de equilibrio estable por cuanto cualquier pequeña perturbación del sistema respecto a ese punto sólo da lugar a un pequeño movimiento limitado alrededor de (q_{10}, q_{20}).

Al concluir este tema, demostraremos que el movimiento, bajo las condiciones anteriores, se reduce al de osciladores armónicos acoplados.

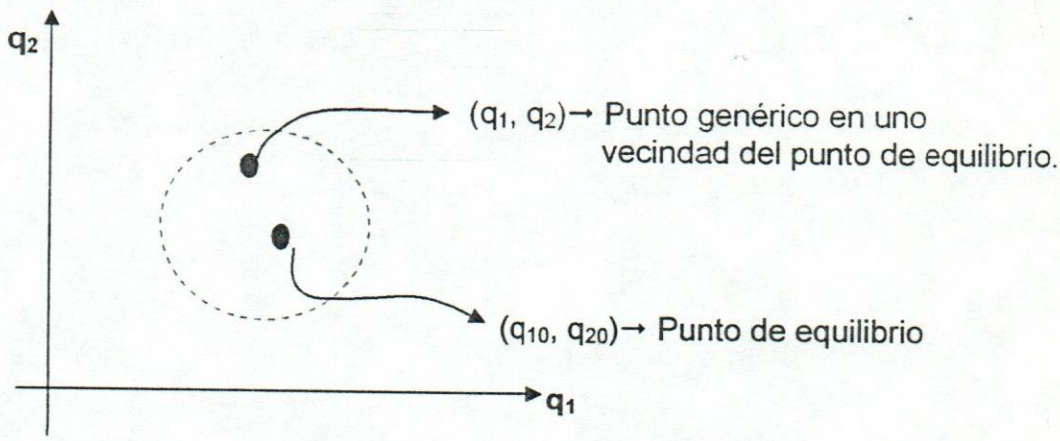
Desde el punto de vista matemático la condición de equilibrio se expresa así:

$$Q_i = \left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_{q_{i0}} = 0, \qquad i = 1, 2 \qquad (2.1)$$

la cual establece que las fuerzas generalizadas que actúan sobre el sistema se anulan en (q_{10}, q_{20}).

Sean q_1, q_2 las coordenadas de cualquier punto en una vecindad de (q_{10}, q_{20}), las cuales vienen dadas por:

$$q_1 = q_{10} + \eta_1$$
$$q_2 = q_{20} + \eta_2 \qquad (2.2)$$



Desarrollemos en Serie de Taylor el potencial $V(q_1, q_2)$ alrededor de (q_{10}, q_{20}) así:

$$V(q_1, q_2) = \sum_{k=0}^{h} \frac{1}{k!}[(q_1 - q_{10})D_1 + (q_2 - q_{20})D_2]^k V(q_{10}, q_{20}) + R(q_1, q_2) =$$

$$= \frac{1}{0!}[(q_1 - q_{10})D_1 + (q_2 - q_{20})D_2]^0 V(q_{10}, q_{20}) +$$

$$\frac{1}{1!}[(q_1 - q_{10})D_1 + (q_2 - q_{20})D_2]^1 V(q_{10}, q_{20}) + \qquad (2.3)$$

$$\frac{1}{2!}[(q_1 - q_{10})D_1 + (q_2 - q_{20})D_2]^2 V(q_{10}, q_{20}) +$$

$$\frac{1}{3!}[(q_1 - q_{10})D_1 + (q_2 - q_{20})D_2]^3 V(q_{10}, q_{20}) + \ldots + R(q_1, q_2)$$

entendiéndose que el operador D_i viene dado por $D_i = \frac{\partial}{\partial q_i}$ y que $R(q_1, q_2)$ es el residuo o resto en el desarrollo en Serie de Taylor que cumple con la condición de convergencia dada por $\lim_{(q_1, q_2) \to (q_{10}, q_{20})} R = (0,0)$

Como $q_1 - q_{10} = \eta_1$ y $q_2 - q_{20} = \eta_2$, escribimos este desarrollo en serie en términos de η_1, η_2

$$V(q_1, q_2) = \frac{1}{0!}[\eta_1 D_1 + \eta_2 D_2]^0 V(q_{10}, q_{20}) + \frac{1}{1!}[\eta_1 D_1 + \eta_2 D_2]^1 V(q_{10}, q_{20})$$

$$+ \frac{1}{2!}[\eta_1 D_1 + \eta_2 D_2]^2 V(q_{10}, q_{20}) + \frac{1}{3!}[\eta_1 D_1 + \eta_2 D_2]^3 V(q_{10}, q_{20}) \ldots + R \qquad (2.4)$$

Desarrollando los productos notables obtenemos:

$$V(q_1,q_2)=V(q_{10},q_{20})+\left[\left(\frac{\partial V}{\partial q_1}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_1+\left(\frac{\partial V}{\partial q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_2\right]$$

$$+\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial^2 V}{\partial^2 q_1}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_1^2+2\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_1\partial q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_1\eta_2+\left(\frac{\partial^2 V}{\partial^2 q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_2^2\right] \qquad (2.5)$$

$$+\frac{1}{6}\left[\left(\frac{\partial^3 V}{\partial^3 q_1}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_1^3+3\left(\frac{\partial^3 V}{\partial^2 q_1\partial q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_1^2\eta_2+3\left(\frac{\partial^3 V}{\partial q_1\partial^2 q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_1\eta_2^2+\left(\frac{\partial^3 V}{\partial^3 q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_2^3\right]+\ldots+R$$

En este desarrollo tenemos las siguientes condiciones:

a) El término de grado cero corresponde con la energía potencial en la posición de equilibrio, la cual ajustamos de forma tal que $V_{(q_{10},q_{20})}=0$

b) Los términos de grado uno (términos lineales) se anulan ya que en la posición de equilibrio

$$\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_{q_i=0}=0 \quad , \quad i = 1, 2$$

c) Los términos de grado dos (términos cuadráticos) constituyen la primera aproximación no nula de $V_{(q_1,q_2)}$. Los términos de orden superior son despreciables y el resto $R(q_1,q_2)$ cumple con la condición anteriormente expuesta, es decir, $\lim\limits_{(q_1,q_2)\to(q_{10},q_{20})} R=(0,0)$

Primera Aproximación de la Energía Potencial

$$V_{(q_1,q_2)} \approx \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial^2 V}{\partial^2 q_1}\right)_{(q_{10},q_{20})} \eta_1^2 + 2\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_1 \partial q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})} \eta_1\eta_2 + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial^2 q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})} \eta_2^2\right] \quad (2.6)$$

Para construir la energía cinética del sistema en coordenadas generalizadas, consideremos las siguientes ecuaciones de transformación:

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_1(q_1,q_2)$$

$$\vec{r}_2 = \vec{r}_2(q_1,q_2) \quad (2.7)$$

Los cuales no dependen explícitamente del tiempo y representan el cambio de coordenadas cartesianas a generalizadas.

Las velocidades generalizadas vendrán dadas por:

$$\vec{v}_1 = \frac{\overrightarrow{dr_1}}{dt} = \frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_1}\dot{q}_1 + \frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_2}\dot{q}_2$$

$$\vec{v}_2 = \frac{\overrightarrow{dr_2}}{dt} = \frac{\partial \vec{r}_2}{\partial q_1}\dot{q}_1 + \frac{\partial \vec{r}_2}{\partial q_2}\dot{q}_2 \quad (2.8)$$

y

$$v_1^2 = \vec{v}_1.\vec{v}_1 = \left(\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_1}\dot{q}_1 + \frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_2}\dot{q}_2\right)\left(\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_1}\dot{q}_1 + \frac{\partial \vec{r}_2}{\partial q_2}\dot{q}_2\right) =$$

$$\left(\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_1}\right)\dot{q}_1\dot{q}_1 + 2\left(\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_2}\right)\dot{q}_1\dot{q}_2 + \left(\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_2}.\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial q_2}\right)\dot{q}_2\dot{q}_2 \quad (2.9)$$

Análogamente

$$v_2^2 = \left(\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_1}\right)\dot{q}_1\dot{q}_1 + 2\left(\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_2}\right)\dot{q}_1\dot{q}_2 + \left(\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_2}.\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_2}\right)\dot{q}_2\dot{q}_2 \qquad (2.10)$$

Luego la energía cinética será

$$T = \frac{1}{2}m_1 v_1^2 + \frac{1}{2}m_2 v_2^2 =$$

$$\frac{1}{2}\left[\left(m_1\left(\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_1}\right) + m_2\left(\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_1}\right)\right)\dot{\eta}_1\dot{\eta}_1 + \right]$$

$$2\left(m_1\left(\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_2}\right) + m_2\left(\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_2}\right)\right)\dot{\eta}_1\dot{\eta}_2 + \qquad (2.11)$$

$$\left(m_1\left(\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_2}.\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_2}\right) + m_2\left(\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_2}.\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_2}\right)\right)\dot{\eta}_2\dot{\eta}_2$$

en la cual hemos usado que:

$$\dot{q}_1 = \dot{\eta}_1 \qquad \text{y} \qquad \dot{q}_2 = \dot{\eta}_2 \qquad (2.12)$$

Definamos:

M_{11} al coeficiente de $\dot{\eta}_1\dot{\eta}_1$: $m_1\left(\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_1}\right) + m_2\left(\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_1}\right)$ (2.13)

M_{12} al coeficiente de $\dot{\eta}_1\dot{\eta}_2$: $2\left(m_1\left(\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_2}\right) + m_2\left(\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_1}.\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_2}\right)\right)$ (2.14)

M_{22} al coeficiente de $\dot{\eta}_2\dot{\eta}_2$: $m_1\left(\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_2}.\frac{\partial \vec{r_1}}{\partial q_2}\right)+m_2\left(\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_2}.\frac{\partial \vec{r_2}}{\partial q_2}\right)$ (2.15)

Cada uno de estos coeficientes son a su vez funciones de las coordenadas generalizadas (q_1,q_2).

Al desarrollarlos en serie de Taylor alrededor de (q_{10},q_{20}) nos quedamos con el término de grado cero pues por definición la expresión de la energía cinética T ya es cuadrática en los η_i.

Así:

$$m_{11}(q_1, q_2) \approx m_{11}(q_{10}, q_{20})$$
$$m_{12}(q_1, q_2) \approx 2m_{12}(q_{10}, q_{20}) \qquad (2.16)$$
$$m_{22}(q_1, q_2) \approx m_{22}(q_{10}, q_{20})$$

Primera Aproximación de la Energía Cinética

$$T = \frac{1}{2}m_{11}\dot{\eta}_1\dot{\eta}_1 + m_{12}\dot{\eta}_1\dot{\eta}_2 + \frac{1}{2}m_{22}\dot{\eta}_2\dot{\eta}_2 \qquad (2.17)$$

Lagrangiano para Pequeñas Oscilaciones

$$L = \frac{1}{2}m_{11}\dot{\eta}_1\dot{\eta}_1 + m_{12}\dot{\eta}_1\dot{\eta}_2 + \frac{1}{2}m_{22}\dot{\eta}_2\dot{\eta}_2$$
$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial^2 q_1}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_1\eta_1 - \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_1 \partial q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})}\eta_1\eta_2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial^2 q_2}\right)\eta_1\eta_2 \qquad (2.18)$$

donde las coordenadas generalizadas son η_1, η_2

Para obtener las ecuaciones de evolución del sistema, sustituimos la Lagrangiana en las ecuaciones de Lagrange para obtener que

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_1}\right) - \dfrac{\partial L}{\partial \eta_1} = 0 & (2.19) \\[2ex] \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_2}\right) - \dfrac{\partial L}{\partial \eta_2} = 0 & (2.20) \end{cases}$$

es decir

$$\begin{cases} m_{11}\ddot{\eta}_1 + m_{12}\ddot{\eta}_2 + \left(\dfrac{\partial^2 V}{\partial^2 q_1}\right)_{(q_{10},q_{20})} \eta_1 + \left(\dfrac{\partial^2 V}{\partial q_1 \partial q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})} \eta_2 = 0 & (2.21) \\[2ex] m_{22}\ddot{\eta}_2 + m_{12}\ddot{\eta}_1 + \left(\dfrac{\partial^2 V}{\partial^2 q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})} \eta_2 + \left(\dfrac{\partial^2 V}{\partial q_1 \partial q_2}\right)_{(q_{10},q_{20})} \eta_1 = 0 & (2.22) \end{cases}$$

Introduciendo la notación

(2.23) $\quad m_{ij} = T_{ij}$ y $\dfrac{\partial^2 V}{\partial^2 q_1}$, $\dfrac{\partial^2 V}{\partial^2 q_2}$, $\dfrac{\partial^2 V}{\partial q_1 \partial q_2}$ por V_{ij}

apropiadamente; las ecuaciones del movimiento quedan:

$$\begin{cases} (T_{11}\ddot{\eta}_1 + V_{11}\eta_1) + (T_{12}\ddot{\eta}_2 + V_{12}\eta_2) = 0 & (2.24) \\ (T_{22}\ddot{\eta}_2 + V_{22}\eta_2) + (T_{21}\ddot{\eta}_1 + V_{21}\eta_1) = 0 & (2.25) \end{cases}$$

Donde, por la propia construcción, se cumple que:

$$T_{ij} = T_{ji} \quad \text{y} \quad V_{ij} = V_{ji}$$

En virtud del problema planteado ensayamos con soluciones de la forma:

$$\eta_1 = a_1 e^{-i\omega t} \quad \text{y} \quad \eta_2 = a_2 e^{-i\omega t}$$

Sustituyendo en el último sistema de ecuaciones, cancelando y arreglando términos obtenemos:

$$\begin{aligned} (V_{11} - T_{11}\omega^2)a_1 + (V_{12} - T_{12}\omega^2)a_2 = 0 \\ (V_{21} - T_{21}\omega^2)a_1 + (V_{22} - T_{22}\omega^2)a_2 = 0 \end{aligned} \qquad (2.26)$$

El cual constituye un sistema de ecuaciones con dos incógnitas a_1, a_2. Dicho sistema tendrá solución única, siempre y cuando:

$$\begin{vmatrix} V_{11} - \omega^2 T_{11} & V_{12} - \omega^2 T_{12} \\ V_{21} - \omega^2 T_{21} & V_{22} - \omega^2 T_{22} \end{vmatrix}_{2x2} = 0 \qquad (2.27)$$

A partir de este resultado es fácil generalizar a n grados de libertad

$$\left| V - \omega^2 T \right|_{nxn} = 0 \quad (2.28)$$

Donde:

$$V = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & . & . & . & V_{1n} \\ V_{21} & V_{22} & & & & \\ . & & & & & \\ . & & & & & \\ . & & & & & \\ V_{n1} & . & . & . & . & V_{nn} \end{pmatrix}_{nxn} \qquad (2.29)$$

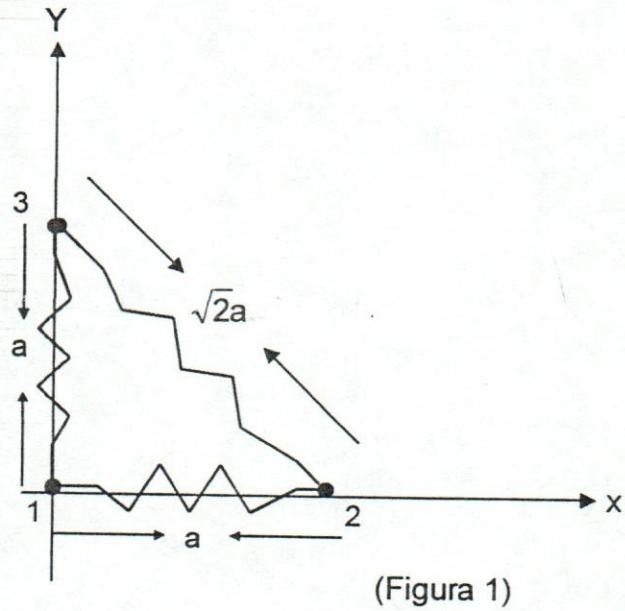
y $$T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & . & . & . & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ T_{n1} & & & & & T_{nn} \end{pmatrix}_{nxn} \qquad (2.30)$$

La matriz T, para la mayoría de los fines prácticos, es diagonal. Esto se debe a que en el sistema de coordenadas cartesianas (o en general en un sistema de coordenadas ortogonal) la energía cinética sólo contiene los términos cuadráticos de la forma $\left(\dot{\eta}_i\right)^2$

CAPÍTULO III

FRECUENCIAS DE OSCILACIÓN.
CASO: MOLÉCULA TRIATÓMICA

Como modelo de molécula tomaremos una con geometría triagonal plana como la mostrada en la figura 1.



(Figura 1)

En ella, los enlaces se han representado mediante resortes de constantes de elasticidad iguales y los tres átomos que conforman la molécula se consideran de masa igual a "m".

La configuración presentada en la figura 1, representa la configuración de equilibrio. Por consiguientes las posiciones de equilibrio, con respecto al sistema de coordenadas xy, de los tres átomos estarán dadas por

$$m_1 = (0,0) \qquad m_2 = (a,0) \qquad m_3 = (0,a)$$

El potencial elástico de interacción entre las moléculas del sistema se expresa por:

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

$$\left. + \left(\left((x_3 - x_1)^2 + (y_3 - y_1)^2\right)^{\frac{1}{2}} - a\right)^2 + \left(\left((x_3 - x_2)^2 + (y_3 - y_2)^2\right)^{\frac{1}{2}} - a\sqrt{2}\right)^2\right)$$

Introduciendo coordenadas generalizadas q_i de la siguiente forma:

$$x_1 = q_1 \qquad y_1 = q_2$$
$$x_2 = q_3 \qquad y_2 = q_4$$
$$x_3 = q_5 \qquad y_3 = q_6$$

lo cual equivale a sumergir el sistema en un hiperespacio de configuraciones de dimensión seis. Espacio en el cual se desarrollará la dinámica del sistema planteado.

De acuerdo con (2.11), la energía cinética estará dada por:

$$T = \frac{1}{2}mv_1^2 + \frac{1}{2}mv_2^2 + \frac{1}{2}mv_3^2$$

$$= \frac{1}{2}m\left(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2\right) + \frac{1}{2}m(\dot{q}_3^2 + \dot{q}_4^2) + \frac{1}{2}m\left(\dot{q}_5^2 + \dot{q}_6^2\right)$$

$$T = \frac{1}{2}m\dot{q}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{q}_2^2 + \frac{1}{2}m\dot{q}_3^2 + \frac{1}{2}m\dot{q}_4^2 + \frac{1}{2}m\dot{q}_5^2 + \frac{1}{2}m\dot{q}_6^2$$

que de acuerdo con (2.16) y (2.23) tenemos que:

$$T_{ii} = m \quad \wedge \quad T_{ij} = 0\ ,\ i \neq j$$

Análogamente, expresando el potencial en términos de las coordenadas generalizadas se tendrá que:

$$V(q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6) =$$

$$= \frac{k}{2}\left((((q_3 - q_1)^2 + (q_4 - q_2)^2)^{\frac{1}{2}} - a)^2 + (((q_5 - q_1)^2 + (q_6 - q_2))^{\frac{1}{2}} - a)^2 \right.$$

$$\left. + (((q_5 - q_3)^2 + (q_6 - q_4)^2)^{\frac{1}{2}} - \sqrt{2}a)^2 \right)$$

donde punto de equilibrio en coordenadas generalizadas estará dado por

$$(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = (0, 0, a, 0, 0, a)$$

Para el cálculo de los V_{ij} requeridos por (2.6) y (2.23) utilizamos Scientific Notebook (Ver Anexo A), obteniendo los siguientes resultados:

$$V_{ij} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \right|_{(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60})}$$

$V_{11} = k$	$V_{12} = 0$	$V_{23} = 0$	$V_{34} = \frac{-k}{2}$	$V_{45} = \frac{k}{2}$	$V_{56} = \frac{-k}{2}$
$V_{22} = k$	$V_{13} = -k$	$V_{24} = 0$	$V_{35} = \frac{-k}{2}$	$V_{46} = \frac{-k}{2}$	
$V_{33} = \frac{3k}{2}$	$V_{14} = 0$	$V_{25} = 0$	$V_{36} = \frac{k}{2}$		
$V_{44} = \frac{k}{2}$	$V_{15} = 0$	$V_{26} = -k$			

$V_{55} = \frac{k}{2}$ $\quad V_{16} = 0$

$V_{66} = \frac{3k}{2}$

De acuerdo con (2.29) y (2.30) las matrices de coeficientes V_{ij} y T_{ij} estarán dadas por

$$V_{ij} = \begin{pmatrix} k & 0 & -k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 & 0 & 0 & -k \\ -k & 0 & \frac{3k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{k}{2} \\ 0 & 0 & \frac{-k}{2} & \frac{k}{2} & \frac{k}{2} & \frac{-k}{2} \\ 0 & 0 & \frac{-k}{2} & \frac{k}{2} & \frac{k}{2} & \frac{-k}{2} \\ 0 & -k & \frac{k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{3k}{2} \end{pmatrix}_{6x6}$$

y

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m \end{pmatrix}_{6x6}$$

que de acuerdo con (2.28) las frecuencias de oscilación (autovalores) del sistema vendrán dadas por las soluciones de la ecuación secular (Ver anexo B)

$$\begin{vmatrix} k-\omega^2 m & 0 & -k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k-\omega^2 m & 0 & 0 & 0 & -k \\ -k & 0 & \frac{3k}{2}-\omega^2 m & \frac{-k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{k}{2} \\ 0 & 0 & \frac{-k}{2} & \frac{k}{2}-\omega^2 m & \frac{k}{2} & \frac{-k}{2} \\ 0 & 0 & \frac{-k}{2} & \frac{k}{2} & \frac{k}{2}-\omega^2 m & \frac{-k}{2} \\ 0 & -k & \frac{k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{3k}{2}-\omega^2 m \end{vmatrix} = 0$$

Dichas soluciones son obtenidas usando Scientific Notebook:

$$\omega_1^6 = 0$$

$$\omega_2^2 = \frac{2k}{m}$$

$$\omega_3^2 = \frac{k}{m}$$

$$\omega_4^2 = \frac{3k}{m}$$

CAPÍTULO IV

CONCLUSIONES

Usando el formalismo de Lagrange se logra construir un Lagrangiano que contiene toda la información dinámica de un sistema físico cuyo movimiento está restringido a las cercanías del estado de equilibrio. Dicho Lagrangiano viene dado por la expresión

$$L = \frac{1}{2} m_{11} \dot{\eta}_1 \dot{\eta}_1 + m_{12} \dot{\eta}_1 \dot{\eta}_2 + \frac{1}{2} m_{22} \dot{\eta}_2 \dot{\eta}_2$$

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial^2 q_1}\right)_{(q_{10}, q_{20})} \eta_1 \eta_1 - \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_1 \partial q_2}\right)_{(q_{10}, q_{20})} \eta_1 \eta_2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial^2 q_2}\right) \eta_1 \eta_2$$

Ya esto constituye en sí una ventaja con respecto al abordaje del mismo problema desde el punto de vista Newtoniano por cuanto las fuerzas de ligadura del sistema son eliminadas incorporándolas en forma de coordenadas generalizadas.

Si bien el problema, desde el punto de vista teórico, está completamente resuelto, desde el punto de vista práctico aparecen complicaciones profundas en la obtención de soluciones analíticas. Estás complicaciones se deben a que el orden de la matriz secular, así como el de la ecuación secular puede resultar ser alto.

De ahí que la mayor parte de la literatura reseña la aplicación de este método sólo para el caso de **moléculas biatómicas**. Esto se debe al hecho de que los resultados obtenidos son de fácil manipulación algebraica por cuanto se llegan a determinantes 2x2 y ecuaciones seculares de 2do. grado.

En Goldstein (1992) y (Corben y Stehele, P. 1994) hacen referencia al caso de una **molécula triatómica lineal**: un análogo a la molécula de CO_2 (dióxido de carbono) constituida por dos átomos de masa m en los extremos y un átomo de masa M ubicado en el centro de masa del sistema.

En Goldstein (1992) presentan el caso en el cual la molécula sólo puede oscilar a lo largo del eje que contiene los átomos. De esta forma logran simplificar el problema reduciendo los grados de libertad a tres, reportando como resultado la ecuación secular:

$$\begin{vmatrix} k-\omega^2 m & -k & 0 \\ -k & 2k-\omega^2 M & -k \\ 0 & -k & k-\omega^2 m \end{vmatrix} = 0$$

$$\omega^2(k-\omega^2 m)(k(M+2m)-\omega^2 Mm) = 0$$

cuyas soluciones son inmediatas y de fácil obtención:

$$\omega_1^2 = 0$$
$$\omega_2^2 = \frac{k}{m}$$
$$\omega_3^2 = \frac{k}{m}\left(1+2\frac{m}{M}\right)$$

En (Corben y Stehele, P. 1994) permiten oscilaciones en todas las direcciones posibles obteniendo así un problema con nueve grados de libertad. Con el fin de reducir el número de grados de libertad y por consiguiente el grado de la ecuación secular suponen que:

a) el momentum lineal de la molécula es cero reduciendo así en tres el número de grados de libertad.

b) el momentum angular alrededor del centro de masa es cero reduciendo en dos el número de grados de libertad.

Aún cuando estas suposiciones reducen a cuatro el número de grados de libertad, la ecuación secular está constituida por un determinante 4x4

$$\det\begin{bmatrix} 2k\left(1+2\frac{m}{M}\right)^2-\omega^2\left(2+4\frac{m}{M}\right)m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2k\left(1+2\frac{m}{M}\right)^2-\omega^2\left(2+4\frac{m}{M}\right)m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2k\left(1+\frac{m}{M}+\frac{m^2}{M^2}\right)-\omega^2\left(1+\frac{m}{M}\right)m & k\left(2\frac{m}{M}+2\frac{m^2}{M^2}-1\right)-\omega^2\frac{m}{M}m \\ 0 & 0 & k\left(2\frac{m}{M}+2\frac{m^2}{M^2}-1\right)-\omega^2\frac{m}{M}m & 2k\left(1+\frac{m}{M}+\frac{m^2}{M^2}\right)+-\omega^2\left(1+\frac{m}{M}\right)m \end{bmatrix}=0$$

el cual representa todavía una dificultad algebraica en la obtención de las frecuencias de oscilación.

La forma especial, pero en modo alguno casual como se explicará más adelante, de este determinante: **dos bloques a lo largo de la diagonal**; hace que, en este caso, pueda ser resuelto fácilmente, ya que puede descomponerse así:

$$\det\begin{bmatrix} 2k\left(1+2\frac{m}{M}\right)^2-\omega^2\left(2+4\frac{m}{M}\right)m & 0 \\ 0 & 2k\left(1+2\frac{m}{M}\right)^2-\omega^2\left(2+4\frac{m}{M}\right)m \end{bmatrix}\det\begin{bmatrix} 2k\left(1+\frac{m}{M}+\frac{m^2}{M^2}\right)-\omega^2\left(1+\frac{m}{M}\right)m & k\left(2\frac{m}{M}+2\frac{m^2}{M^2}-1\right)-\omega^2\frac{m}{M}m \\ k\left(2\frac{m}{M}+2\frac{m^2}{M^2}-1\right)-\omega^2\frac{m}{M}m & 2k\left(1+\frac{m}{M}+\frac{m^2}{M^2}\right)-\omega^2\left(1+\frac{m}{M}\right)m \end{bmatrix}=0$$

Haciendo que la factorización sea inmediata. En este caso las frecuencias de oscilación obtenidas son:

$$\omega_1^2 = \frac{k}{m}\left(1+2\frac{m}{M}\right)$$

$$\omega_2^2 = \frac{k}{m}\left(1+2\frac{m}{M}\right)$$

$$\omega_3^2 = 3\frac{k}{m}$$

$$\omega_4^2 = 2\frac{k}{M}+\frac{k}{m}$$

Para moléculas con configuraciones más complicadas, como la del presente trabajo, el método deja de tener aplicabilidad práctica para circunscribirse al ámbito meramente académico. Es decir la solución de las ecuaciones del movimiento acarrea mayores complicaciones que el problema en sí.

En (Corben y Stehele, P. Apéndice III, 1994) se hace un intento por sistematizar un método, basado en la Teoría de Grupos de Simetría, para el cálculo de las frecuencias de oscilación de una **molécula triatómica triangular equilátera** constituida por átomos idénticos. La idea de esta sistematización consiste en obtener determinantes Tipo Bloque para facilitar la obtención de los autovalores.

Con el objeto de mostrar las complicaciones y limitaciones de éste método con respecto al del presente trabajo, se muestra una síntesis de la propuesta por estos autores.

En principio la molécula debe poseer una alta simetría (cosa que no ocurre con la molécula objeto del presente estudio) para poder asociar una operación de simetría: rotación o reflexión, cuyo único efecto sea intercambiar un átomo por otro. De esta forma garantizan que la configuración de equilibrio de la molécula no se altera al aplicar alguna de estas operaciones.

El conjunto de todas las operaciones de simetría adquieren la estructura de Grupo y por consiguiente dos o más operaciones de simetría aplicadas

sucesivamente a la molécula constituyen en si otra operación de simetría. Tales operaciones tienen una representación matricial, que en el caso de un espacio de configuración con ejes rectangulares, resulta ser una matriz ortogonal. Así la aplicación sucesiva de operaciones de simetría se reduce a un producto de matrices.

Si el espacio de configuración puede descomponerse en dos subespacios disjuntos, cada una de las matrices asociada con la operación de simetría tendrá dos bloques a lo largo de la diagonal. En el resultado obtenido por (Corben y Stehele, P., 1994) relacionado con la molécula de CO_2, el determinante en forma de bloque a lo largo de la diagonal aparece como resultado de la aplicación de dos operaciones de simetría, una asociada a la conservación del momentum lineal (simetría de traslación) y otra asociada a la conservación del momentum angular (simetría de rotación).

En nuestro caso particular: **Molécula Triatómica Plana Rectangular**, la aplicación del Scientific Notebook nos permite calcular explícitamente las frecuencias de oscilación (autovalores) independientemente de la geometría del sistema (simetrías) y sin necesidad de introducir supuestos externos con el fin de simplificar el problema. Lo cual constituye en si mismo una herramienta poderosa y relativamente simple para el estudio de las vibraciones de moléculas complejas. Estas frecuencias ordenadas en orden creciente desde el modo de oscilación más bajo al más alto son:

$$\omega_1 = 0$$

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\omega_3 = \sqrt{\frac{2k}{m}}$$

$$\omega_4 = \sqrt{\frac{3k}{m}}$$

Si bien hay autores que no aceptan $\omega_1 = 0$ como modo de oscilación, otros la asumen como asociada al movimiento traslacional del sistema, es decir: el sistema se traslada sin oscilar con periodo infinito. Que en nuestro caso no reviste el menor interés por cuanto estamos interesados en las oscilaciones de la molécula en las vecindades de un punto de equilibrio estable.

Las otras tres frecuencias nos indican que la oscilación más general de la molécula (en las cercanías de su posición de equilibrio) debe contenerlas a ellas como armónicos.

En la literatura revisada, el caso en el cual los átomos que constituyen la molécula estén cargados no aparece estudiado en modo alguno. Esto se debe a que, en este caso, el potencial generalizado $V(q_i)$ debe incluir los términos de interacción Coulombiana de la forma $K\frac{Q_iQ_j}{r_{ij}}$ donde el término $\frac{1}{r_{ij}}$ abulta los cálculos de manera espectacular.

Nuestros resultados, en principio, pensamos que pueden generalizarse de manera directa para incluir casos como el planteado arriba e incluir a otros en los cuales los potenciales estén descritos por expresiones más complejas. Proponemos estos casos como posibles problemas abiertos a posteriores investigaciones.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

Barge, V., y Olsson, M. (1995). Classical Mechanics a Modern Perspectiva (2a. ed.). New York: McGraw-Hill, Inc.

Corben, H. C., y Stehele, P. (1994). Classical Mechanics (2a. ed.). New York: Dover Publications, Inc.

Goldstein. H. (1992). Mecánica Clásica (2a. ed.). (J. Fernández Ferrer, Trad.). Barcelona, España: Editorial Reverté, S.A. (Trabajo original publicado en 1980).

Haaser, N. B., La Salle, J. P., y Sullivan, J. A. (1973). Análisis Matemático. Vol 2. (1ª. ed.).(Federico Velasco Coba, Trad.) México. Editorial Trillas.

Konopinsky, E. J. (1969). Classical Descriptions of Motion. San Francisco, U.S.A.: W.H. Freeman and Company.

Lanczos, C. (1974). The Variational Principles of Mechanics (4a. ed.). Toronto: University of Toronto Press.

Manual de Trabajos de Grado de Maestría y Tesis Doctorales. (1999). Instituto de Investigaciones Educativas. UPEL. Caracas.

Pardo Sánchez, G., González Caballero, F., y Bruque. J. M. (1975). Mecánica. Madrid: Paraninfo.

Ruggeri, G. J. (1984). Mecánica. Caracas. Universidad Nacional Abierta.

Saletan, E. J., y Cromer, A. H. (1971). Theoretical Mechanics. New York: John Wiley & Sons, Inc.

Sudarshan, E.C.G., y Mukunda, N, (1974). Classiclal Dynamics: A Modern Perspective. New York: John Wiley & Sons, Inc.

Synge, J. L., Griffith, B. A. (1965). Principios de Mecánica (3a. ed.). (J. Bescós y J. Olivé, Trads.) New York: McGraw-Hill Publishing Company, Inc. (Trabajo original publicado en 1959).

Takwale, R.G., y Puranik, P. S. (1979). Introduction to Classical Mechanics . New Delhi, India: Tata McGraw-Hill Publishing Company Ltd.

ANEXOS

[ANEXO A]

Cálculo de los V_{ij}

Cálculo del $V_{11}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = k$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_1 \partial q_1}\left(-\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_1^2-2q_1q_3+q_3^2}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +\frac{q_1^2-2q_1q_5+q_5^2}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +\frac{1}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a\right)\\ +\frac{1}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a\right)\\ \frac{-\frac{1}{4}(4q_1^2-8q_1q_3+4q_3^2)\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\end{array}}\\ \frac{-\frac{1}{4}(4q_1^2-8q_1q_5+4q_5^2)\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{22}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = k$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_2 \partial q_2}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a^2\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_2^2-2q_2q_4+q_4^2}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +\frac{q_2^2-2q_2q_6+q_6^2}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +\frac{1}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a\right)\\ +\frac{1}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a^2\right)\\ \frac{-\frac{1}{4}(4q_2^2-8q_2q_4+4q_4^2)\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\end{array}}\\ \frac{-\frac{1}{4}(4q_2^2-8q_2q_6+4q_6^2)\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a^2}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{33}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{3k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_3 \partial q_3}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_1^2-2q_1q_3+q_3^2}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +\frac{q_3^2-2q_3q_5+q_5^2}{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +\frac{1}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a\right)\\ +\frac{1}{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}\right)\\ \frac{-\frac{1}{4}(4q_1^2-8q_1q_3+4q_3^2)\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\end{array}}\\ \frac{-\frac{1}{4}(4q_3^2-8q_3q_5+4q_5^2)\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}}{\begin{array}{c}q_3^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{44}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_4 \partial q_4}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_2^2-2q_2q_4+q_4^2}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +\frac{q_4^2-2q_4q_6+q_6^2}{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +\frac{1}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a\right)\\ +\frac{1}{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}\right)\\ -\frac{1}{4}(4q_2^2-8q_2q_4+4q_4^2)\\ \frac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a}{q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_4^2-8q_4q_6+4q_6^2)\\ \frac{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}}{q_3^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{55}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_5 \partial q_5}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_1^2-2q_1q_5+q_5^2}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +\frac{q_3^2-2q_3q_5+q_5^2}{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +\frac{1}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a\right)\\ +\frac{1}{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}\right)\\ \frac{-\frac{1}{4}(4q_1^2-8q_1q_5+4q_5^2)\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\\ \frac{-\frac{1}{4}(4q_3^2-8q_3q_5+4q_5^2)\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}}{\begin{array}{c}q_3^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{66}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{3k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_6 \partial q_6}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_2^2-2q_2q_6+q_6^2}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +\frac{q_4^2-2q_4q_6+q_6^2}{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +\frac{1}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a\right)\\ +\frac{1}{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}\right)\\ -\frac{1}{4}(4q_2^2-8q_2q_6+4q_6^2)\\ \frac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\\ -\frac{1}{4}(4q_4^2-8q_4q_6+4q_6^2)\\ \frac{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}}{\begin{array}{c}q_3^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{12} = V_{21}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = 0$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_2 \partial q_1}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2+\\ \left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_1q_2-q_1q_4-q_2q_3+q_3q_4}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +\frac{q_1q_2-q_1q_6-q_2q_5+q_5q_6}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_1q_2-4q_1q_4-4q_2q_3+4q_3q_4)\\ \frac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\end{array}}\\ -\frac{1}{4}(4q_1q_2-4q_1q_6-4q_2q_5+4q_5q_6)\\ \frac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{13} = V_{31}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = -k$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_3 \partial q_1}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{2q_1q_3-q_1^2-q_3^2}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -\frac{1}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a\right)\\ -\frac{1}{4}(8q_1q_3-4q_1^2-4q_3^2)\\ \frac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a}{q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{14} = V_{41}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = 0$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_1 \partial q_4}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\frac{\begin{array}{c}\frac{q_1q_4-q_1q_2+q_2q_3-q_3q_4}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_1q_4-4q_1q_2+4q_2q_3-4q_3q_4)\\ \sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a\end{array}}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\end{array}}\right)$$

Cálculo del $V_{15} = V_{51}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = 0$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_5 \partial q_1}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\begin{array}{c}-\frac{\frac{2q_1q_5-q_1^2-q_5^2}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a\right)\\ -\frac{1}{4}(8q_1q_5-4q_1^2-4q_5^2)\\ \frac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a}{q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{16} = V_{61}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = 0$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_6 \partial q_1}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\begin{array}{c}\dfrac{\begin{array}{c}\frac{q_1q_6-q_1q_2+q_2q_5-q_5q_6}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_1q_6-4q_1q_2+4q_2q_5-4q_5q_6)\\ \sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a\end{array}}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{23} = V_{32}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = 0$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_3 \partial q_2}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\begin{array}{c}\dfrac{\frac{q_1q_4-q_1q_2+q_2q_3-q_3q_4}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-\frac{1}{4}(4q_1q_4-4q_1q_2+4q_2q_3-4q_3q_4)\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a}{q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{24} = V_{42}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = 0$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_4 \partial q_2}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\begin{array}{c}-\frac{\frac{2q_2q_4-q_2^2-q_4^2}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a\right)\\ -\frac{1}{4}(8q_2q_4-4q_2^2-4q_4^2)\\ \frac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a}{q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{25} = V_{52}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = 0$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_5 \partial q_2}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2+\\ \left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\frac{\begin{array}{c}\frac{q_1q_6-q_1q_2+q_2q_5-q_5q_6}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_1q_6-4q_1q_2+4q_2q_5-4q_5q_6)\\ \sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a\end{array}}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\right)$$

Cálculo del $V_{26} = V_{62}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = -k$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_6 \partial q_2}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\begin{array}{c}-\dfrac{\frac{2q_2q_6-q_2^2-q_6^2}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a\right)\\ -\frac{1}{4}(8q_2q_6-4q_2^2-4q_6^2)\\ \dfrac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a}{q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}+\\ q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{34} = V_{43}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{-k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_4 \partial q_3}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_1q_2-q_1q_4-q_2q_3+q_3q_4}{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +\frac{q_3q_4-q_3q_6-q_4q_5+q_5q_6}{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_1q_2-4q_1q_4-4q_2q_3+4q_3q_4)\\ \frac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}-a}{q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}}\\ -2q_2q_4\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -2q_1q_3\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_3^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_4-2q_1q_3+q_2^2+q_3^2+q_4^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_3q_4-4q_3q_6-4q_4q_5+4q_5q_6)\\ \frac{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}}{q_3^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{35} = V_{53}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{-k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_5 \partial q_3} \frac{k}{2} \begin{pmatrix} \left(\left((q_3 - q_1)^2 + (q_4 - q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}} - a\right)^2 \\ +\left(\left((q_5 - q_1)^2 + (q_6 - q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}} - a\right)^2 \\ +\left(\left((q_5 - q_3)^2 + (q_6 - q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}} - \sqrt{2}\,a\right)^2 \end{pmatrix} :=$$

$$k \begin{pmatrix} -\frac{\frac{2q_3q_5 - q_3^2 - q_5^2}{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2}}{\sqrt{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2}} \left(\sqrt{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2} - a\sqrt{2}\right) \\ -\frac{1}{4}(8q_3q_5 - 4q_3^2 - 4q_5^2) \\ \frac{\sqrt{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2} - a\sqrt{2}}{q_3^2\sqrt{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2}} \\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2} \\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2} \\ +q_4^2\sqrt{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2} \\ +q_5^2\sqrt{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2} \\ +q_6^2\sqrt{q_3^2 - 2q_4q_6 - 2q_3q_5 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2} \end{pmatrix}$$

Cálculo del $V_{36} = V_{63}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_6 \partial q_3}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_3q_6-q_3q_4+q_4q_5-q_5q_6}{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_3q_6-4q_3q_4+4q_4q_5-4q_5q_6)\\ \frac{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}}{q_3^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\ +\\ q_6^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{45} = V_{54}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_5 \partial q_4}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_3q_6-q_3q_4+q_4q_5-q_5q_6}{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_3q_6-4q_3q_4+4q_4q_5-4q_5q_6)\\ \frac{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}}{q_3^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{46} = V_{64}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{-k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_6 \partial q_4}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right)=$$

$$k\left(\begin{array}{c}-\frac{\frac{2q_4q_6-q_4^2-q_6^2}{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\left(\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}\right)\\ -\frac{1}{4}(8q_4q_6-4q_4^2-4q_6^2)\\ \frac{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}}{q_3^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}}\\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}\right)$$

Cálculo del $V_{56} = V_{65}(q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40}, q_{50}, q_{60}) = \frac{-k}{2}$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_6 \partial q_5}\left(\frac{k}{2}\left(\begin{array}{c}\left(\left((q_3-q_1)^2+(q_4-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_1)^2+(q_6-q_2)^2\right)^{\frac{1}{2}}-a\right)^2\\ +\left(\left((q_5-q_3)^2+(q_6-q_4)^2\right)^{\frac{1}{2}}-\sqrt{2}\,a\right)^2\end{array}\right)\right) =$$

$$k\left(\begin{array}{c}\frac{q_1q_2-q_1q_6-q_2q_5+q_5q_6}{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +\frac{q_3q_4-q_3q_6-q_4q_5+q_5q_6}{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -\frac{1}{4}(4q_1q_2-4q_1q_6-4q_2q_5+4q_5q_6)\\ \frac{\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}-a}{\begin{array}{c}q_1^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_2q_6\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_1q_5\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_2^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_1^2-2q_2q_6-2q_1q_5+q_2^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\\ -\frac{1}{4}(4q_3q_4-4q_3q_6-4q_4q_5+4q_5q_6)\\ \frac{\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}-a\sqrt{2}}{\begin{array}{c}q_3^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_4q_6\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ -2q_3q_5\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_4^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_5^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\\ +q_6^2\sqrt{q_3^2-2q_4q_6-2q_3q_5+q_4^2+q_5^2+q_6^2}\end{array}}\end{array}\right)$$

[ANEXO B]

Matriz, Determinante y Ecuación Secular

Solución de la Ecuación Secular

$$\det\begin{bmatrix} k-\omega^2 m & 0 & -k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k-\omega^2 m & 0 & 0 & 0 & -k \\ -k & 0 & \frac{3k}{2}-\omega^2 m & \frac{-k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{k}{2} \\ 0 & 0 & \frac{-k}{2} & \frac{k}{2}-\omega^2 m & \frac{k}{2} & \frac{-k}{2} \\ 0 & 0 & \frac{-k}{2} & \frac{k}{2} & \frac{k}{2}-\omega^2 m & \frac{-k}{2} \\ 0 & -k & \frac{k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{-k}{2} & \frac{3k}{2}-\omega^2 m \end{bmatrix}$$

$$m^6\omega^{12} - 6km^5\omega^{10} - 6k^3m^3\omega^6 + 11k^2m^4\omega^8 = 0$$
$$-\omega^6 m^3(2k - m\omega^2)(k - m\omega^2)(3k - m\omega^2) = 0$$

Frecuencias de Oscilación.

$$\omega_1^6 = 0$$

$$\omega_2^2 = \frac{2k}{m}$$

$$\omega_3^2 = \frac{k}{m}$$

$$\omega_4^2 = \frac{3k}{m}$$