TRANSFERENCIA DE ENERGÍA EN VIBRACIONES MOLECULARES CAÓTICAS

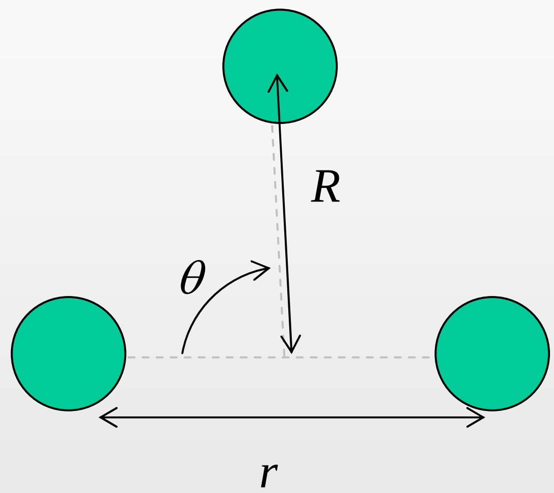
JUAN CARLOS LOSADA

Universidad Politécnica de Madrid

Grupo de Sistemas Complejos

MOLÉCULAS TRIATÓMICAS

Tres osciladores acoplados



MODOS NORMALES DE VIBRACIÓN

FRECUENCIA ASOCIADA

ENERGÍA ASOCIADA

BALANCE DE ENERGÍA

ENERGÍA TOTAL CONSTANTE
(SISTEMAS HAMILTONIANOS)

Dos casos:

i. **Energías (frecuencias) de cada modo se mantienen constantes.**
ii. **Energías (frecuencias) de cada modo varían con el tiempo:**
   Existe transferencia de energía entre modos de vibración.

BALANCE DE ENERGÍA

i. Energías (frecuencias) de cada modo se mantienen constantes.

$$\omega_i = \text{cte} \rightarrow \left(\omega_i = \frac{dH}{dI_i} = \text{cte} \right)$$

– **Sistema integrable**. **Existen las coordenadas de acción – ángulo.**

– **Movimiento regular**. **Dependiendo del valor de la relación de frecuencias entre los modos:**

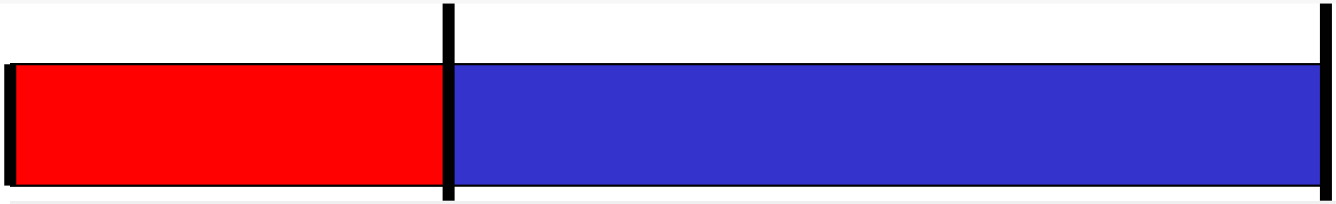
- **Periódico** $\quad \dfrac{\omega_i}{\omega_j} = \dfrac{p}{q} \quad p, q \in \mathrm{N}$
- **Cuasiperiódico** $\quad \dfrac{\omega_i}{\omega_j} = r \quad r$ irracional

TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

BALANCE DE ENERGÍA

ii. Energías (frecuencias) de cada modo varían con el tiempo.

Existe transferencia de energía entre modos de vibración

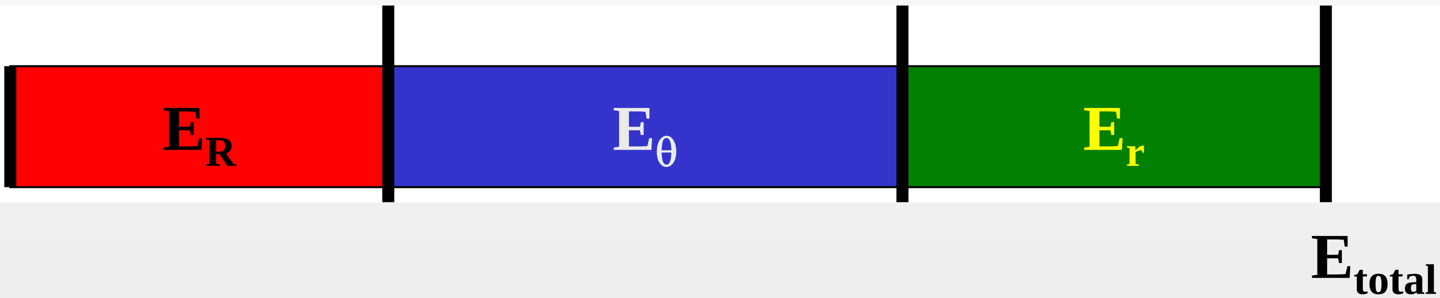


$\omega_i = F(t)$ **E_{total}**

a. $\dfrac{\omega_i}{\omega_j} = f(t)$ $f(t)$ periódica $\Rightarrow$ **Movimiento regular:**
Resonancias no lineales. Cadenas de islas.

b. $\dfrac{\omega_i}{\omega_j} = f(t)$ $f(t)$ aperiódica $\Rightarrow$ **Movimiento caótico.**

BALANCE DE ENERGÍA
3 grados de libertad



i. **Energías (frecuencias) de cada modo se mantienen constantes.**
ii. **Energías (frecuencias) de cada modo varían con el tiempo.**
   - **Un modo desacoplado (E3 = cte):**
     Equivalente a un sistema de 2 gdl. Transferencia de energía solo entre dos modos de vibración.
   - **Los tres modos acoplados**
     En de forma periódica. Líneas de resonancia
     En forma aperiódica. Movimiento caótico

TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

Confinamiento del movimiento.

Durante un tiempo determinado no existe transferencia de energía entre modos, aunque por la naturaleza del movimiento pudiera haberla.
Durante este tiempo las frecuencias permanecen constantes.

BARRERAS PARCIALES DE LAS TRAYECTORIAS CAÓTICAS

Muy importantes en la estabilidad del sistema, vida media, etc.

- **TOROS (en 2 D barreras totales)**
- **CANTOROS (cuellos de botella)**
- **SEPARATRICES**
- **…**

TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA DE DOS GRADOS DE LIBERTAD

EXISTEN BARRERAS TOTALES: TOROS

2 GdL → 4D. E = cte → 3D. Toros 2D separan regiones 3D

BARRERAS PARCIALES. Confinamiento

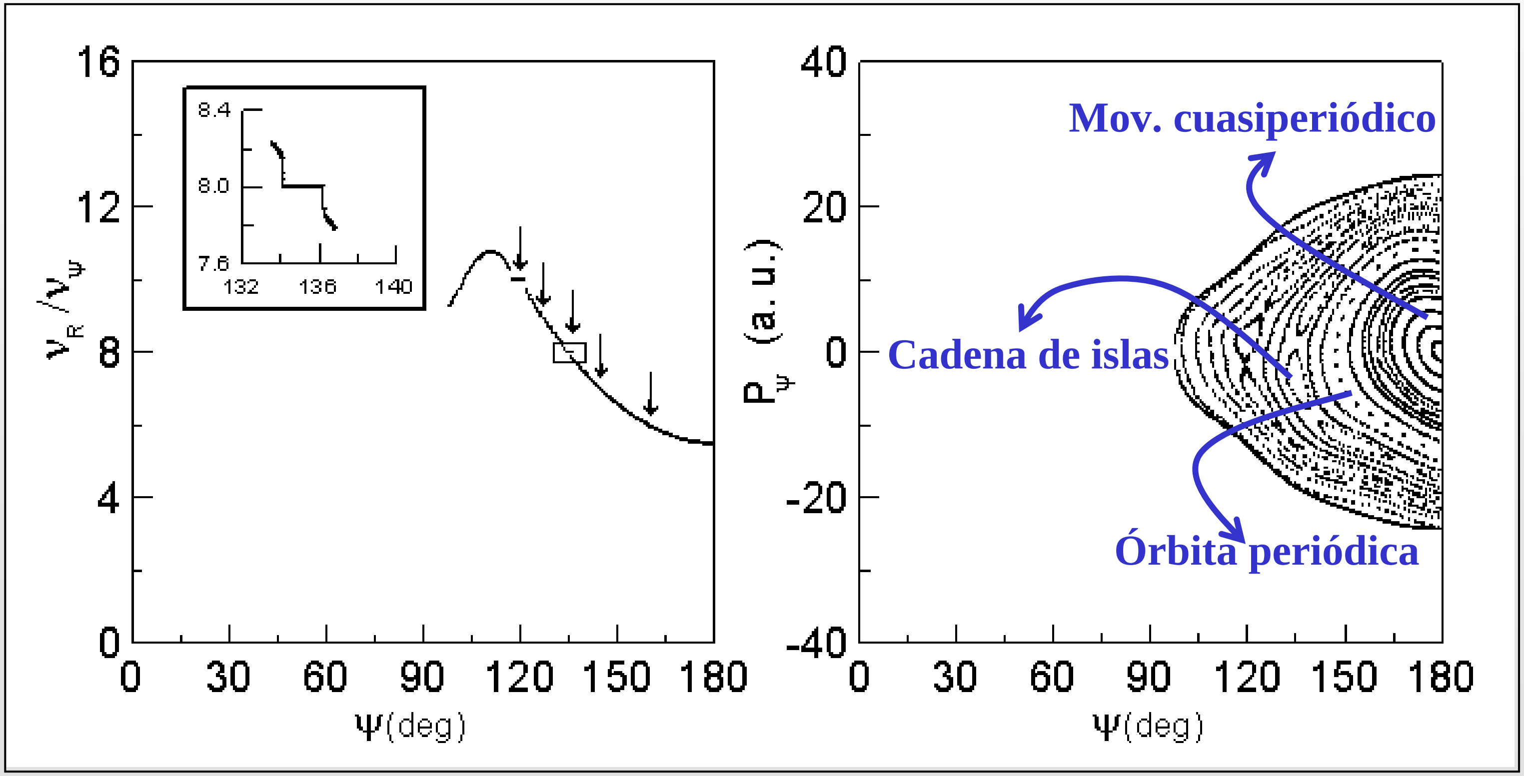
– **SEPARATRICES. Trayectorias que unen orbitas periódicas inestables. Separan tipos de movimiento: regular y caótico.**
  - **Orbitas periódicas estables: centros de las cadenas de islas.**
  - **Existe otra asociada inestable, cuyos puntos se unen por la separatriz.**
  - **Efecto más o menos evidente.**

– **CANTOROS. Últimos toros en romperse por efecto de la perturbación .**
  - **Toros “más irracionales”. Relación de frecuencias nº aureo.**
  - **Efecto de cuellos de botella o embudo. Efecto Bernouilli. Alta y rápida transferencia de energía**

TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA LiCN. 2GdL

MOVIMIENTO REGULAR



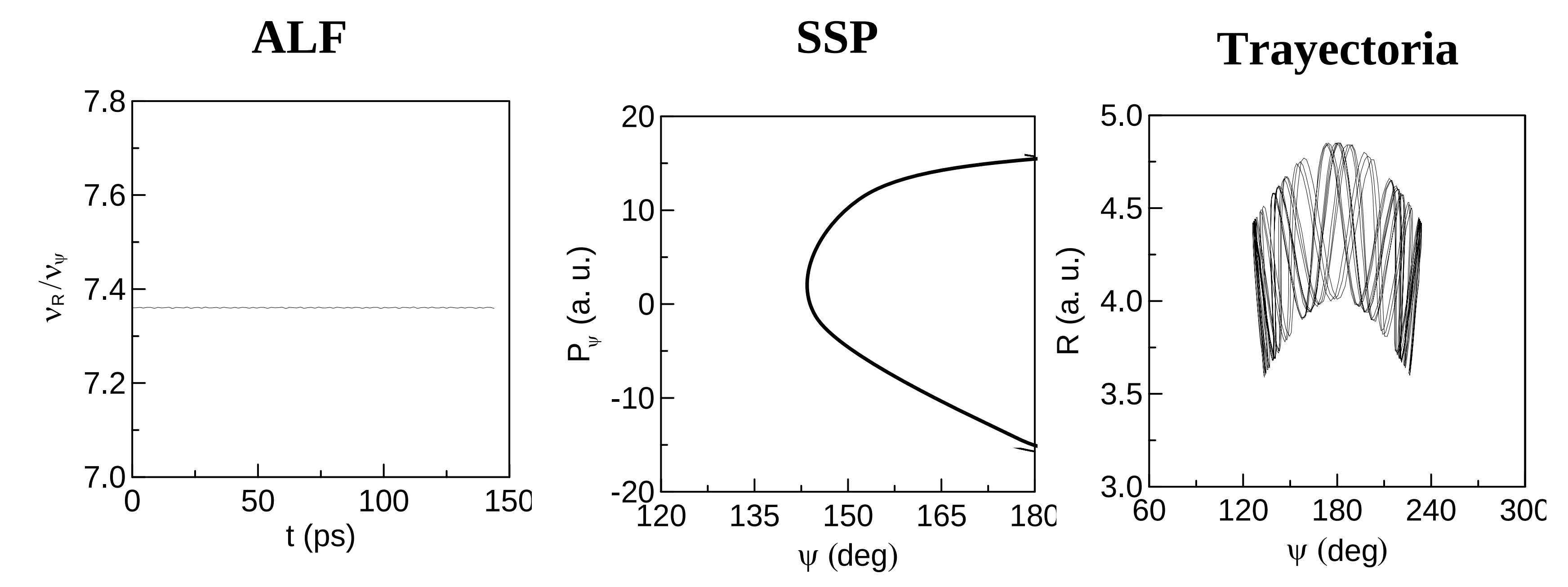
(Cálculo de las frecuencias fundamentales mediante el método de Laskar)

TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA LiCN. 2GdL

MOVIMIENTO REGULAR

i. **Frecuencias constantes en el tiempo:** $\frac{\omega_R}{\omega_\psi} = cte$

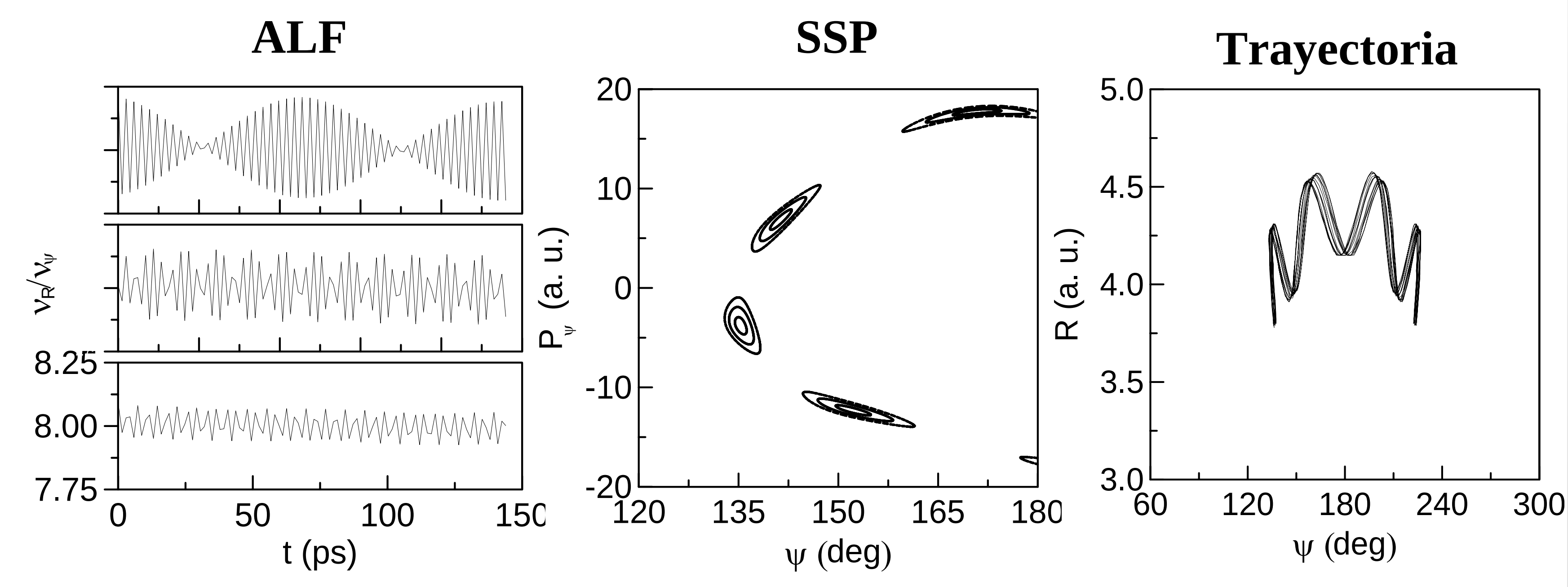


TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA LiCN. 2GdL

MOVIMIENTO REGULAR

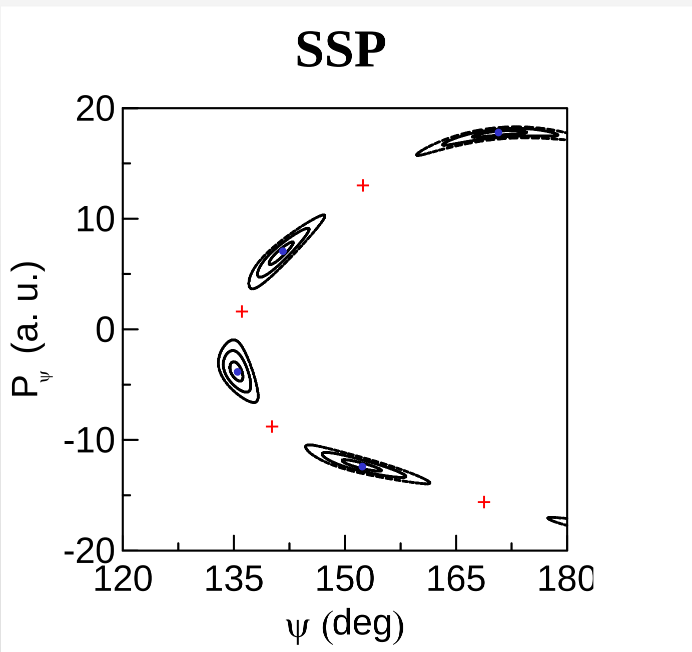
ii. Relación de frecuencias función periódica en el tiempo: $\dfrac{\omega_R}{\omega_\psi} = f\,(t)$ periódica

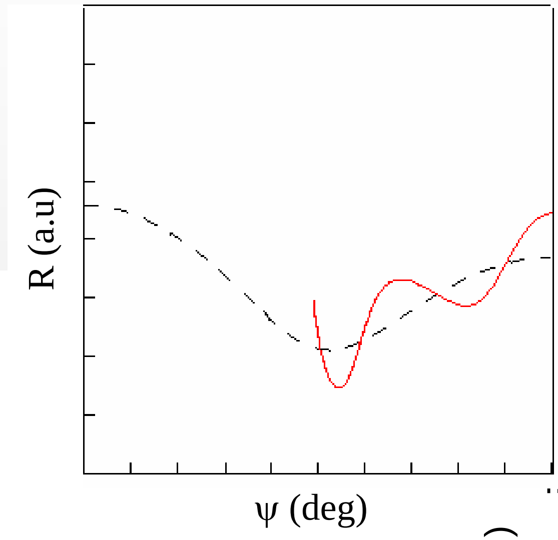


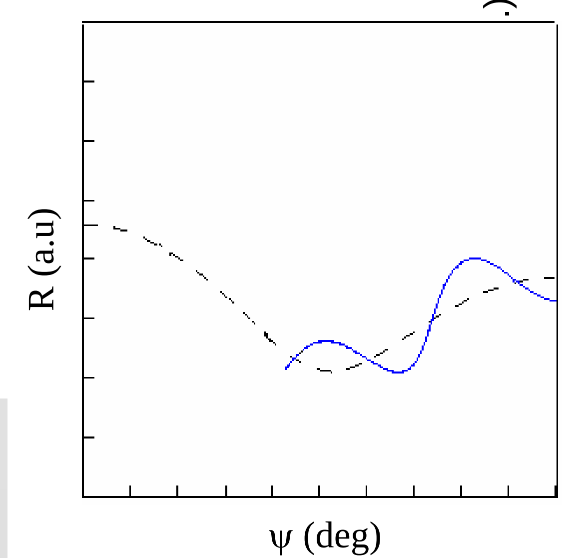
TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

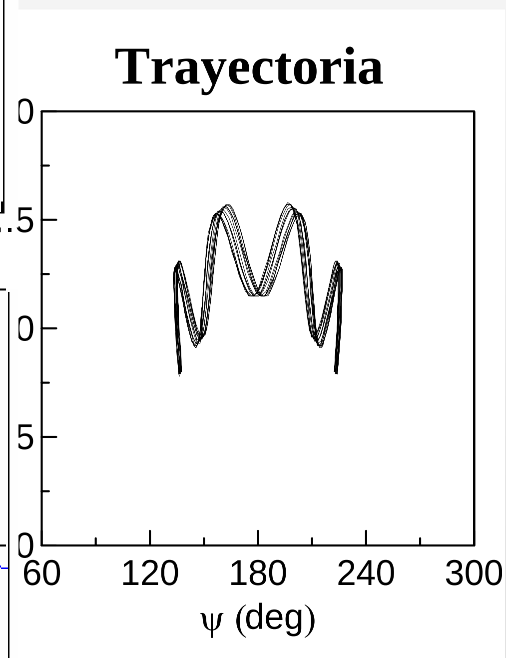
SISTEMA LiCN. 2GdL

MOVIMIENTO REGULAR





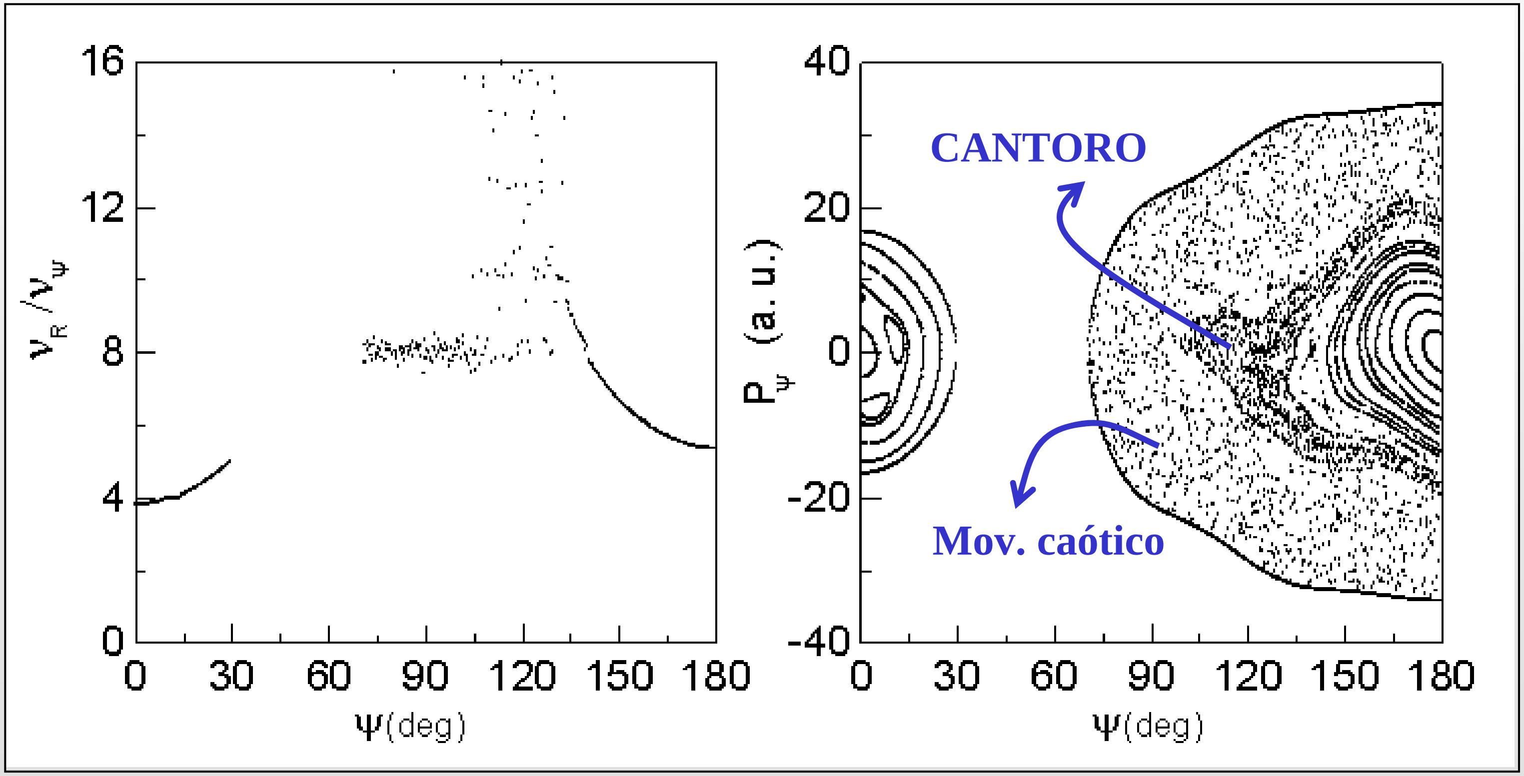




TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA LiCN. 2GdL

MOVIMIENTO CAÓTICO



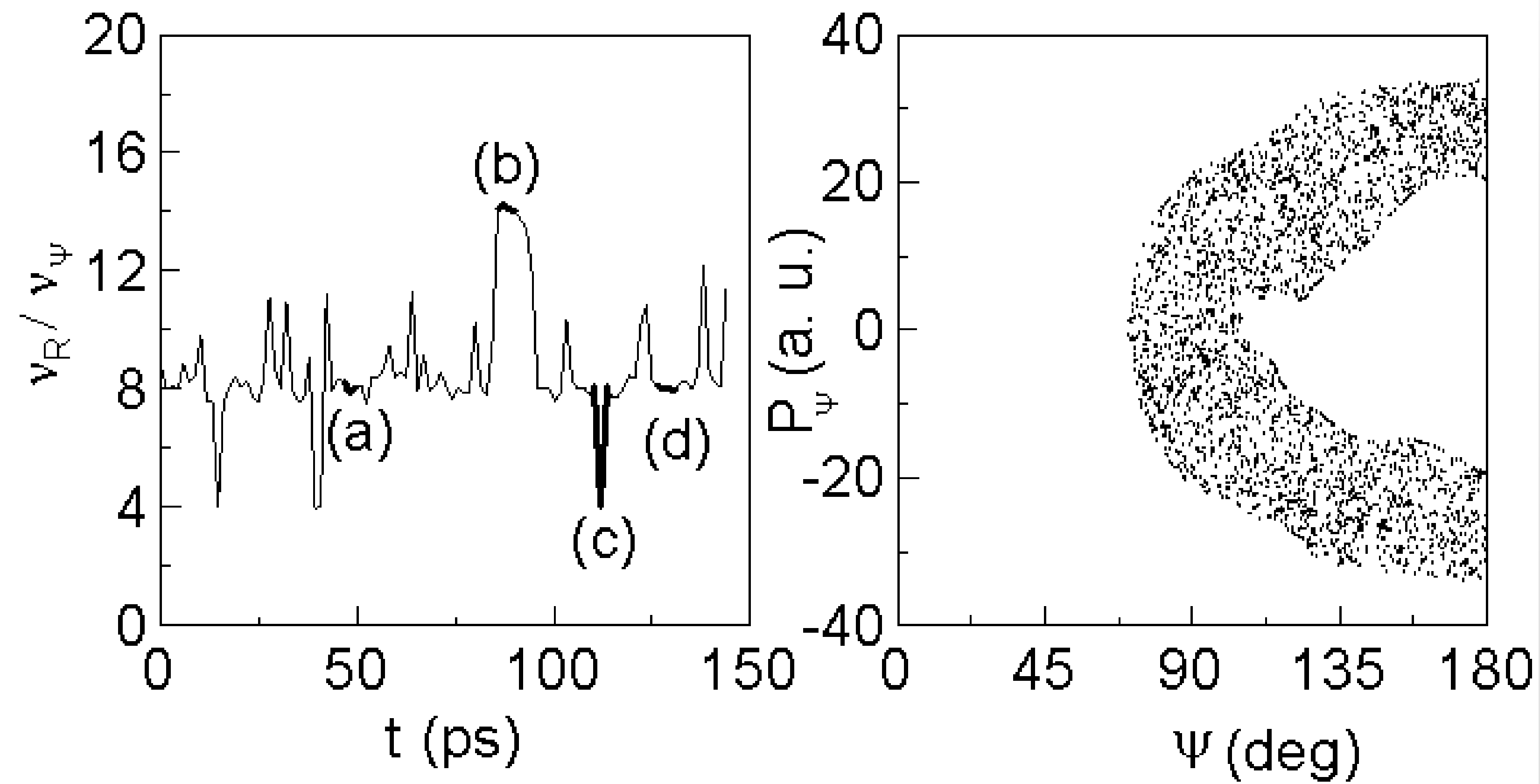
(Cálculo de las frecuencias fundamentales mediante el método de Laskar)

TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

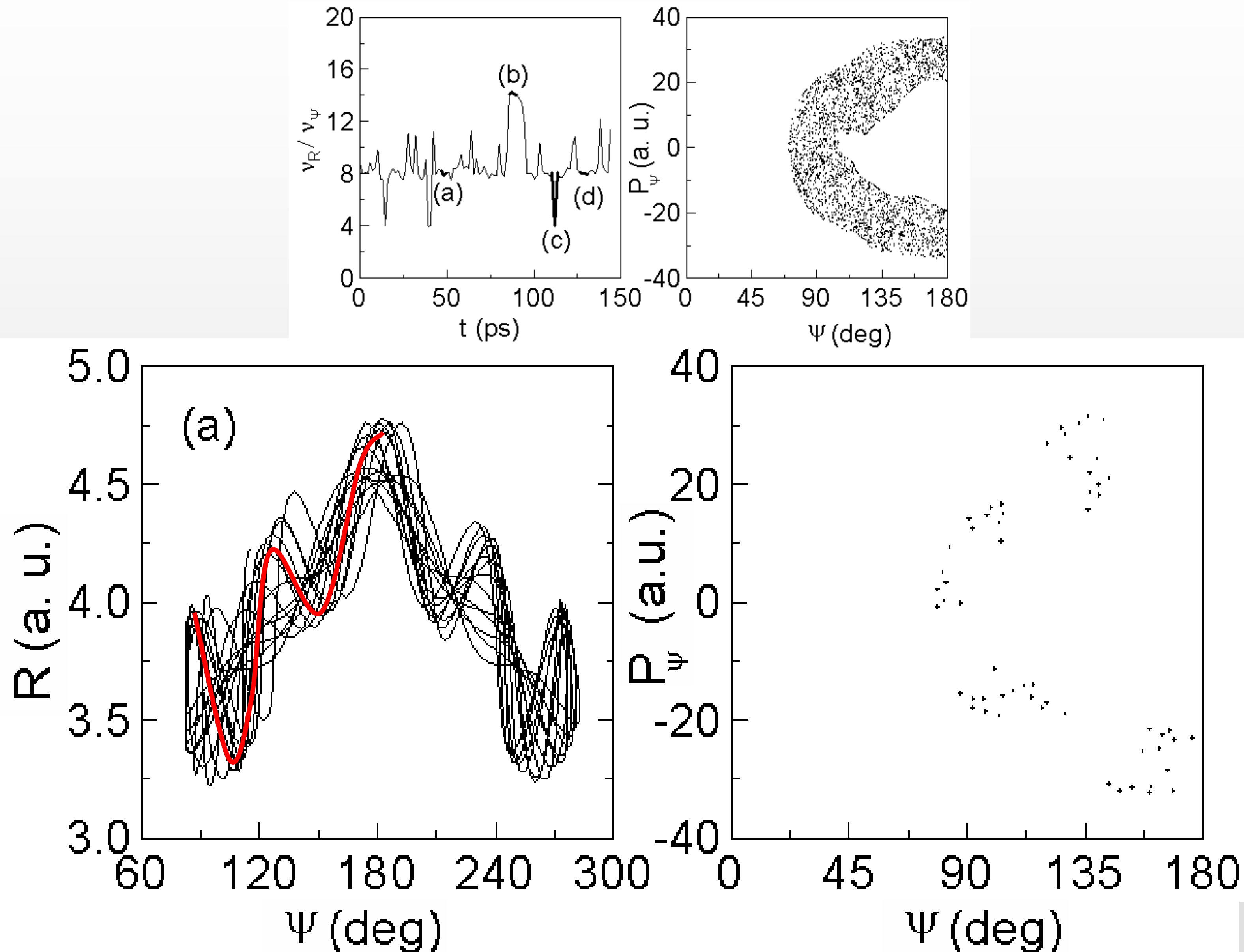
SISTEMA LiCN. 2GdL

MOVIMIENTO CAÓTICO

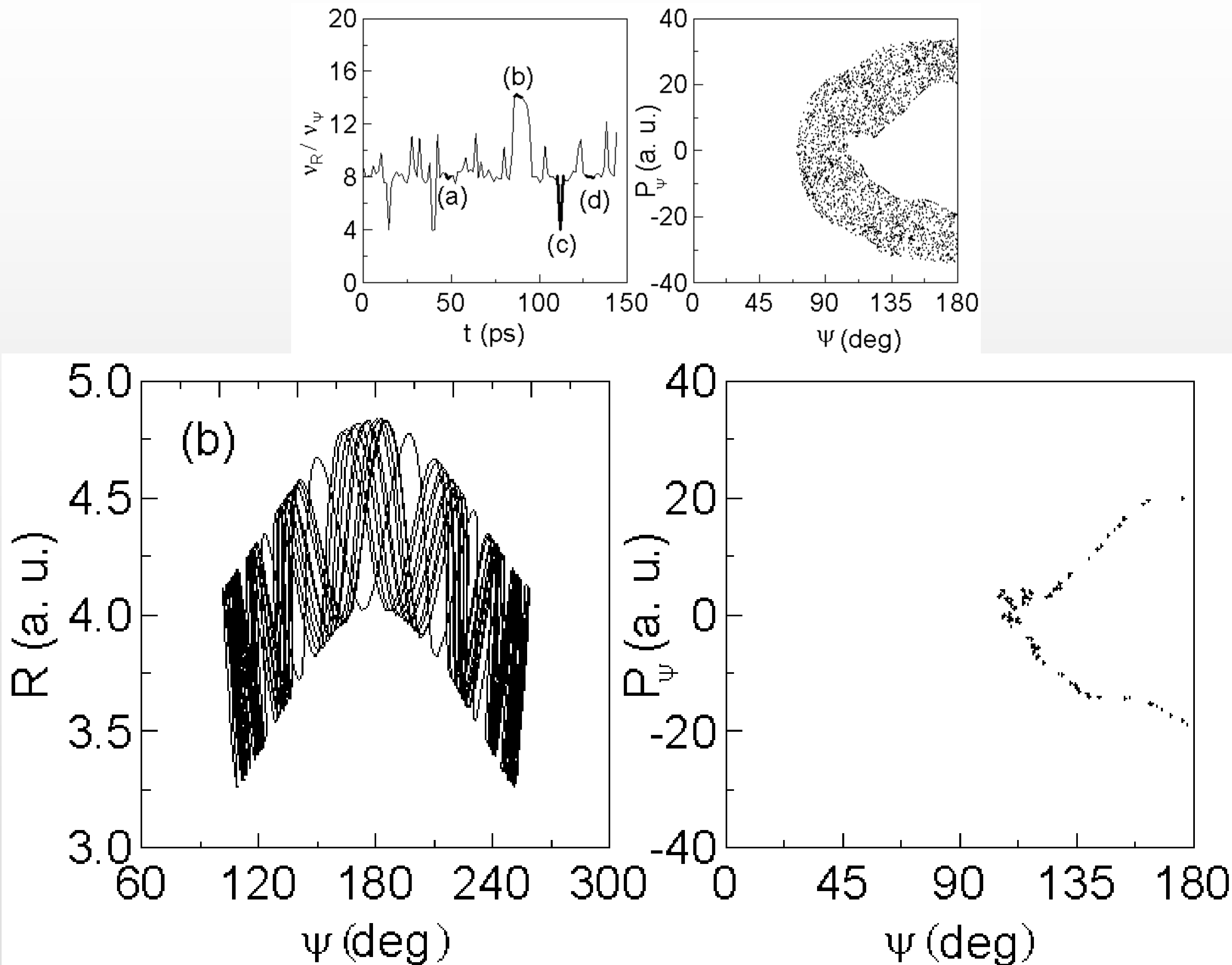
i. **Relación de frecuencias función del tiempo:** $\frac{\omega_R}{\omega_\psi} = f(t) \quad f(t)$ aperiódica



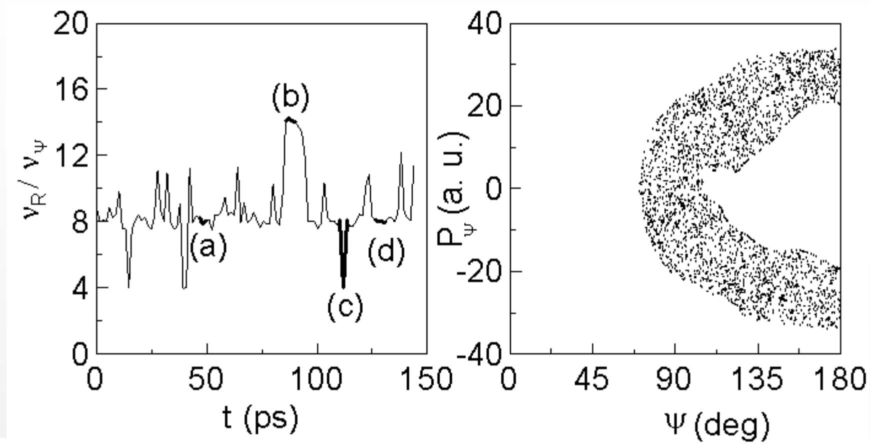
TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

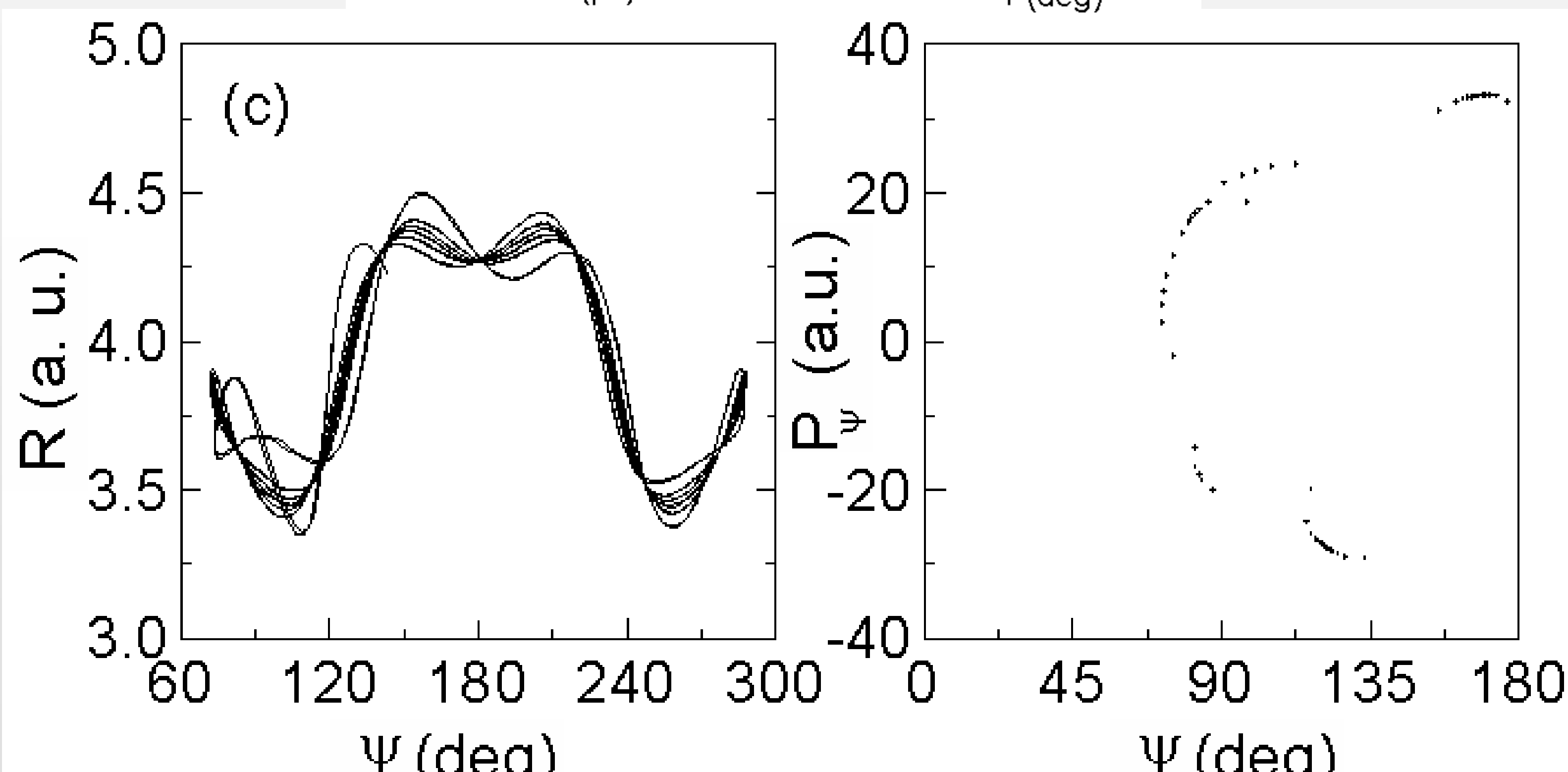


TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

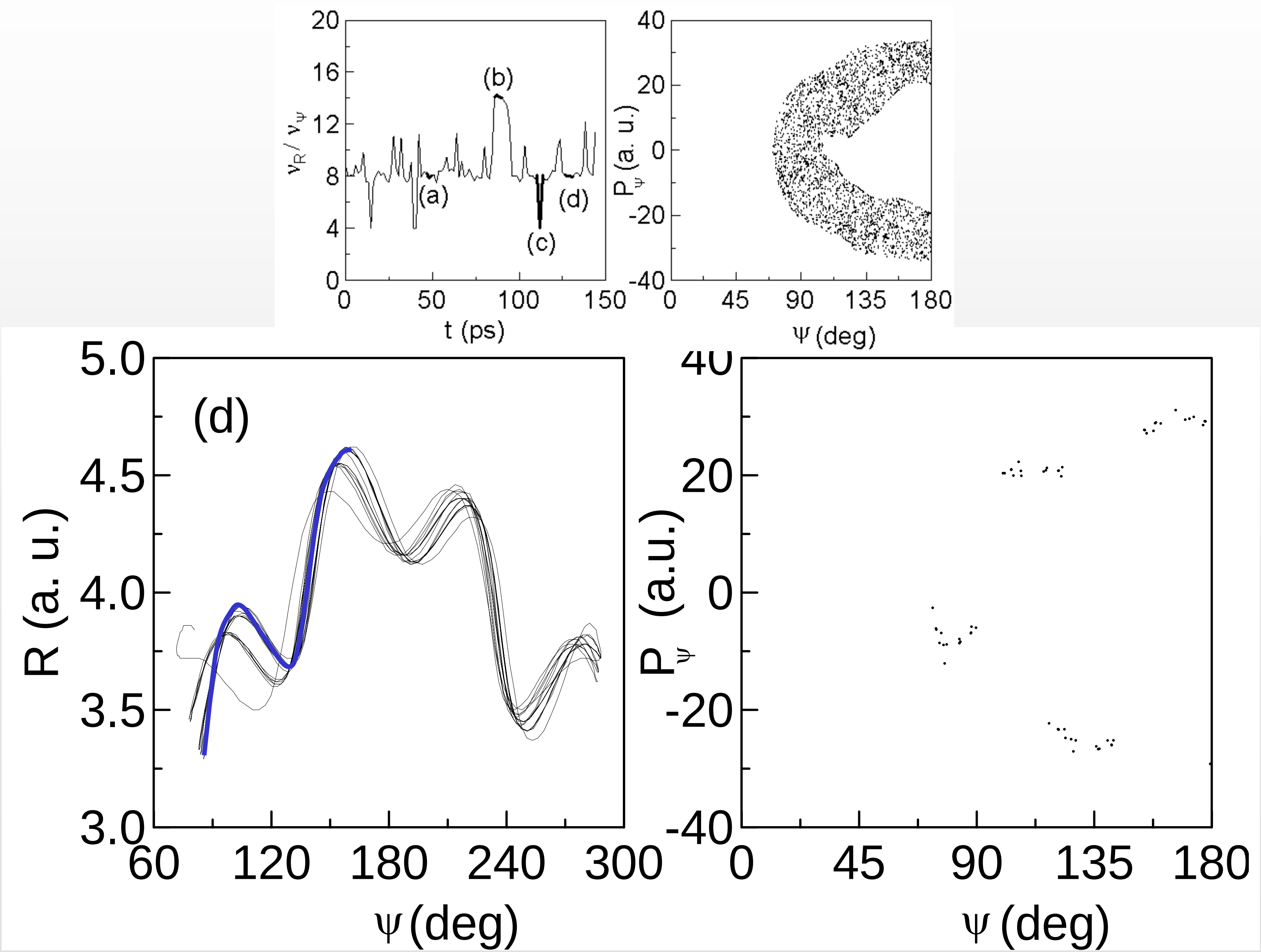


TRANSFERENCIA DE ENERGÍA





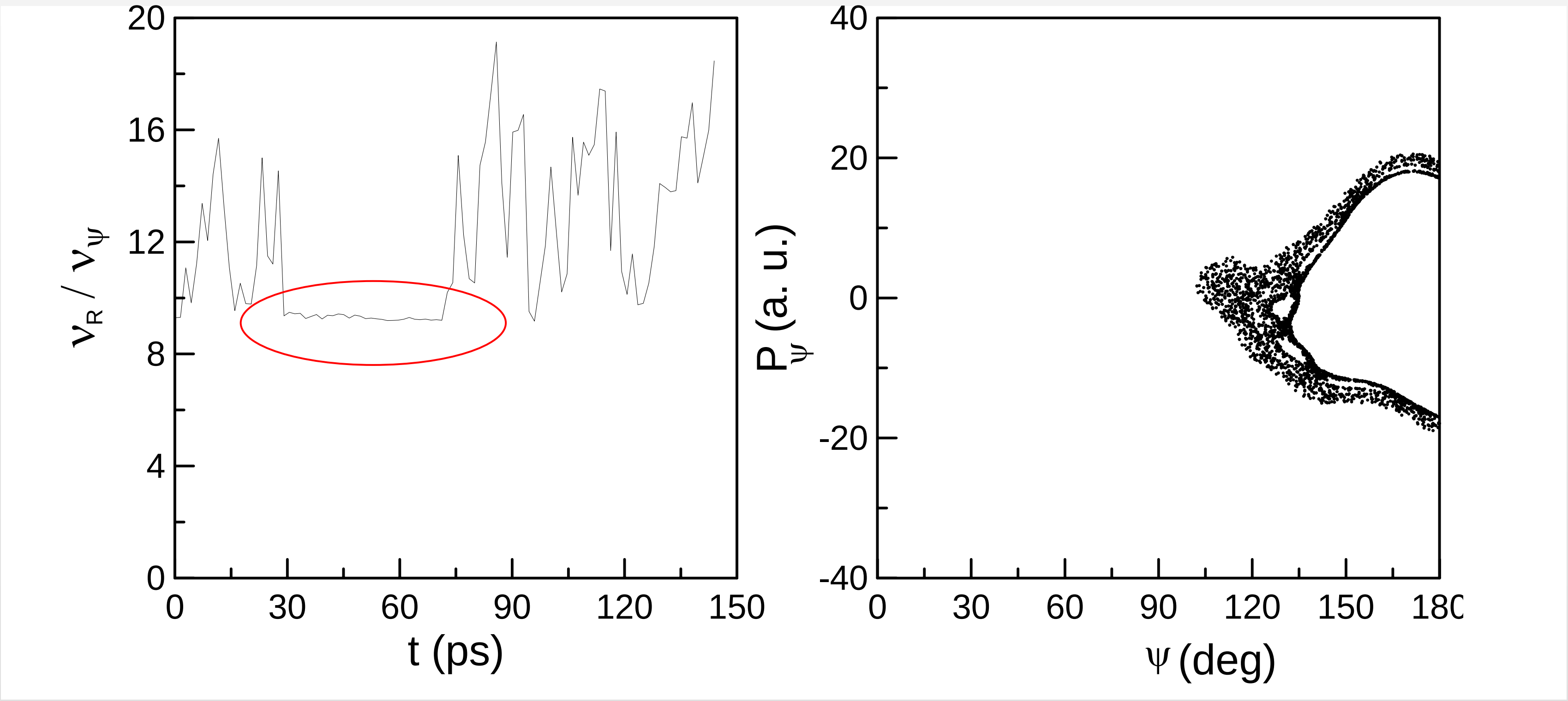
TRANSFERENCIA DE ENERGÍA



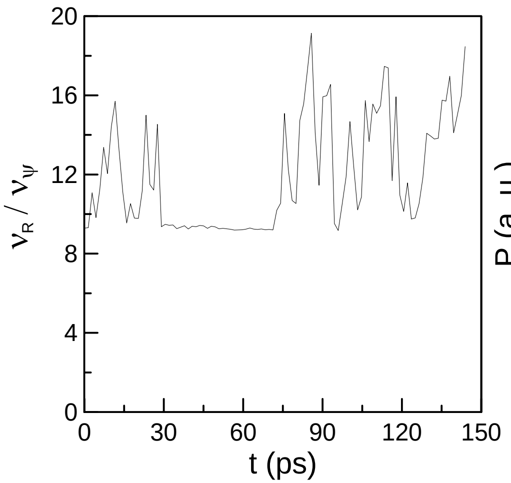
TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

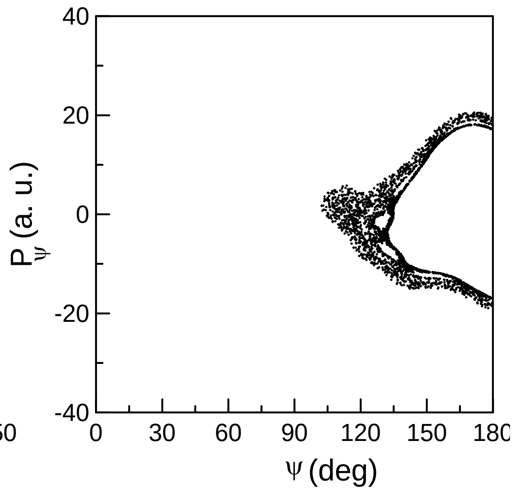
SISTEMA LiCN. 2GdL

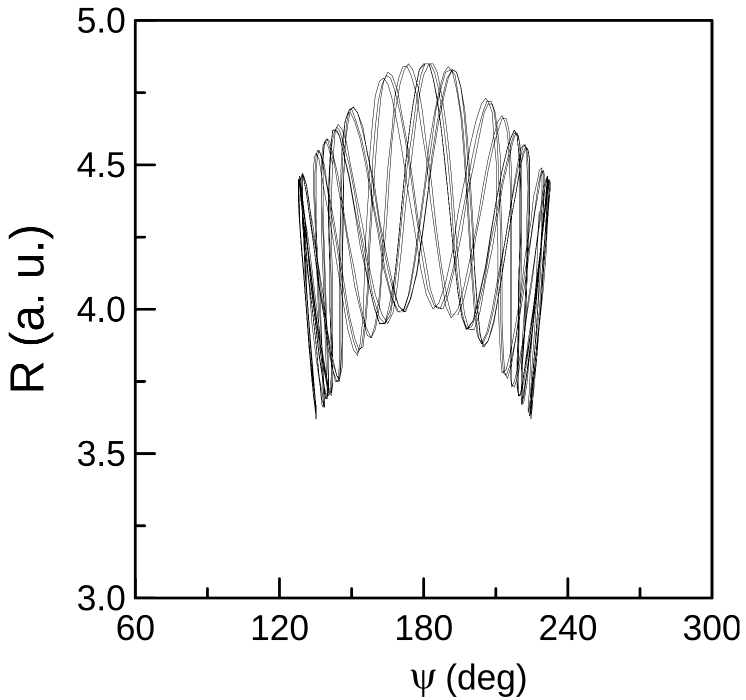
MOVIMIENTO CAÓTICO
ii. Confinamiento del movimiento. Cuellos de botella

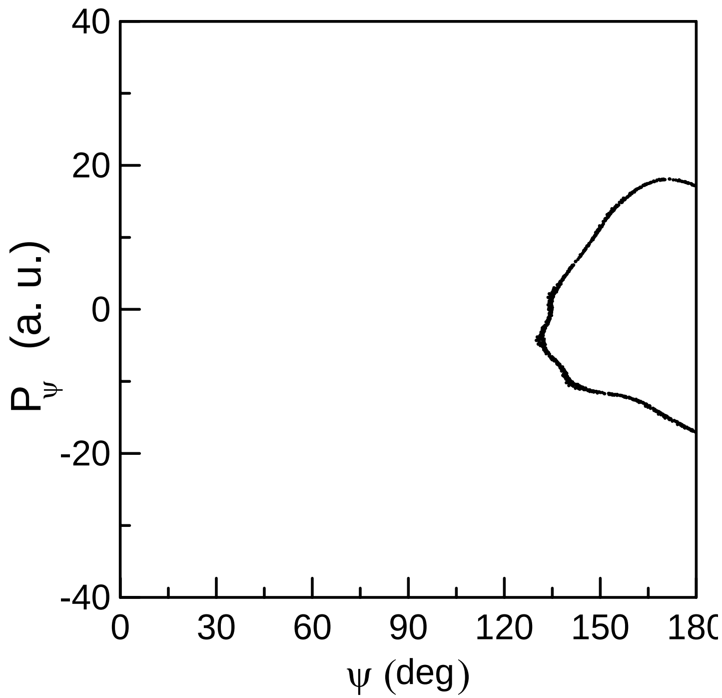


TRANSFERENCIA DE ENERGÍA









TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA DE TRES GRADOS DE LIBERTAD

¿EXISTEN BARRERAS TOTALES?

3 GdL → 6D. E = cte → 5D. Toros 3D no separan regiones 5D

Familia paramétrica de toros regulares

$$T \equiv \left\{ \text{toros} \left(\omega_{i=1,2,3} = \text{cte} \right) / \, \exists F \left(\omega_1, \omega_2, \omega_3 \right) = 0 \right\}$$

Tiene 4D y separa regiones 5D

En particular líneas resonantes $F\left(\omega_1, \omega_2, \omega_3\right) = 0 \equiv n_1\omega_1 + n_2\omega_2 + n_3\omega_3 = 0$

BARRERAS PARCIALES.

¿Existe realmente confinamiento?. Efecto real de:

– Toros. Alta densidad de toros regulares puede confinar trayectorias

– Cantoros y separatrices no parecen buenos candidatos

– Líneas de resonancia?

SISTEMA DE TRES GRADOS DE LIBERTAD

LÍNEAS DE RESONANCIA

$$p\,\nu_r + q\,\nu_\psi + s\,\nu_R = 0 \qquad p, q, s \in Z$$

En el mapa de frecuencias:

$$\frac{\nu_r}{\nu_R} = -\frac{q\,\nu_\psi}{p\,\nu_R} - \frac{s}{p}$$

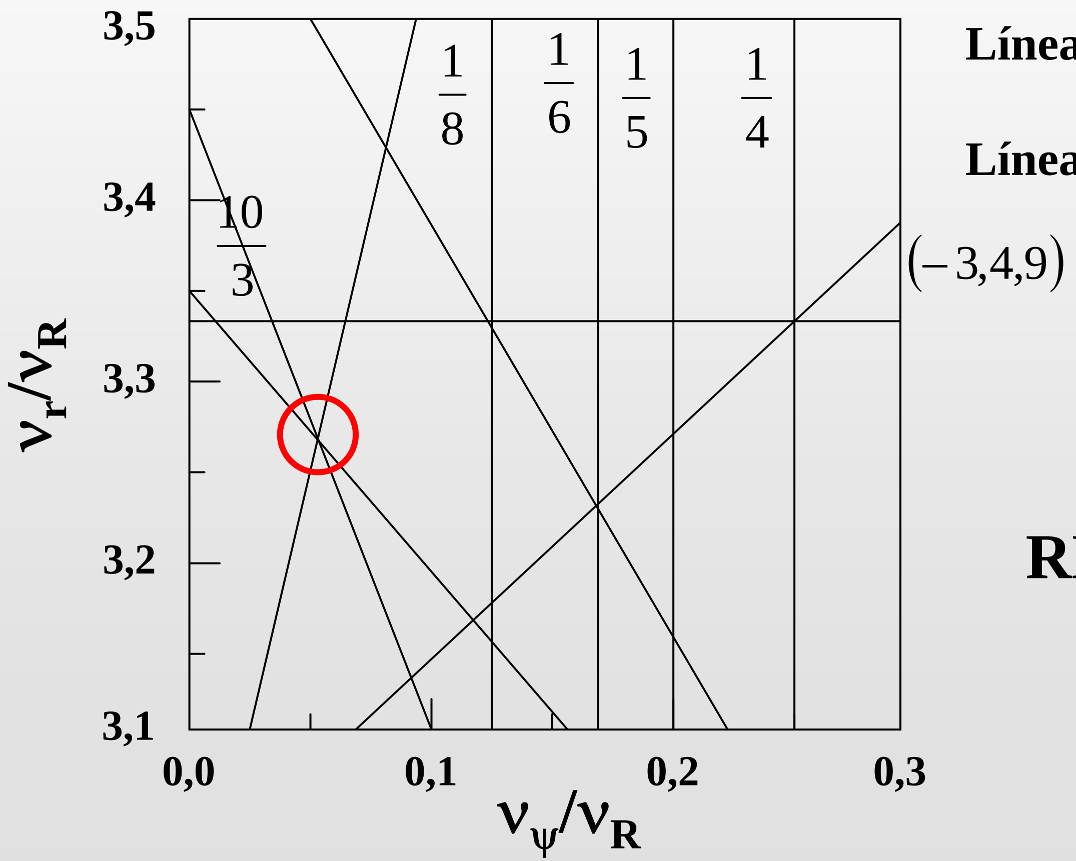
Es decir, las resonancias se presentan como líneas, de la forma

$$\frac{\nu_r}{\nu_R} = a\frac{\nu_\psi}{\nu_R} + b \qquad \text{con } a, b \in Q$$

TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA DE TRES GRADOS DE LIBERTAD

LÍNEAS DE RESONANCIA



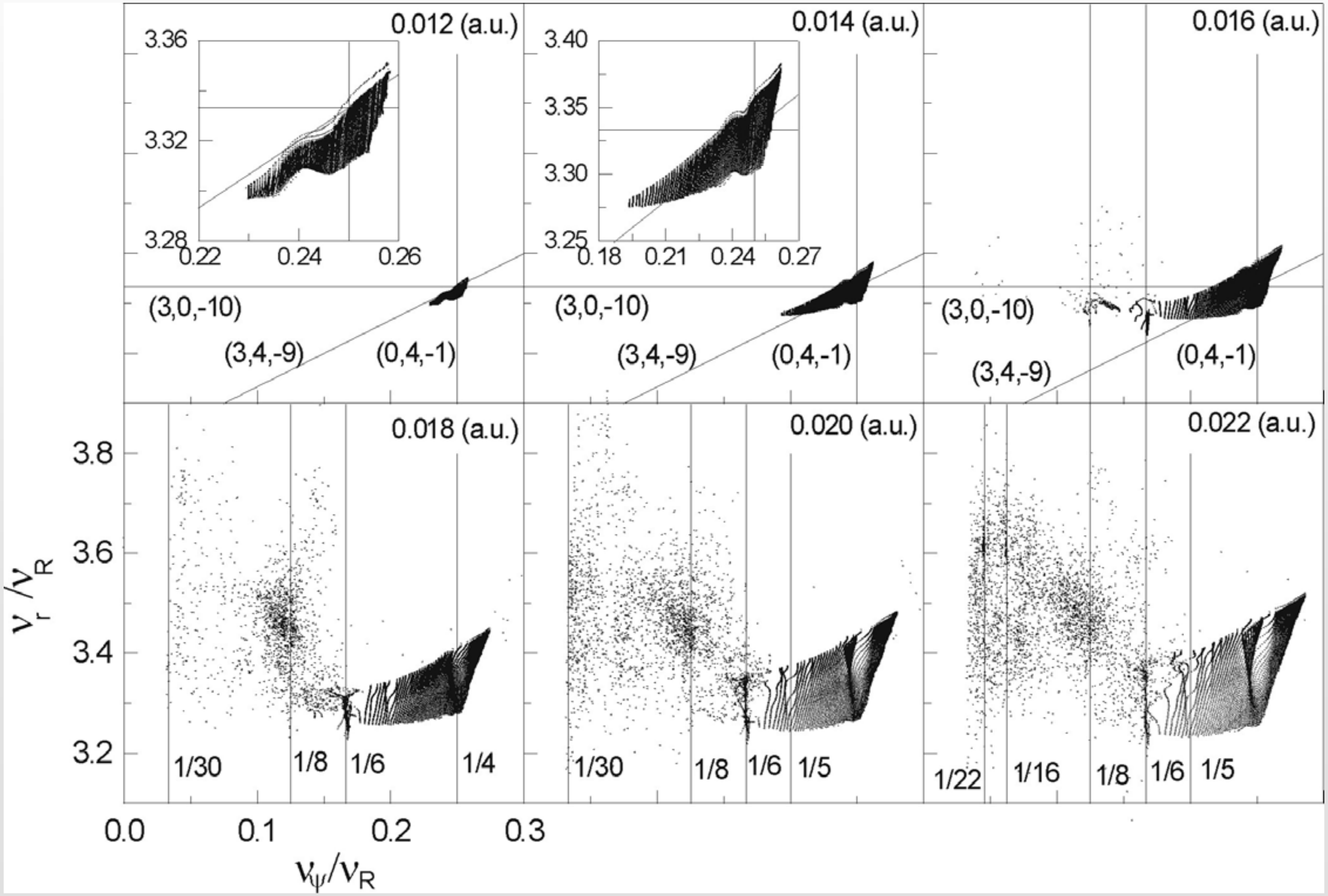
Líneas verticales $\dfrac{\nu_\psi}{\nu_R} = cte$

Líneas horizontales $\dfrac{\nu_r}{\nu_R} = cte$

RED DE ARNOLD

TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

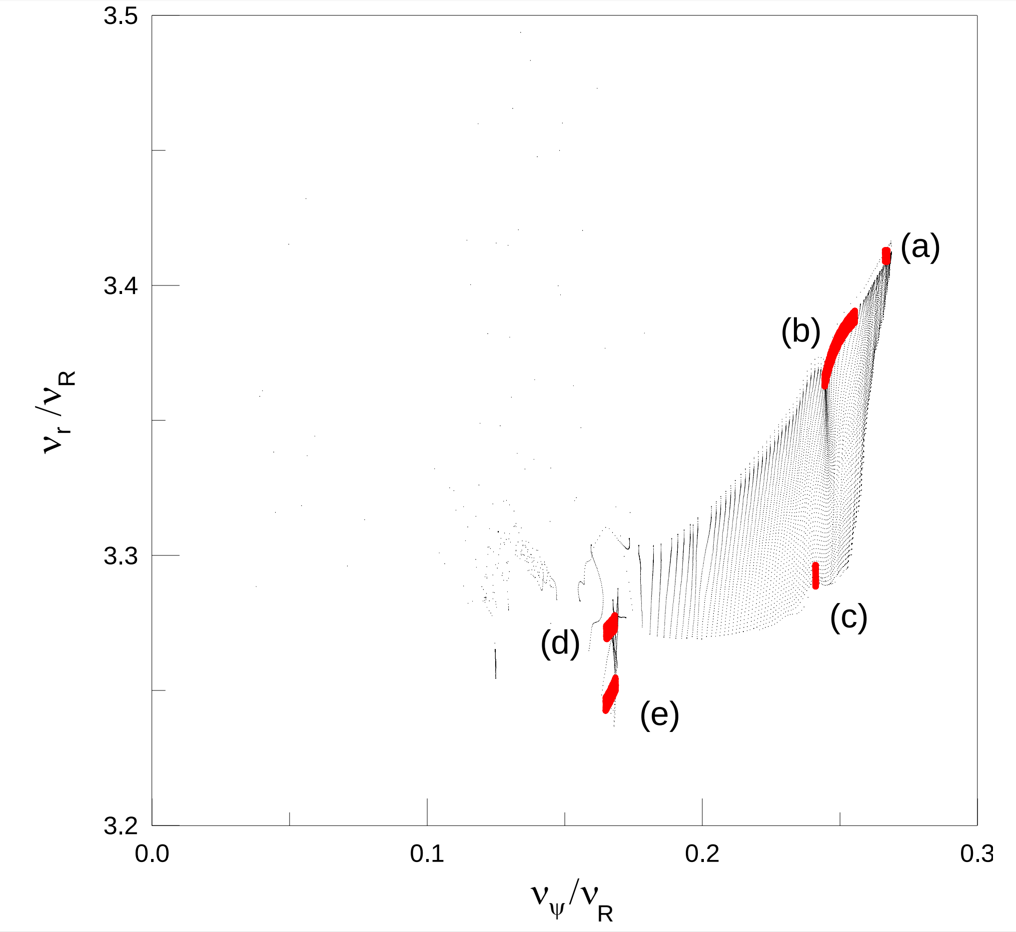
SISTEMA LiCN. 3GdL



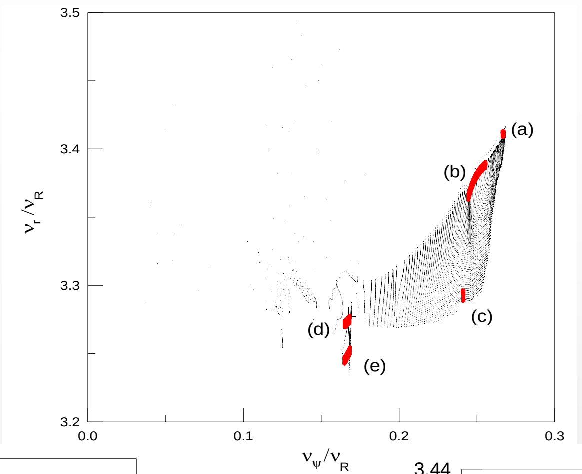
TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

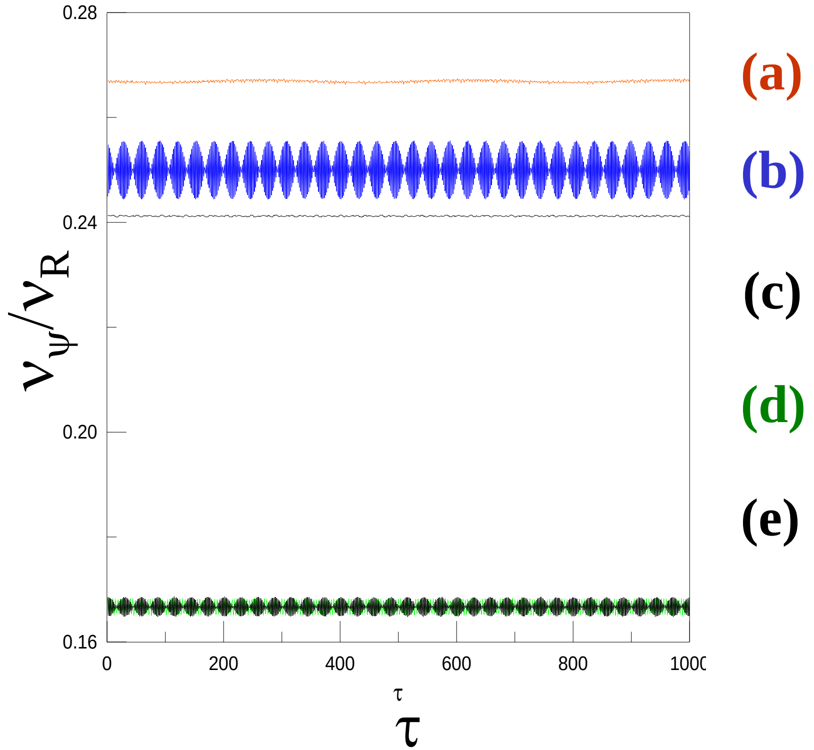
SISTEMA LiCN. 3GdL

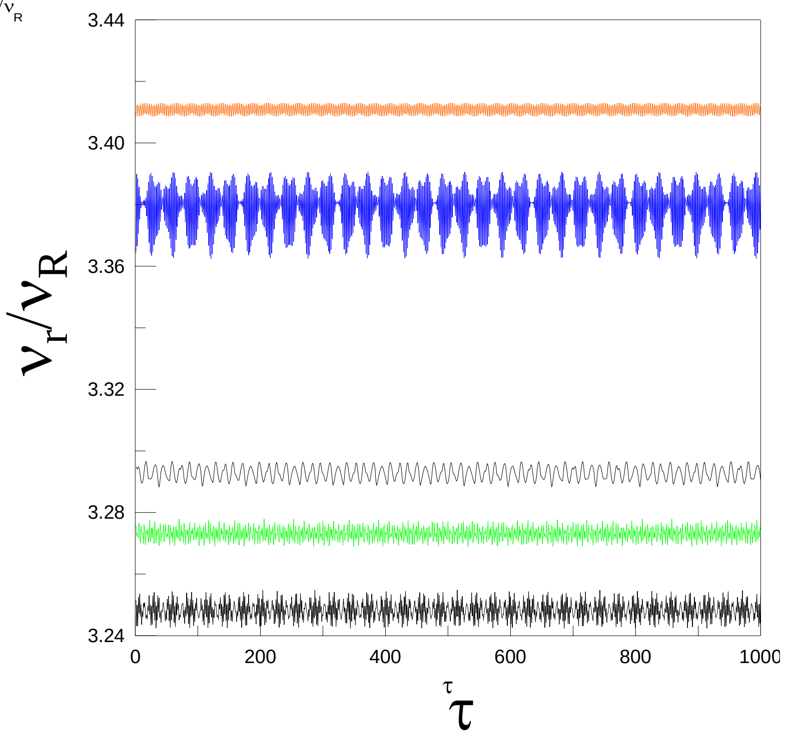
MOVIMIENTO REGULAR



TRANSFERENCIA DE ENERGÍA



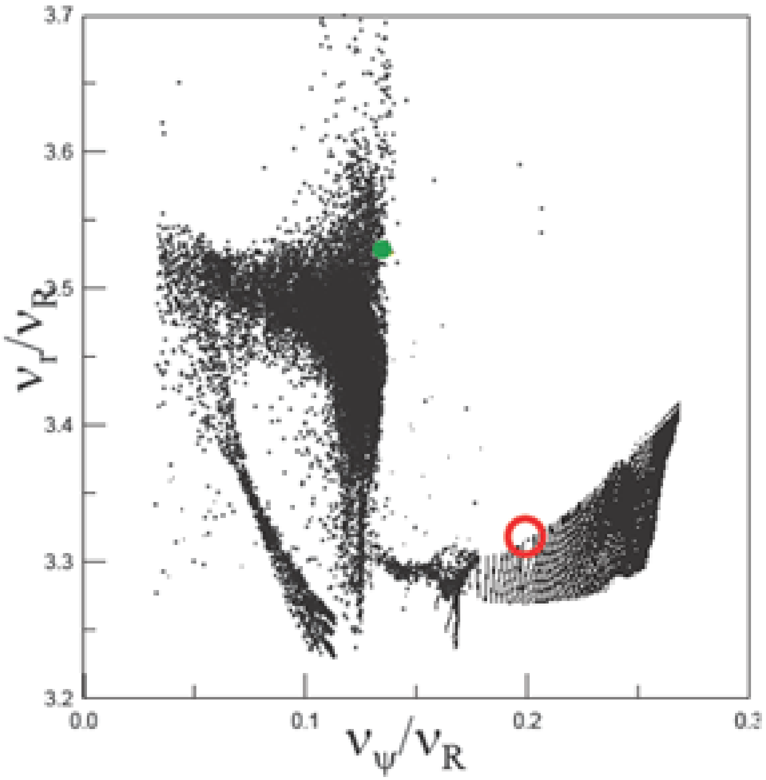




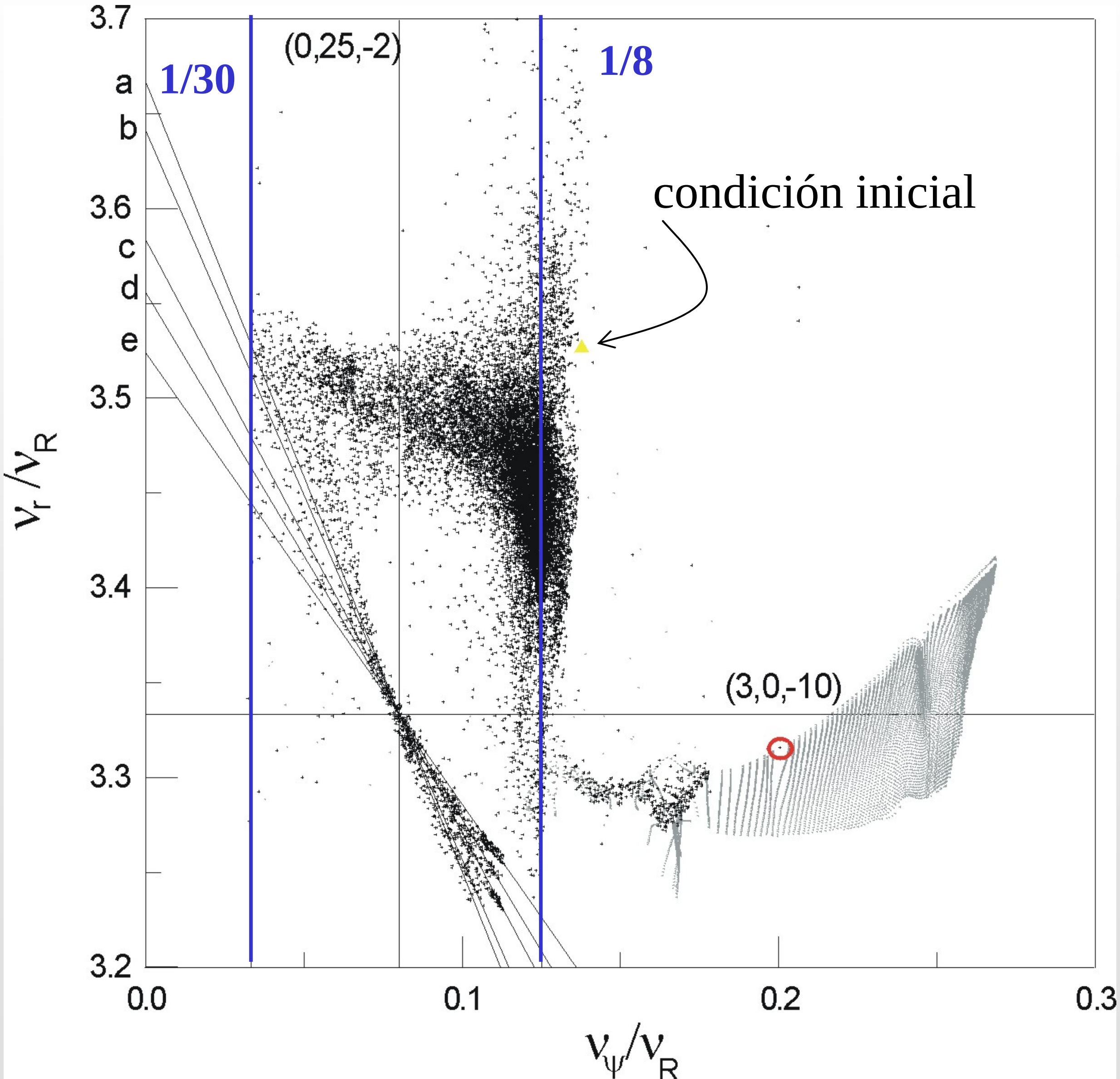
TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA LiCN. 3GdL

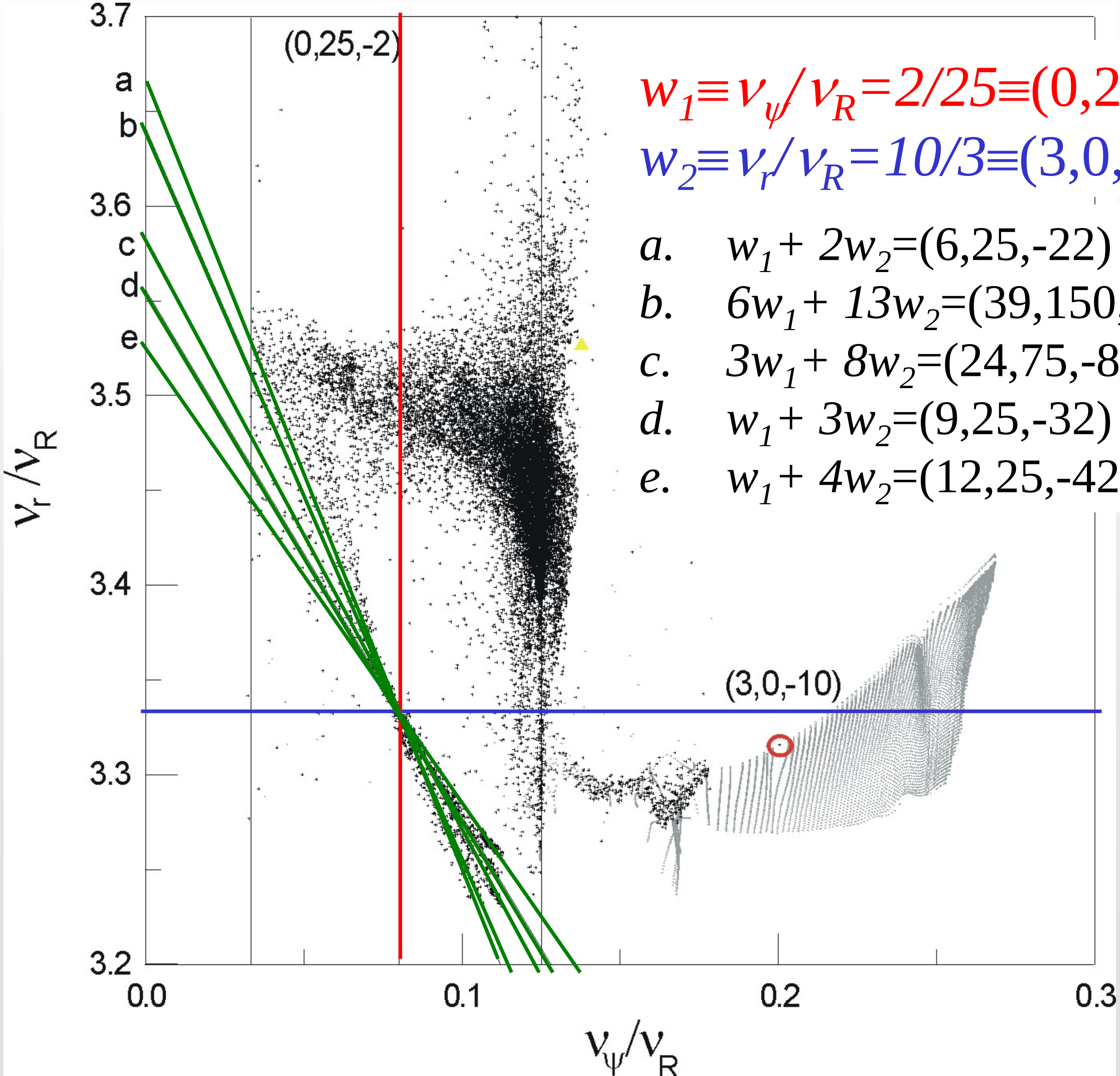
MOVIMIENTO CAÓTICO



TRANSFERENCIA DE ENERGÍA



TRANSFERENCIA DE ENERGÍA



$w_1 \equiv \nu_\psi/\nu_R = 2/25 \equiv (0,25,-2)$

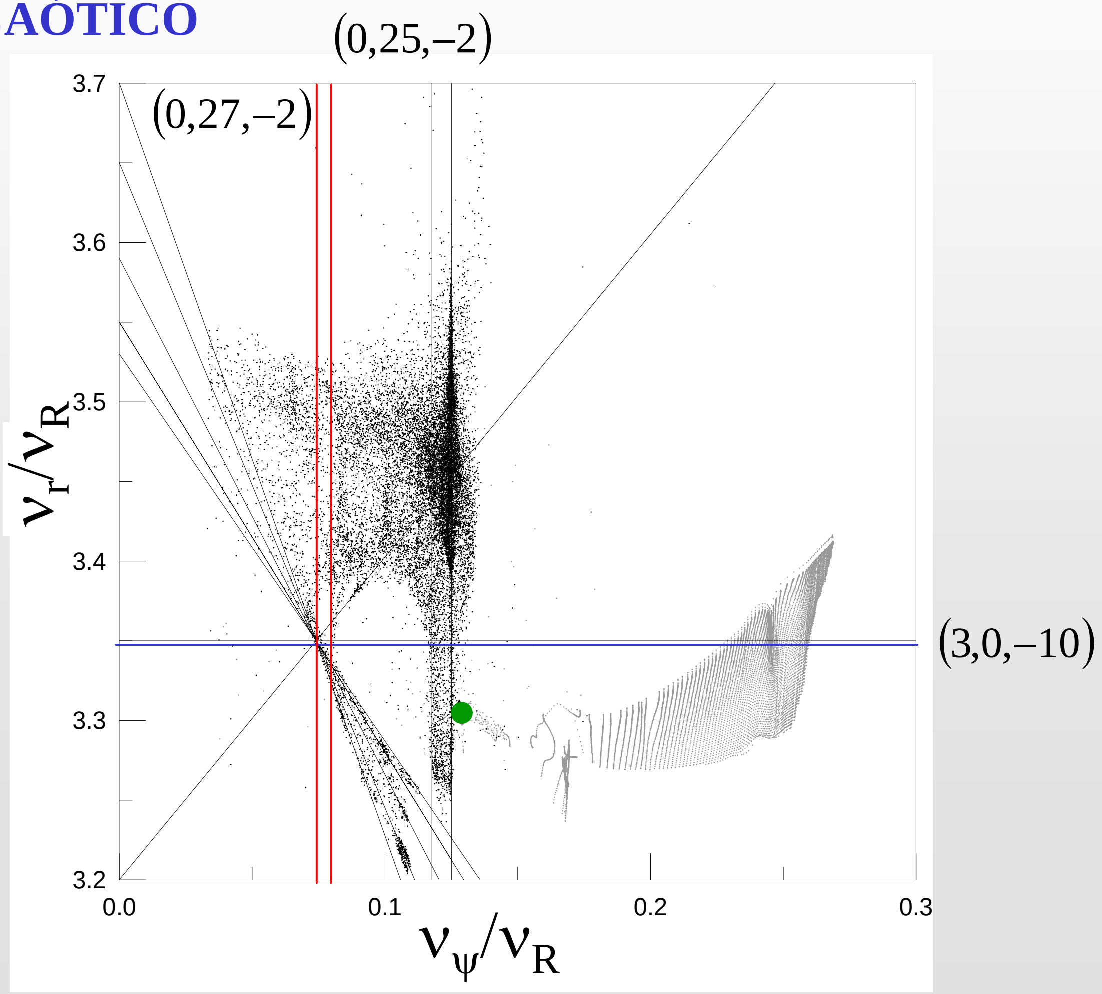
$w_2 \equiv \nu_r/\nu_R = 10/3 \equiv (3,0,-10)$

a. $w_1 + 2w_2 = (6,25,-22)$
b. $6w_1 + 13w_2 = (39,150,-142)$
c. $3w_1 + 8w_2 = (24,75,-86)$
d. $w_1 + 3w_2 = (9,25,-32)$
e. $w_1 + 4w_2 = (12,25,-42)$

TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA LiCN. 3GdL

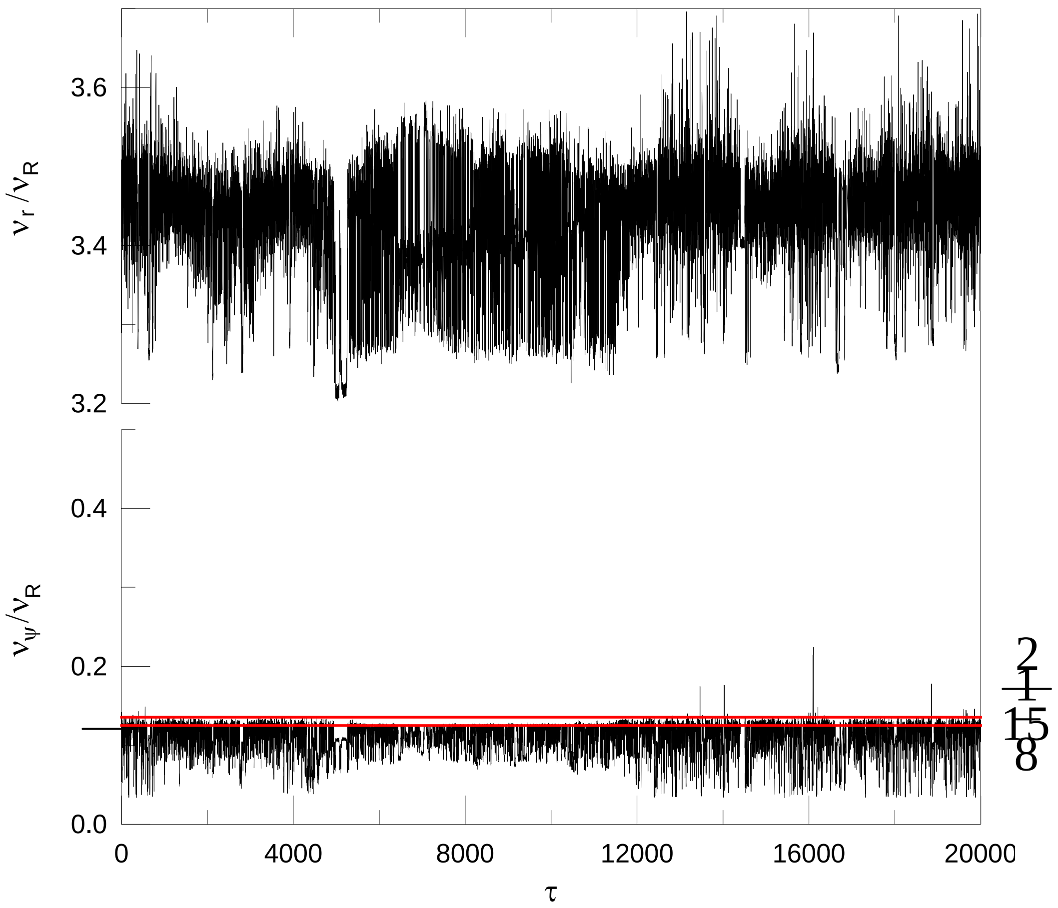
MOVIMIENTO CAÓTICO



TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA LiCN. 3GdL

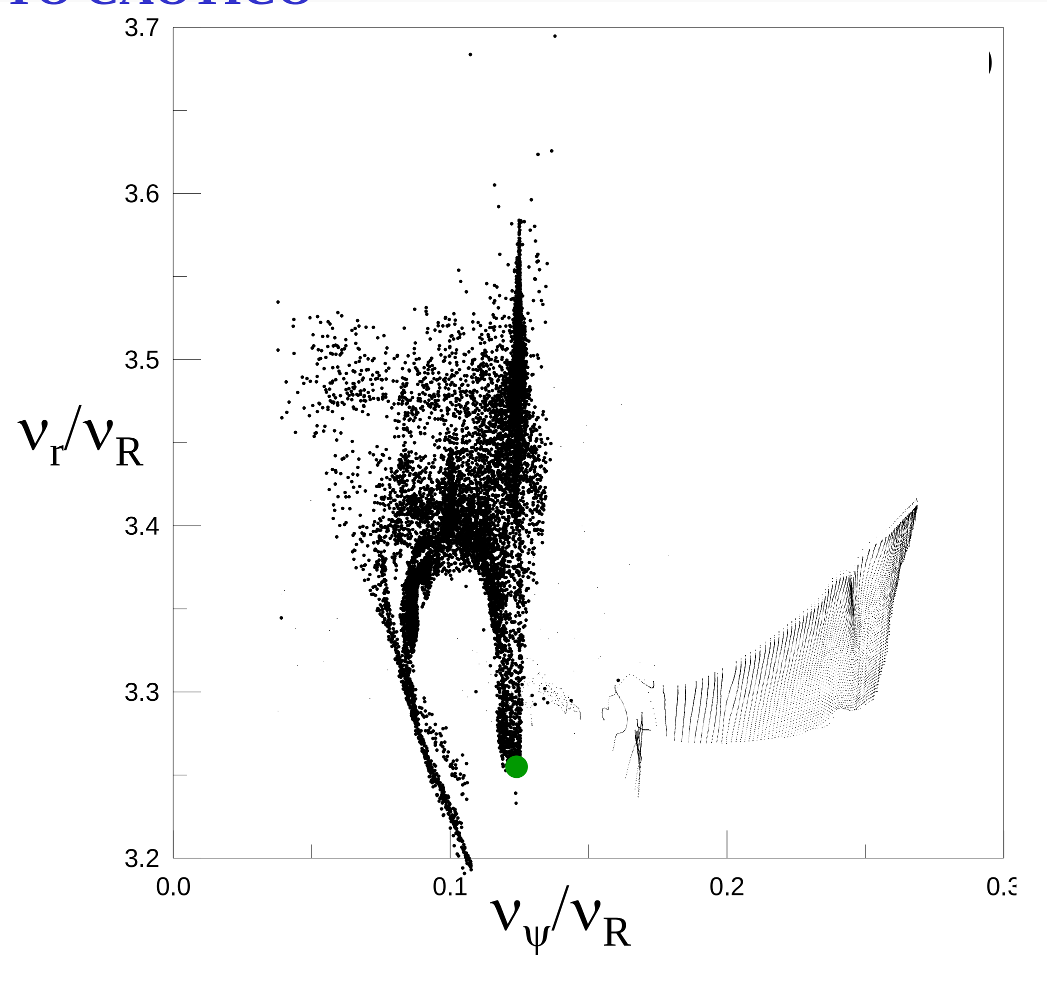
MOVIMIENTO CAÓTICO



TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

SISTEMA LiCN. 3GdL

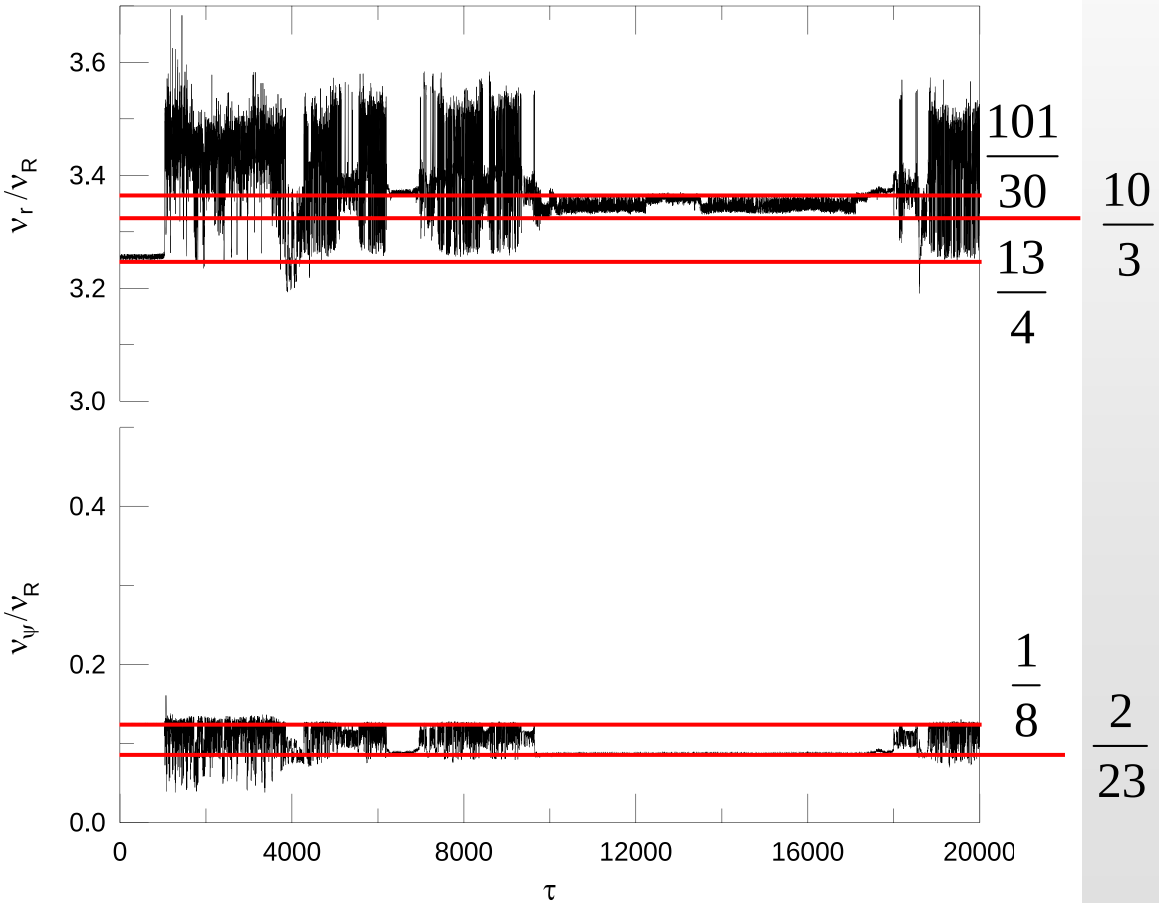
MOVIMIENTO CAÓTICO



TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

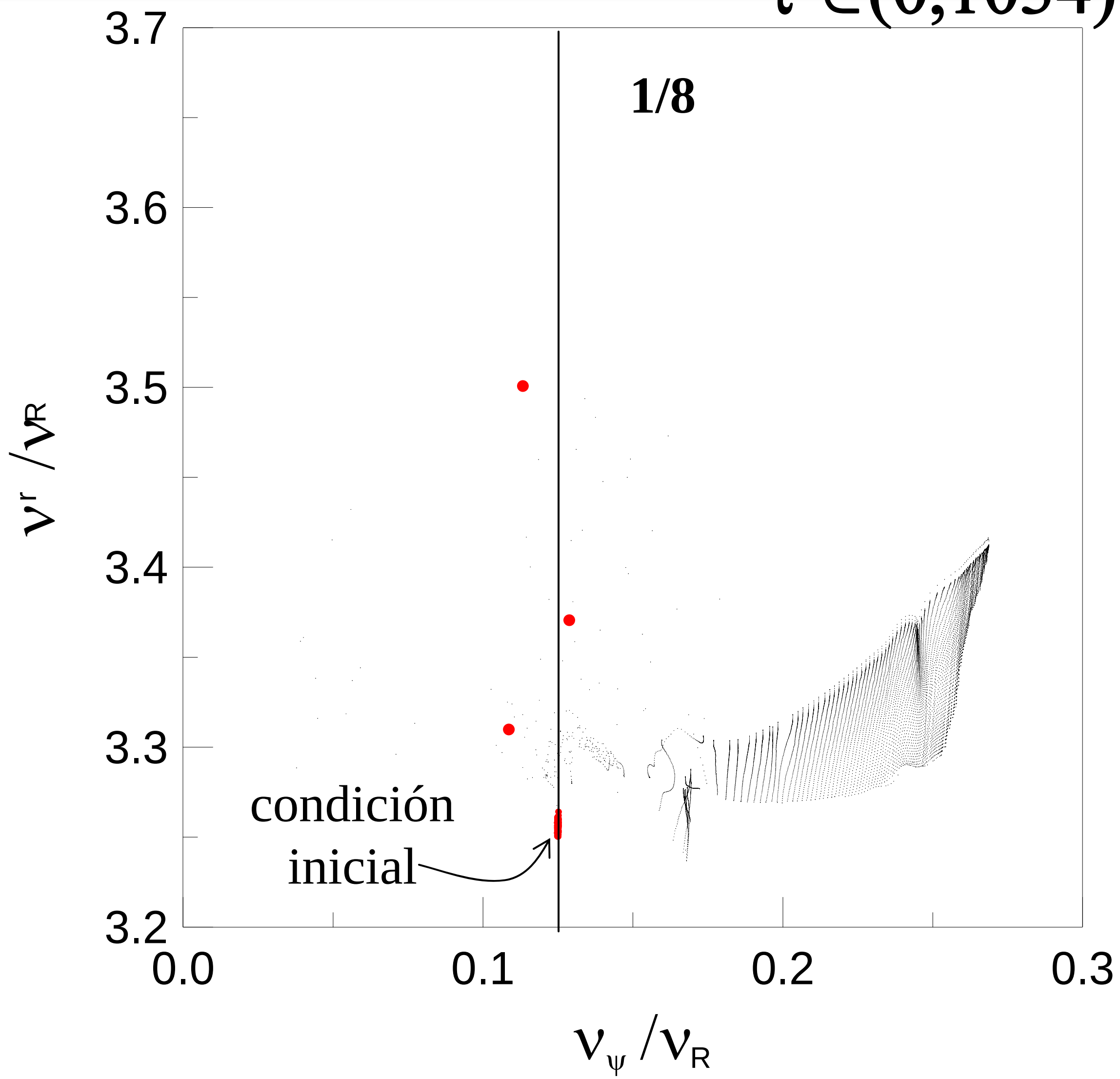
SISTEMA LiCN. 3GdL

MOVIMIENTO CAÓTICO



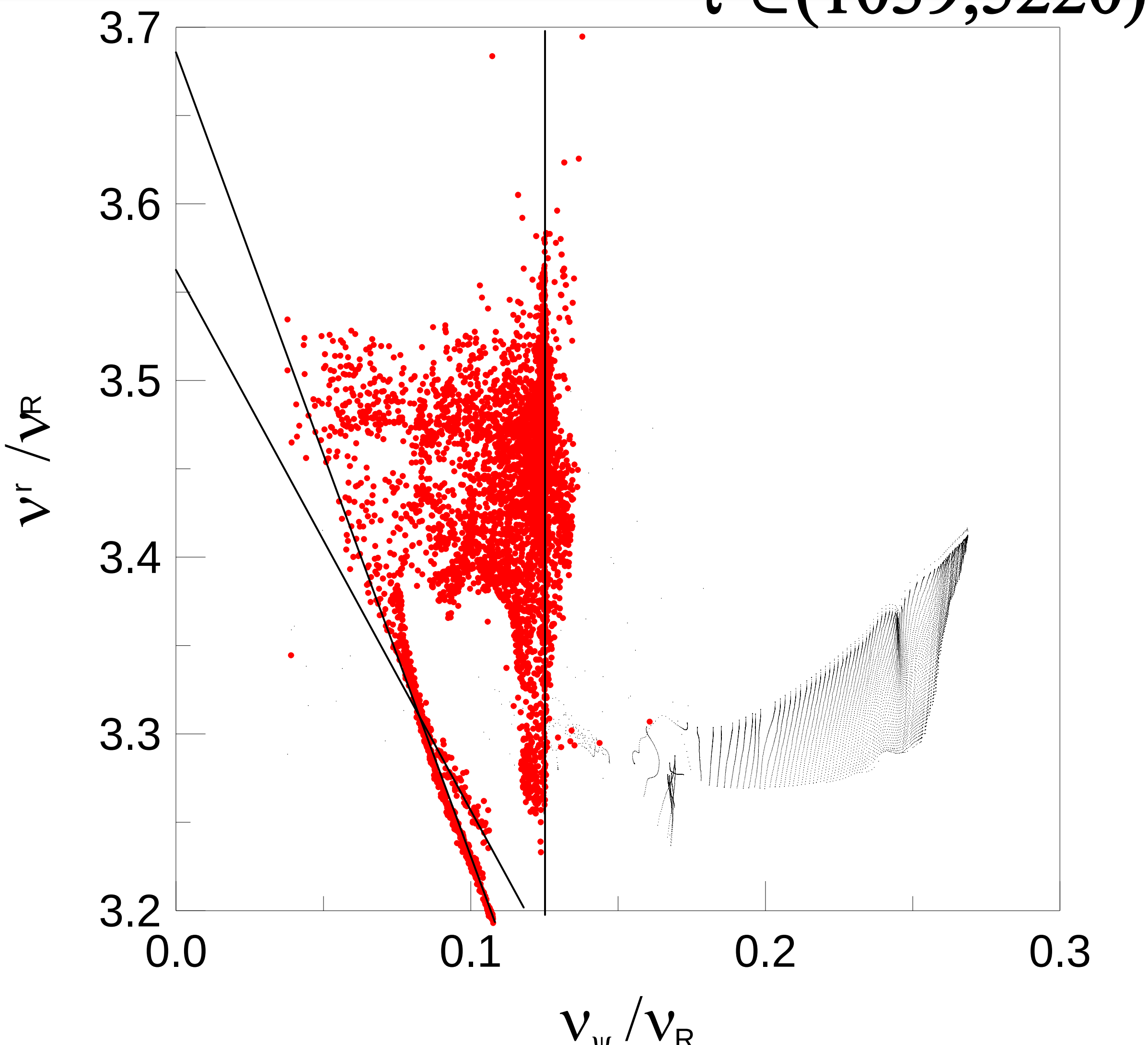
TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

$\tau \in (0,1034)$

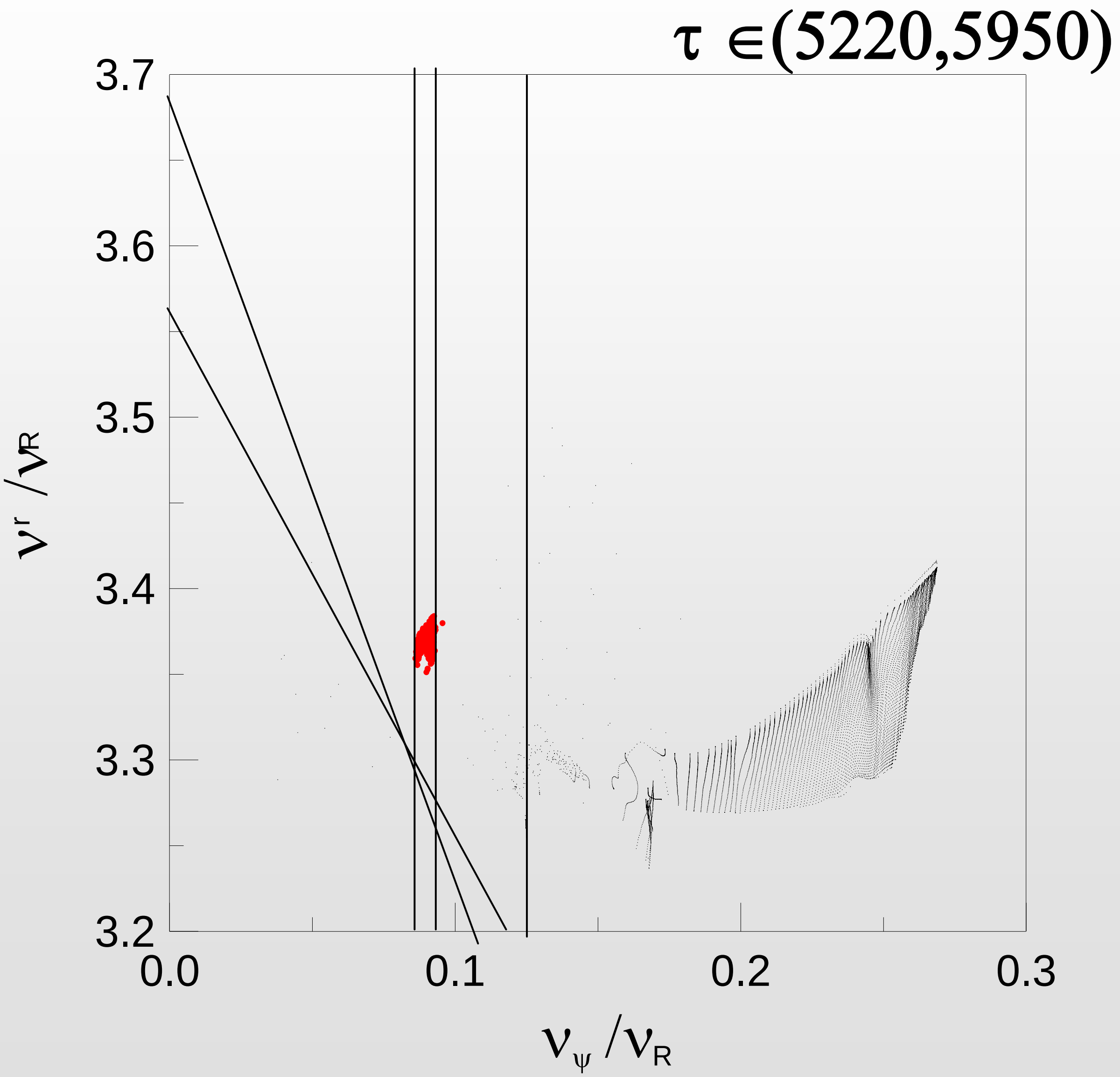


TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

$\tau \in (1039,5220)$

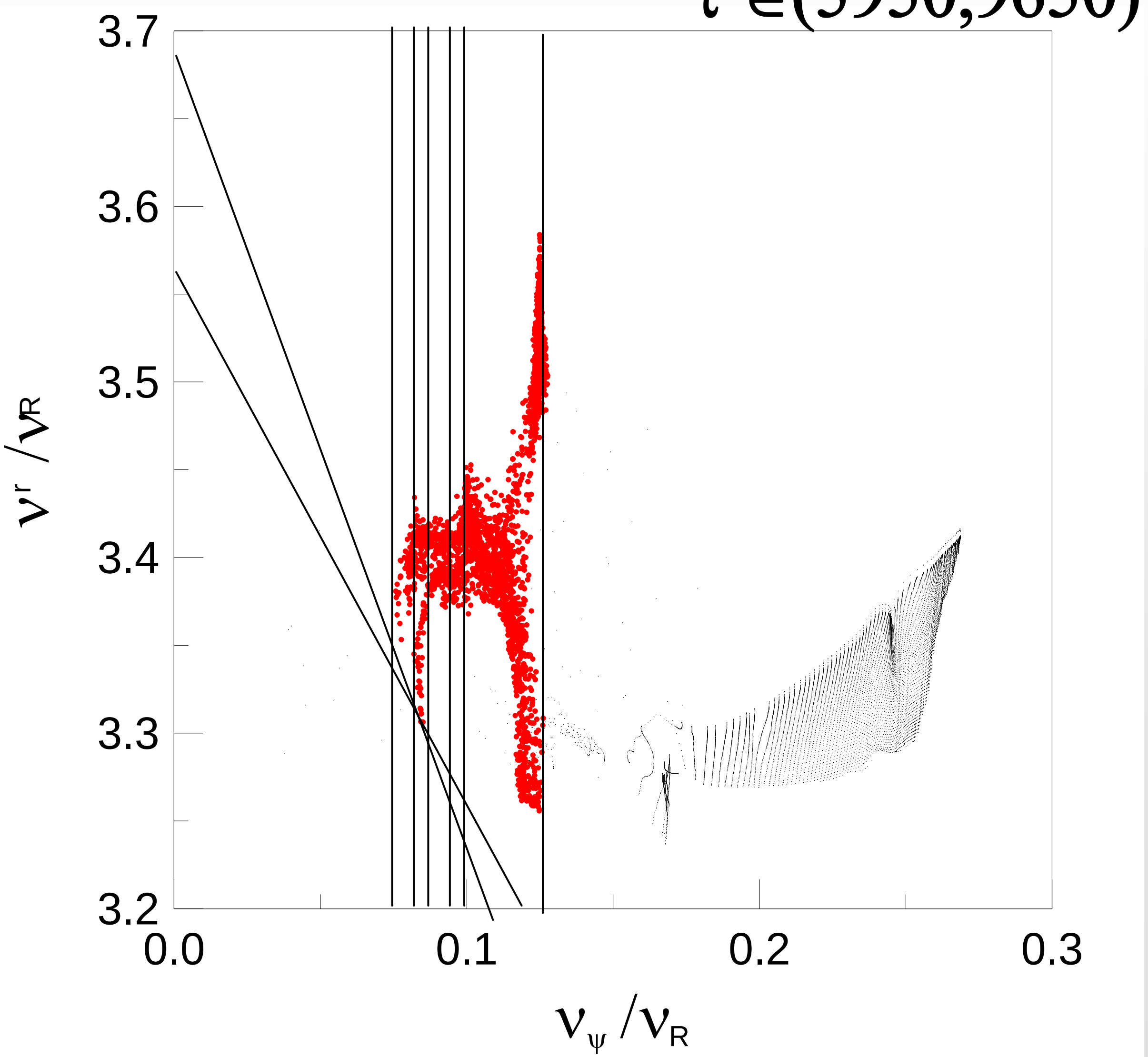


TRANSFERENCIA DE ENERGÍA



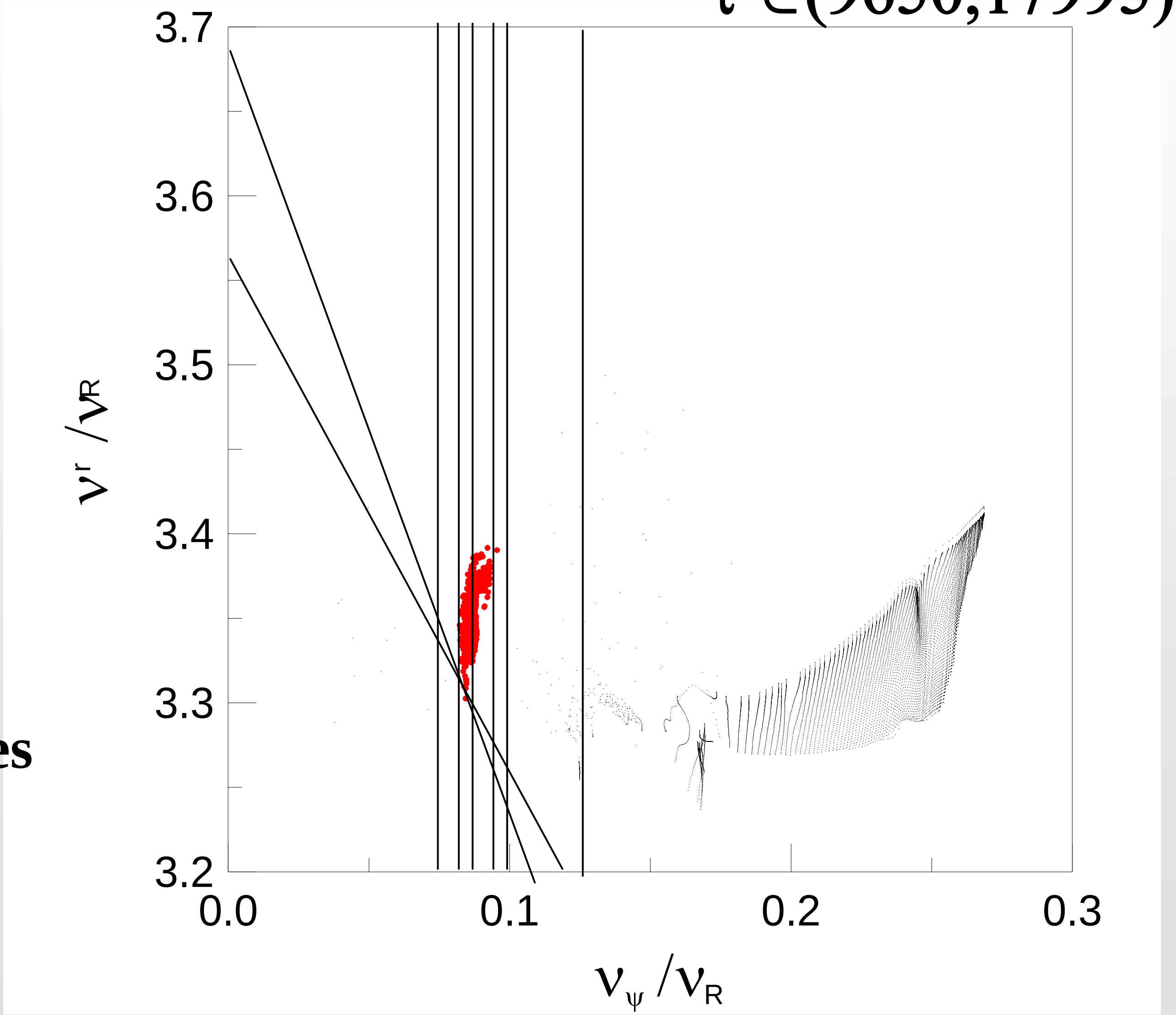
TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

$\tau \in (5950,9650)$



TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

$\tau \in (9650,17995)$



Red de Arnold

⇓

Barreras parciales