
Propiedades Analíticas del Espectro de Rotación Molecular

Gustavo Bautista Carbajal

Departamento de Física

Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

Abril de 2005

Contenido

Introducción	3
------------------------	---

Capítulo 1

Parametrizaciones de la matriz de rotación y variables mecánicas

importantes	9
1.1 El cuerpo rígido y su movimiento de rotación	9
1.2 Algunas parametrizaciones de la matriz de rotación	10
1.3 Cinemática de rotación	18
1.4 Propiedades de la matriz de inercia	21

Capítulo 2

El cuerpo rígido libre de torcas

2.1 Ecuaciones de movimiento rotacional	23
2.2 El cuerpo rígido libre de torcas	25
2.3 Coordenadas esferoconales	29
2.4 El hamiltoniano en coordenadas esferoconales	30
2.5 Ecuación de hamilton-Jacobi en coordenadas esferoconales	37

Capítulo 3

El cuerpo rígido cuántico

3.1 El operador de energía cinética \hat{K}_c y los operadores de momento angular $\hat{\mathbf{L}}$ y $\hat{\mathbf{J}}$	40
3.2 Los estados del sistema. Eigenfunciones comunes de \hat{H} , $\hat{\mathbf{J}}^2$ y \hat{J}_z	45

Capítulo 4

Los operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ y $\hat{\mathbf{L}}^T \xi \hat{\mathbf{L}}$ en coordenadas esferoconales . . .	50
4.1 La transformación de coordenadas	50
4.2 El operador $\hat{\mathbf{L}}$ en coordenadas esferoconales	51
4.3 El operador $\hat{\mathbf{L}}^2$ en coordenadas esferoconales	53
4.4 El operador $\hat{\mathbf{L}}^T \xi \hat{\mathbf{L}}$ en coordenadas esferoconales	54

Capítulo 5

Características de las funciones de onda	56
5.1 La ecuación de Lamé y los armónicos esferoconales	57
5.2 Cálculo de los armónicos esferoconales de menor orden	62
5.3 Descripción cualitativa de los niveles de energía para $l =$ 1, 2, 3	69
Conclusiones	74
Perspectivas	76
Apéndice A	77
Apéndice B	86
Apéndice C	95
Referencias	101

Introducción

El conocimiento de las propiedades de la materia a nivel atómico y molecular juega un papel fundamental en el desarrollo científico y tecnológico. Es gracias a ese conocimiento que campos como los de los semiconductores, superconductores y láseres, entre otros, se han podido desarrollar de manera considerable. Quizá la técnica experimental más poderosa para conocer los fenómenos a nivel atómico y molecular es la espectroscopía. Los datos que se obtienen por esta técnica permiten entender las propiedades químicas y físicas de los compuestos.

En particular, el espectro electromagnético se ha vuelto una fuente de abundante información en lo que concierne a la estructura molecular y las interacciones intermoleculares. Esta información se obtiene al hacer un análisis detallado de las transiciones energéticas que ocurren en una muestra de moléculas inmersa en un campo de radiación o suficientemente excitada por algún medio para producir su propio campo de radiación.

Una comprensión detallada de las transiciones moleculares es sólo posible con la ayuda de la mecánica cuántica, la cual establece que la energía de un átomo o molécula está cuantizada, es decir, tiene valores discretos completamente definidos. De este modo la energía del electrón que orbita en un átomo de hidrógeno está restringida a tomar sólo una serie de valores bien definidos. En el caso de las moléculas, la cuantización de la energía es mucho más complicada, ya que además de la energía electrónica se tienen que tomar en cuenta los grados de libertad de vibración y de rotación de las moléculas. Una vez que se tiene esta información se representa en un diagrama conocido como estructura de niveles de energía, por medio del cual es posible explicar las características de los espectros que se obtienen. Cada molécula diferente está caracterizada por su propia estructura de niveles de energía.

En una muestra de moléculas, cada una de ellas se encuentra en uno de

los muchos niveles de energía que tiene disponibles. En ausencia de un campo perturbante la forma en la que las moléculas se distribuyen entre los distintos niveles de energía, está gobernada por las leyes de la mecánica estadística. Cuando la muestra es perturbada por una fuente de radiación electromagnética, pueden ocurrir transiciones entre los niveles de energía de las moléculas, siempre y cuando la radiación sea de una energía que corresponda a la diferencia entre pares de niveles. Si esto sucede, la población de moléculas reajusta su distribución de acuerdo a como lo dictan las ecuaciones que gobiernan el fenómeno de la interacción radiación-materia.

Aunque en principio existe una gran variedad de transiciones que podrían ocurrir entre los distintos niveles de energía de una molécula, se ha demostrado que sólo algunas de esas transiciones son permitidas, y para determinar cuáles son esas transiciones existen reglas conocidas como reglas de selección, que generalmente dependen de las propiedades de simetría de las moléculas y de las correspondientes propiedades de sus funciones de onda.

En la figura (1) se muestran los niveles de energía vibro-rotacional más bajos de una molécula diatómica, así como las transiciones permitidas entre los distintos niveles de energía rotacional, las cuales están especificadas por las reglas de selección $\Delta K = \pm 1$, siendo K el número cuántico del momento angular orbital total de la molécula.

Para analizar e interpretar el espectro electromagnético de una molécula, es necesario construir un modelo matemático cuyas soluciones caractericen los niveles de energía de la molécula. Este problema es evidentemente complicado ya que una molécula puede sufrir cambios simultáneos en sus energías electrónica, vibracional y rotacional; sin embargo, se puede comenzar con un modelo más sencillo en el que se estudien cada uno de los movimientos por separado, de tal modo que las soluciones que se obtengan proporcionen las características generales del espectro, y se pueda dar una interpretación inicial.

La idea anterior se justifica con el ya bien conocido principio de Born-Oppenheimer. En esencia este principio establece que debido a que los movimientos del núcleo son muy lentos con respecto a los movimientos de los electrones en la molécula, los movimientos de vibración no afectan significativamente los estados de energía electrónicos, y como consecuencia la ecuación de onda para los electrones puede ser resuelta suponiendo los núcleos fijos. Esta aproximación se verifica por la separación relativamente grande de los estados de energía electrónicos con respecto a los estados de energía vibracional. Similarmente, la vibración y la rotación pueden ser separadas de manera

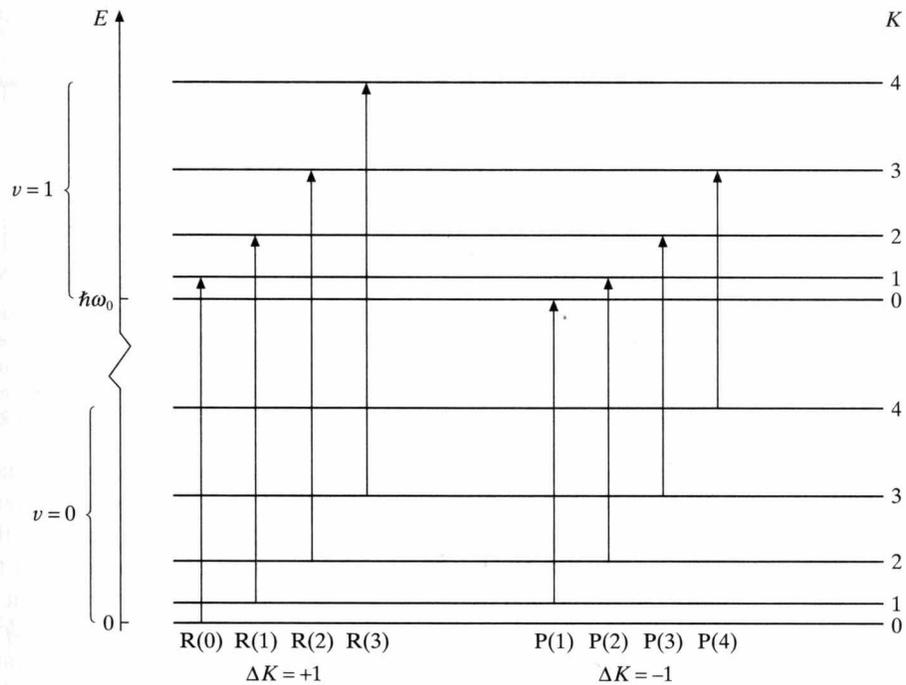


Figura 1: Diagrama de niveles de energía de los niveles vibro-rotacional más bajos de una molécula diatómica, donde se muestran las transiciones de absorción de la banda con $v = 0$ a la banda con $v = 1$. El espectro de bandas tiene dos tipos de transiciones: las transiciones R con $\Delta K = 1$ y las transiciones P con $\Delta K = -1$.

aproximada, debido a que las energías rotacionales son generalmente más pequeñas que las energías de vibración.

Con estos argumentos podría pensarse que el movimiento de rotación es poco relevante en el comportamiento de una molécula, sin embargo, entre otras cosas el espectro de rotación contiene información importante acerca de la estructura molecular. Un examen minucioso de las transiciones rotacionales permite determinar los momentos de inercia de una molécula, los cuales, están a su vez directamente relacionados con su estructura.

Ahora bien, las transiciones que ocurren en una molécula, ya sean electrónicas, vibracionales o rotacionales, se identifican por cambios en los números cuánticos que caracterizan a los niveles de energía que están interactuando, de este modo, las transiciones rotacionales puras ocurren entre dos nive-

les que tienen números cuánticos vibracionales y electrónicos idénticos pero diferentes números cuánticos rotacionales.

En este trabajo nos interesa construir un modelo matemático que nos permita analizar e interpretar sólo el espectro de rotación de una molécula, aún así conviene partir del hamiltoniano de energía total para entender mejor que tipo de simplificaciones son las que se requieren. Tenemos entonces que el hamiltoniano de energía total se escribe como

$$H = \sum_i H_i^{(0)} + \sum_{ij} H_{ij}^{(1)} + \dots, \quad (1)$$

donde el primer conjunto de términos representa el problema a orden cero, compuesto sólo de aquellas contribuciones de un solo grado de libertad energético, tales como la rotación o la vibración molecular. La segunda suma incluye términos que resultan de la interacción de dos grados de libertad, esto es, términos de interacción vibración-rotación, rotación-electrónica, etc.

Sin embargo como se mencionó anteriormente, el problema con todos estos grados de libertad resulta demasiado complicado, y en una primera aproximación se tiene que considerar una fuerte simplificación sobre el hamiltoniano (1), la cual consiste en despreciar todos los términos después de la primera suma, y quedarse sólo con el hamiltoniano separable de orden cero, esto es,

$$H^{(0)} = \sum_i H_i^{(0)} = H_{rot}^{(0)} + H_{vib}^{(0)} + H_{ele}^{(0)} + \dots. \quad (2)$$

La función de onda total que resuelve este problema, será entonces el producto de las funciones de onda correspondientes a cada término de la ecuación (2)

$$\psi^{(0)} \sim \psi_{rot}^{(0)} \psi_{vib}^{(0)} \psi_{ele}^{(0)} \dots. \quad (3)$$

En nuestro caso la simplificación es aún mayor, pues sólo nos interesa estudiar la contribución rotacional $H_{rot}^{(0)}$ del hamiltoniano (2), es decir, nos interesan las transiciones que involucran sólo cambios en los números cuánticos rotacionales, por lo que el modelo matemático que se requiere deberá de exhibir sólo grados de libertad rotacionales.

Lo anterior se logra al considerar a la molécula como un cuerpo rígido, sin embargo aún así se debe de tomar en cuenta que pueden existir otras contribuciones a la energía rotacional, como por ejemplo las debidas a fuerzas

centrífugas y de Coriolis que podrían actuar sobre la molécula en rotación alterando su estructura de niveles de energía, las debidas a pequeñas perturbaciones que resulten de campos eléctricos y magnéticos externos, entre otras. Todas estas contribuciones pueden ser despreciadas en un tratamiento aproximado cuando son suficientemente pequeñas, de la misma forma como las energías vibracional y rotacional pueden ser despreciadas en cálculos aproximados de las energías electrónicas.

Una vez que se resuelve el problema en el que se supone a la molécula como un cuerpo rígido aislado, la solución que se obtiene puede ser usada como base para tratar los términos de pequeñas interacciones aplicando de forma adecuada la teoría de perturbaciones o alguna técnica equivalente. Este análisis permite una corrección a los términos de energía necesaria para obtener de manera más precisa, los niveles de energía rotacionales de una molécula.

Existen casos en los que la separación aproximada (2) falla, por ejemplo, en el caso de vibraciones de baja frecuencia, el espaciamiento de los niveles de energía vibracional pudiera aproximar al espaciamiento de los niveles de energía rotacional, evitando que se pueda distinguir entre un tipo de transición y otra. Sin embargo en la mayoría de los casos la separación funciona, y la solución del problema de la molécula rígida forma una base conveniente para el análisis del espectro rotacional.

El problema de la molécula rígida ha sido minuciosamente estudiado desde hace muchos años por distintos autores, entre los que destacan Kramers e Ittman [1] en 1929, con algunas contribuciones posteriores de Wang [2], Casimir [3] en 1931, y Ray [4] en 1932. Sin embargo, aún con la existencia de los trabajos antes mencionados, el conocimiento de las propiedades analíticas del espectro de rotación molecular sigue siendo incompleto, y en este trabajo se busca plantear el problema siguiendo un camino muy particular, en el que se considera importante el modelo clásico del cuerpo rígido libre de torcas.

En general, el movimiento cuantizado que da origen al espectro de rotación, difícilmente se puede relacionar con la rotación de objetos macroscópicos con los que estamos familiarizados, sin embargo, el uso de un sistema de coordenadas adecuado y una parametrización muy especial de la matriz de rotación, nos permiten construir un modelo cuántico siguiendo ideas y argumentos, que surgen de manera natural en el estudio clásico del cuerpo rígido libre de torcas.

Entre otras cosas se muestra como el operador hamiltoniano y la mayoría de las expresiones que se construyen en el modelo cuántico, resultan ser

idénticas a las que aparecen en el modelo clásico antes mencionado, pero lo que más llama la atención, es que en ambos casos la solución resulta ser de variables separables, aunque en un caso es en forma de suma de funciones y en el otro en forma de producto. Comenzaremos entonces por estudiar el modelo clásico y posteriormente mostraremos cómo ideas similares y un procedimiento análogo funcionan también en el caso cuántico.

Capítulo 1

Parametrizaciones de la matriz de rotación y variables mecánicas importantes

De acuerdo con la idea que se plantea en la introducción, debemos recordar primero algunos conceptos elementales relacionados con el movimiento de rotación de un cuerpo rígido clásico. Conviene comenzar con el propio concepto de cuerpo rígido, seguido de algunas de las distintas parametrizaciones que se requieren para estudiar su movimiento de rotación. Además se tienen que definir las variables mecánicas que más adelante servirán para estudiar el caso particular del cuerpo rígido libre de torcas.

1.1. El cuerpo rígido y su movimiento de rotación

Por definición, el cuerpo rígido es un conjunto de partículas sujetas a la condición de que exista un sistema de referencia, en el que las coordenadas cartesianas de cada una de las partículas sean constantes de movimiento.

Para estudiar el movimiento de un cuerpo rígido se asume la existencia de dos sistemas de referencia [5]. El primero es un sistema inercial y el segundo —que llamaremos anclado al cuerpo— será aquel en el que las posiciones de las partículas son constantes de movimiento.

El movimiento de un cuerpo rígido puede ser de dos tipos: con un punto fijo o sin él. El cuerpo rígido con un punto fijo se caracteriza por tener al

menos un punto que es constante de movimiento. Este punto se elige como origen de coordenadas para ambos sistemas de referencia y la relación entre ellos es una rotación.

Cuando el cuerpo rígido no tiene ningún punto fijo, el origen de coordenadas del sistema anclado, se ubica en el centro de masa, y su relación con el sistema inercial, está dada por la traslación del origen del sistema galileano al anclado, más la rotación necesaria para volver paralelos los ejes coordenados correspondientes de ambos sistemas de referencia.

En este trabajo interesa estudiar sólo el movimiento de rotación, por lo que cuando el cuerpo rígido no tenga un punto fijo, haremos abstracción del movimiento de traslación, y nos ocuparemos sólo de la rotación que relaciona las posiciones constantes del sistema anclado con las posiciones en movimiento del sistema inercial. Esta rotación es función del tiempo y su dependencia temporal determina el movimiento de rotación del cuerpo rígido.

Las rotaciones son transformaciones lineales que dejan invariante la norma de los vectores que transforman, en consecuencia, un vector \mathbf{a} del sistema anclado se transforma en un vector \mathbf{x} del sistema inercial, por medio de la ecuación

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \mathbf{a}, \quad (1.1)$$

donde \mathbf{R} es la matriz de rotación que representa la transformación lineal. La invariancia en la norma de los vectores que participan en la transformación, obliga a que la matriz \mathbf{R} cumpla la condición

$$\mathbf{R}^T \mathbf{R} = \mathbf{E}, \quad (1.2)$$

donde \mathbf{E} es la matriz identidad y la inversa de la matriz de rotación es su matriz transpuesta \mathbf{R}^T . Esto ocasiona que la matriz \mathbf{R} sea sólo función de tres parámetros independientes, los cuales pueden entenderse como las coordenadas dinámicas del cuerpo rígido y elegirse de diferentes maneras según convenga.

1.2. Algunas parametrizaciones de la matriz de rotación

Entre las parametrizaciones de \mathbf{R} que actualmente se conocen, está la que depende de un eje de rotación \mathbf{n} y un ángulo de rotación ϕ . Esta parametrización

tiene la ventaja de que se puede explicar geoméricamente y sirve como base para encontrar otras parametrizaciones.

La figura (1.1) muestra a un vector \mathbf{a} , rotando un ángulo Φ alrededor del vector unitario \mathbf{n} , para dar como resultado al vector \mathbf{x} que aparece en la ecuación (1.1).

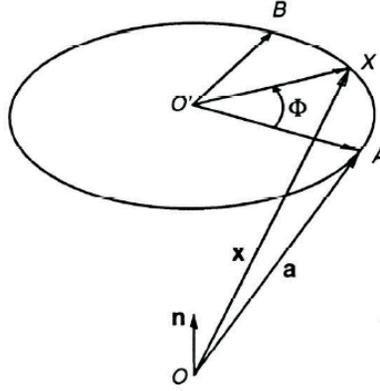


Figura 1.1: Rotación de un ángulo Φ alrededor del eje \mathbf{n} .

El vector \mathbf{a} que será rotado se representa con la flecha \vec{OA} , que va del punto O al punto A .

De manera análoga, el vector \mathbf{x} ya rotado se representa con la flecha \vec{OX} , que va del punto O al punto X .

Estas flechas se descomponen en dos vectores: el primero, $\vec{OO'}$, que es común a ambos, está en la dirección del eje de rotación, mientras que el segundo está en un plano perpendicular al eje de rotación. Este plano se muestra en la figura (1.2).

Con esta notación los vectores \mathbf{a} y \mathbf{x} se expresan en la forma

$$\mathbf{a} = \vec{OA} = \vec{OO'} + \vec{O'A} \quad (1.3)$$

y

$$\mathbf{x} = \vec{OX} = \vec{OO'} + \vec{O'X}. \quad (1.4)$$

La componente común $\vec{OO'}$ se obtiene proyectando el vector \mathbf{a} en la dirección del eje de rotación \mathbf{n} , dando como resultado la expresión

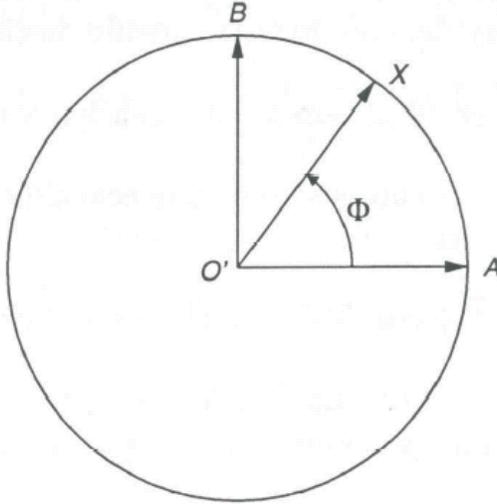


Figura 1.2: La misma rotación vista desde la parte superior en la dirección del eje de rotación.

$$\vec{O'O'} = \mathbf{nn}^T \mathbf{a}. \quad (1.5)$$

El vector $\vec{O'A}$ se expresa como la diferencia de \mathbf{a} y este vector,

$$\vec{O'A} = \mathbf{a} - \mathbf{nn}^T \mathbf{a} = (\mathbf{E} - \mathbf{nn}^T) \mathbf{a}. \quad (1.6)$$

Por otro lado, como lo sugiere la figura (1.2) el vector $\vec{O'X}$ se expresa en términos del ángulo de rotación Φ , al hacer la combinación lineal de los vectores perpendiculares $\vec{O'A}$ y $\vec{O'B}$, esto es,

$$\vec{O'X} = \vec{O'A} \cos \Phi + \vec{O'B} \sin \Phi. \quad (1.7)$$

El vector $\vec{O'B}$ se puede escribir como el producto \times de \mathbf{n} y $\vec{O'A}$:

$$\vec{O'B} = \mathbf{n} \times \vec{O'A} = \mathbf{n} \times (\mathbf{a} - \mathbf{nn}^T \mathbf{a}) = \mathbf{n} \times \mathbf{a}, \quad (1.8)$$

donde se ha hecho uso de que el producto \times de dos vectores paralelos es cero.

La ecuación (1.7) se puede expresar ahora en términos de los vectores \mathbf{a} , \mathbf{n} , y el ángulo de rotación Φ por medio de (1.6) y (1.8), obteniéndose

$$O^T X = \cos \Phi (\mathbf{E} - \mathbf{nn}^T) \mathbf{a} + \sin \Phi \mathbf{n} \times \mathbf{a}. \quad (1.9)$$

Si se sustituye este resultado junto con (1.5) en la ecuación (1.4), se obtiene el vector

$$\mathbf{x} = [\mathbf{nn}^T + \cos \Phi (\mathbf{E} - \mathbf{nn}^T) + \sin \Phi \mathbf{n} \times] \mathbf{a}, \quad (1.10)$$

y al comparar con la ecuación (1.1) se obtiene finalmente la expresión para la matriz de rotación \mathbf{R} , en términos del eje \mathbf{n} y del ángulo de rotación Φ , esto es

$$\mathbf{R} = \mathbf{nn}^T + \cos \Phi (\mathbf{E} - \mathbf{nn}^T) + \sin \Phi \mathbf{n} \times, \quad (1.11)$$

Es evidente que \mathbf{n} es un vector invariante ante la rotación, y si se toman en cuenta todas sus posibles direcciones, bastará que el ángulo Φ tome valores en el intervalo de $0 \leq \Phi \leq \pi$.

En muchas ocasiones, los cálculos que involucran funciones trigonométricas suelen ser demasiado complicados, y un cambio en el tipo de parametrización podría ayudar a facilitar el manejo del álgebra. Una parametrización útil en estos casos, y en particular para este trabajo, es la que depende de los cuatro parámetros de Euler - Rodrigues ϱ y ζ , los cuales están directamente relacionados con \mathbf{n} y Φ por medio de las ecuaciones

$$\varrho = \cos(\Phi/2), \quad (1.12)$$

y

$$\zeta = \mathbf{n} \sin(\Phi/2). \quad (1.13)$$

La matriz de rotación se expresa en términos de estos parámetros, en la forma

$$\mathbf{R} = 2\zeta\zeta^T + (\varrho^2 - \zeta^T\zeta)\mathbf{E} + 2\varrho\zeta \times. \quad (1.14)$$

Los parámetros ϱ y ζ no son independientes entre sí; están relacionados por la ecuación

$$\varrho^2 + \zeta^T\zeta = 1, \quad (1.15)$$

lo cual permite expresar a la matriz de rotación sólo en términos de los parámetros ζ , esto es,

$$\mathbf{R} = (1 - 2\zeta^2)\mathbf{E} + 2\zeta\zeta^T + 2(1 - \zeta^2)^{1/2}\zeta \times . \quad (1.16)$$

Otra parametrización importante y muy conocida de la matriz de rotación, es la que se define por medio de los tres ángulos ϕ , θ , y ψ , conocidos como ángulos de Euler. Esta parametrización consiste expresar a la matriz de rotación mediante el producto de tres rotaciones distintas

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_3\mathbf{R}_2\mathbf{R}_1, \quad (1.17)$$

donde cada una de ellas se caracteriza por tener su eje de rotación constante.

La rotación \mathbf{R}_1 tiene por eje de rotación al vector

$$\mathbf{n}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1.18)$$

tal como se muestra en la figura (1.3), y su ángulo de rotación se denota por la letra ψ , mientras que la rotación \mathbf{R}_2 tiene por eje de rotación al vector

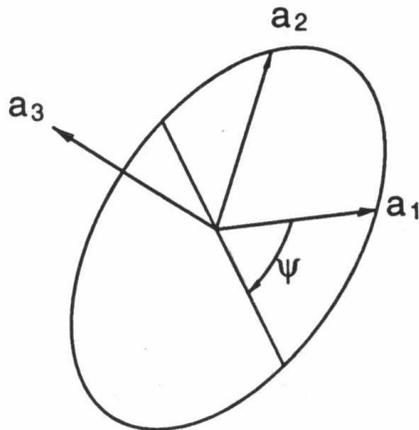


Figura 1.3: Rotación alrededor del eje \mathbf{n}_1

$$\mathbf{n}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.19)$$

como se muestra en la figura (1.4), y por ángulo de rotación a la variable θ . Por último, la rotación \mathbf{R}_3 tiene por eje de rotación al vector

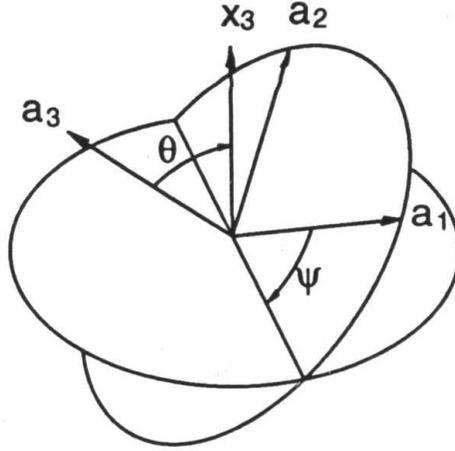


Figura 1.4: Rotación alrededor del eje \mathbf{n}_2

$$\mathbf{n}_3 = \mathbf{n}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1.20)$$

como se muestra en la figura (1.5), y como ángulo de rotación a la variable ϕ .

Si ahora se usa la fórmula (1.11) para escribir las matrices \mathbf{R}_3 , \mathbf{R}_2 , y \mathbf{R}_1 , en términos de sus componentes, y el resultado se sustituye en la ecuación (1.17), se encuentra la forma explícita de la matriz de rotación \mathbf{R} en términos de los tres ángulos de Euler ϕ , θ y ψ , esto es,

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \cos \phi \cos \psi - \sin \phi \sin \psi \cos \theta & -\cos \phi \sin \psi - \sin \phi \cos \psi \cos \theta & \sin \theta \sin \phi \\ \sin \phi \cos \psi + \cos \phi \sin \psi \cos \theta & -\sin \phi \sin \psi + \cos \phi \cos \psi \cos \theta & -\sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \psi & \sin \theta \cos \psi & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

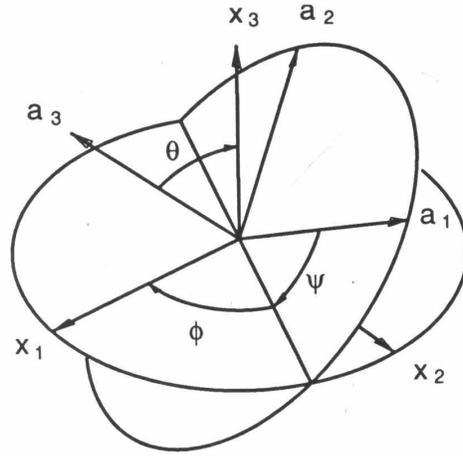


Figura 1.5: Rotación alrededor del eje \mathbf{n}_2

Con esta parametrización se pueden encontrar algunas relaciones interesantes entre los vectores del sistema anclado y el sistema inercial. En particular nos interesa aquella en la que los ángulos θ y ψ , son las coordenadas esféricas de la dirección del sistema anclado que se rota en el vector constante

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

del sistema inercial. Es decir, dada la dirección

$$\begin{pmatrix} \text{sen } \theta \text{sen } \psi \\ \text{sen } \theta \text{cos } \psi \\ \text{cos } \theta \end{pmatrix}, \quad (1.22)$$

del sistema anclado, se cumple la transformación

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{R} \begin{pmatrix} \text{sen } \theta \text{sen } \psi \\ \text{sen } \theta \text{cos } \psi \\ \text{cos } \theta \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

Por otra parte, es posible demostrar que los ángulos de Euler ϕ , θ , y ψ , están relacionados con los parámetros ζ por medio la ecuación

$$\zeta = \pm \begin{pmatrix} \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\phi-\psi}{2}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\phi-\psi}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\phi+\psi}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad (1.24)$$

donde

$$0 \leq \phi \leq 2\pi,$$

$$0 \leq \theta \leq \pi,$$

$$0 \leq \psi \leq 2\pi,$$

con lo que podemos pasar de una parametrización a otra cuando la situación lo requiera.

Finalmente, se ha encontrado que en algunos problemas dinámicos y geométricos de rotaciones [6], se suelen conocer dos vectores, uno de los cuales es el vector rotado del otro. En consecuencia, si \mathbf{v} es el vector rotado y \mathbf{u} el vector antes de rotar, ambos vectores están relacionados por la matriz de rotación \mathbf{R} en la forma

$$\mathbf{v} = \mathbf{R} \mathbf{u}, \quad (1.25)$$

y debido a que las rotaciones no afectan el tamaño de los vectores, se puede suponer sin pérdida de generalidad que tanto \mathbf{u} como \mathbf{v} tienen magnitud unidad.

En estos casos la matriz de rotación \mathbf{R} puede parametrizarse en términos de los vectores \mathbf{u} y \mathbf{v} , hasta un parámetro adicional denotado por la letra γ , el cual también depende de la elección particular de los vectores \mathbf{u} y \mathbf{v} .

La forma más general de la matriz de rotación en este caso, está dada por la expresión

$$\begin{aligned}
\mathbf{R} &= \mathbf{E} \cos \gamma - \frac{(\mathbf{u}+\mathbf{v})(\mathbf{u}+\mathbf{v})^T}{1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v}} \cos \gamma + \mathbf{v} \mathbf{u}^T (1 + \cos \gamma) \\
&+ \frac{\text{sen } \gamma}{2(1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v})} [(\mathbf{u}+\mathbf{v})(\mathbf{u} \times \mathbf{v})^T + (\mathbf{u} \times \mathbf{v})(\mathbf{u}+\mathbf{v})^T] \\
&+ \frac{\text{sen } \gamma}{2} (\mathbf{u}+\mathbf{v}) \times .
\end{aligned} \tag{1.26}$$

1.3. Cinemática de rotación

En cualquiera de las parametrizaciones antes mencionadas se pueden definir las variables mecánicas asociadas con el movimiento de rotación, tales como el vector de velocidad angular, el vector de momento angular, la energía cinética, etc. Todas estas cantidades se definen tanto en el sistema anclado como en el sistema inercial.

De particular importancia es el conocimiento del vector de velocidad angular del sistema anclado. Este vector denotado por $\boldsymbol{\omega}$, juega un papel fundamental en el cálculo de la energía cinética de rotación, y en el cálculo del vector de momento angular.

La ecuación que define al vector de velocidad angular en el sistema anclado se deduce de la ecuación (1.2), y está dada por la expresión

$$\boldsymbol{\omega} \times = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{R}^T \dot{\mathbf{R}}, \tag{1.27}$$

donde ω_1 , ω_2 , y ω_3 son las componentes del vector $\boldsymbol{\omega}$, y el punto indica la derivada temporal de la matriz \mathbf{R} . Esta derivada se despeja de la misma ecuación (1.27) y se expresa en términos del vector $\boldsymbol{\omega}$ como

$$\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{R} \boldsymbol{\omega} \times . \tag{1.28}$$

Debido a que $\boldsymbol{\omega}$ es un vector definido en el sistema anclado, el vector de velocidad angular en el sistema inercial, denotado por $\boldsymbol{\Omega}$, está completamente determinado por la transformación

$$\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{R} \boldsymbol{\omega}. \tag{1.29}$$

Si ahora se usa la parametrización (1.11) y la ecuación (1.27), se obtiene la expresión para el vector de velocidad angular $\boldsymbol{\omega}$, en términos del eje de rotación \mathbf{n} y del ángulo de rotación Φ , esto es,

$$\boldsymbol{\omega} = \dot{\Phi}\mathbf{n} + \sin\Phi\dot{\mathbf{n}} - (1 - \cos\Phi)\mathbf{n} \times \dot{\mathbf{n}}. \quad (1.30)$$

Más adelante, al estudiar el movimiento del cuerpo rígido libre de torcas, será necesario utilizar al vector $\boldsymbol{\omega}$ en términos de los vectores \mathbf{u} , \mathbf{v} , y el parámetro adicional γ , donde de acuerdo con esta parametrización, \mathbf{u} y \mathbf{v} tendrán que ser dos vectores conocidos. Con esta parametrización, el vector de velocidad angular $\boldsymbol{\omega}$ se expresa en la forma

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{1 + \mathbf{u}^T\mathbf{v}}[\dot{\mathbf{u}} \times (\mathbf{u} + \mathbf{v})] + \dot{\gamma}\mathbf{u}. \quad (1.31)$$

En algún otro momento será necesario recurrir al uso del vector $\boldsymbol{\zeta}$, en términos del cual, el vector de velocidad angular $\boldsymbol{\omega}$ se escribe como

$$\boldsymbol{\omega} = 2\left(\frac{\boldsymbol{\zeta}}{\sqrt{1 - \boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\zeta}}}\boldsymbol{\zeta}^T + \sqrt{1 - \boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\zeta}}\mathbf{E} - \boldsymbol{\zeta} \times\right)\dot{\boldsymbol{\zeta}}. \quad (1.32)$$

Esta parametrización permite definir la matriz

$$\mathbf{B} = 2\left(\frac{\boldsymbol{\zeta}}{\sqrt{1 - \boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\zeta}}}\boldsymbol{\zeta}^T + \sqrt{1 - \boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\zeta}}\mathbf{E} - \boldsymbol{\zeta} \times\right), \quad (1.33)$$

y escribir la ecuación (1.32) en la forma compacta

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{B}\dot{\boldsymbol{\zeta}}. \quad (1.34)$$

Además, el uso de la matriz \mathbf{B} tiene la ventaja de que al obtener su inversa

$$\mathbf{B}^{-1} = \frac{1}{2}[\sqrt{1 - \boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\zeta}}\mathbf{E} + \boldsymbol{\zeta} \times], \quad (1.35)$$

podemos escribir a la matriz de rotación en la forma

$$\mathbf{R} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{B}^T = \mathbf{B}^T\mathbf{B}^{-1}, \quad (1.36)$$

la cual, al combinarse con (1.29) y (1.34), nos permite escribir al vector de velocidad angular $\boldsymbol{\Omega}$ del sistema inercial en términos de la matriz \mathbf{B} , esto es,

$$\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{B}^T\dot{\boldsymbol{\zeta}}. \quad (1.37)$$

Como se mencionó anteriormente, la importancia del vector de velocidad angular $\boldsymbol{\omega}$ del sistema anclado, radica en el hecho de que tanto la energía cinética de rotación K_c , como el vector de momento angular \mathbf{J} del sistema inercial, y el vector de momento angular \mathbf{L} del sistema anclado, se escriben en términos de dicho vector.

En el caso de la energía cinética rotacional, se tiene por definición que

$$K_c = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\mathbf{x}}_i^T \dot{\mathbf{x}}_i, \quad (1.38)$$

esta ecuación, se transforma por medio de (1.1) y (1.28) a la forma

$$K_c = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{I} \boldsymbol{\omega}, \quad (1.39)$$

donde la matriz

$$\mathbf{I} = \sum_i m_i [\mathbf{a}_i^T \mathbf{a}_i \mathbf{E} - \mathbf{a}_i \mathbf{a}_i^T], \quad (1.40)$$

es conocida como la matriz de inercia.

De manera análoga, el vector de momento angular \mathbf{J} del sistema inercial se define como

$$\mathbf{J} = \sum_i m_i \mathbf{x}_i \times \dot{\mathbf{x}}_i, \quad (1.41)$$

y se transforma por medio de (1.1) y (1.28) en la ecuación

$$\mathbf{J} = \mathbf{R} \mathbf{I} \boldsymbol{\omega}, \quad (1.42)$$

donde al igual que la energía cinética, este vector queda expresado en términos del vector $\boldsymbol{\omega}$ y de la matriz de inercia \mathbf{I} .

De la ecuación (1.42) es evidente que el vector de momento angular \mathbf{L} del sistema anclado está definido por la ecuación

$$\mathbf{L} = \mathbf{I} \boldsymbol{\omega}. \quad (1.43)$$

Por último, de las ecuaciones (1.34) y (1.39), es posible obtener la energía cinética de rotación en términos de la matriz \mathbf{B} , esto es,

$$K_c = \frac{\dot{\boldsymbol{\zeta}}^T \mathbf{B}^T \mathbf{I} \mathbf{B} \dot{\boldsymbol{\zeta}}}{2}. \quad (1.44)$$

1.4. Propiedades de la matriz de inercia

De las ecuaciones (1.39) y (1.42) resulta evidente que la matriz de inercia \mathbf{I} , es indispensable tanto en el cálculo de la energía cinética como en el cálculo de los vectores de momento angular \mathbf{J} y \mathbf{L} . Esto provoca un justificado interés en el conocimiento de algunas de las propiedades esa matriz, las cuales jugarán un papel fundamental en cálculos posteriores.

Por definición la matriz de inercia es una matriz simétrica y real, esto quiere decir que sus valores propios serán siempre reales y positivos, salvo en el caso particular en el que todas las partículas del cuerpo están alineadas en una misma dirección. En este caso, uno de los valores propios se vuelve cero.

Dicho de otro modo, la matriz de inercia es en general una matriz no singular y positiva definida, excepto en el caso que se mencionó anteriormente.

Los vectores propios de la matriz de inercia son tres direcciones reales ortogonales entre sí conocidas como ejes principales de inercia, las cuales sin perder generalidad pueden suponerse vectores unitarios.

En el sistema coordinado de los ejes principales de inercia, la matriz \mathbf{I} se diagonaliza mediante una rotación independiente del tiempo, dejando sobre la diagonal a los valores propios de la matriz de inercia, los cuales se conocen con el nombre de momentos principales de inercia, y se representan con los símbolos

$$I_1, I_2, I_3, \tag{1.45}$$

respectivamente.

Al calcular los momentos principales de inercia, pueden suceder tres cosas: que los tres momentos sean distintos, que dos de ellos se repitan o que los tres sean iguales, y dependiendo de cuál sea el resultado será posible identificar tres casos de simetría del cuerpo rígido.

En el primer caso, cuando se tienen los tres momentos principales de inercia diferentes, el cuerpo será completamente asimétrico.

Por otro lado, cuando dos de los momentos principales de inercia son iguales, el cuerpo tendrá simetría cilíndrica, en cuyo caso, cuando el momento diferente sea el mayor, el cuerpo se llamará oblató, indicando que está aplanado en esa dirección, y cuando sea el menor, el cuerpo se llamará prolato. Cuando el momento de inercia diferente tiende a cero, las partículas se alinean en una sola dirección.

Finalmente cuando los tres valores propios o momentos principales de inercia son iguales, el cuerpo rígido tendrá simetría esférica rotacional.

Los momentos principales de inercia se pueden ordenar de manera que satisfagan siempre las condiciones

$$I_1 \leq I_2 \leq I_3, \tag{1.46}$$

sin que esto implique una pérdida de generalidad.

Capítulo 2

El cuerpo rígido libre de torcas

En este capítulo nos dedicaremos a desarrollar un tratamiento muy particular del cuerpo rígido libre de torcas, que nos llevará a encontrar una solución en variables separables de la ecuación de Hamilton-Jacobi.

2.1. Ecuaciones de movimiento rotacional

Las ecuaciones que describen el movimiento de rotación de un cuerpo rígido clásico, se obtienen a partir de calcular la derivada temporal del vector de momento angular (1.41), es decir,

$$\dot{\mathbf{J}} = \sum_i m_i \mathbf{x}_i \times \ddot{\mathbf{x}}_i. \quad (2.1)$$

Ésta derivada se puede escribir en términos de la matriz de rotación \mathbf{R} , al usar la transformación (1.1) en (2.1), esto es,

$$\dot{\mathbf{J}} = \sum_i (\mathbf{R} \mathbf{a}_i) \times \mathbf{F}_i, \quad (2.2)$$

donde \mathbf{F}_i es la fuerza sobre la partícula i que satisface la segunda ley de Newton

$$\mathbf{F}_i = m_i \ddot{\mathbf{x}}_i. \quad (2.3)$$

Si ahora usamos la condición (1.2), y el hecho de que la rotación del producto cruz de dos vectores, es igual al producto cruz de los vectores rotados, la derivada temporal del vector \mathbf{J} también se puede expresar en la forma

$$\dot{\mathbf{J}} = \mathbf{R}\boldsymbol{\eta}, \quad (2.4)$$

donde

$$\boldsymbol{\eta} = \sum_i \mathbf{a}_i \times \mathbf{R}^T \mathbf{F}_i, \quad (2.5)$$

son las componentes de la torca en el sistema anclado, que tiene como origen al punto fijo del cuerpo rígido.

Por otro lado, al sustituir (1.42) en (2.4), se obtiene la ecuación

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{R}\mathbf{I}\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{R}\boldsymbol{\eta}, \quad (2.6)$$

donde al desarrollar la derivada temporal del miembro izquierdo y tomar como factor común la matriz de rotación, ésta se convierte en

$$\mathbf{R}(\mathbf{R}^T \dot{\mathbf{R}} \mathbf{I} \boldsymbol{\omega} + \mathbf{I} \dot{\boldsymbol{\omega}}) = \mathbf{R}\boldsymbol{\eta}. \quad (2.7)$$

Una simplificación importante se obtiene al multiplicar por la izquierda con \mathbf{R}^T y usar la ecuación (1.27) que define al vector velocidad angular $\boldsymbol{\omega}$ del sistema anclado, obteniendo con esto

$$\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I} \boldsymbol{\omega} + \mathbf{I} \dot{\boldsymbol{\omega}} = \boldsymbol{\eta}, \quad (2.8)$$

que es la ecuación fundamental de la dinámica rotacional, mejor conocida como ecuación de movimiento de Euler. Esta ecuación se puede separar en términos de sus componentes en el sistema de los ejes principales de inercia, obteniéndose las ecuaciones

$$\begin{aligned} I_1 \dot{\omega}_1 + (I_3 - I_2) \omega_2 \omega_3 &= \eta_1, \\ I_2 \dot{\omega}_2 + (I_1 - I_3) \omega_3 \omega_1 &= \eta_2, \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$I_3 \dot{\omega}_3 + (I_2 - I_1) \omega_1 \omega_2 = \eta_3,$$

donde η_1 , η_2 , y η_3 , son las componentes de la torca $\boldsymbol{\eta}$ en el sistema anclado.

Las ecuaciones de movimiento de Euler se expresan también en términos del vector de momento angular \mathbf{L} del sistema anclado; simplemente se sustituye (1.43) en la ecuación (2.8), y se obtiene la ecuación

$$\dot{\mathbf{L}} + (\mathbf{I}^{-1} \mathbf{L}) \times \mathbf{L} = \boldsymbol{\eta}, \quad (2.10)$$

que al igual que (2.8), se puede separar en términos de sus componentes en el sistema anclado de los ejes principales de inercia, dando lugar al sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \dot{L}_1 + \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_3}\right) L_2 L_3 &= \eta_1, \\ \dot{L}_2 + \left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I_1}\right) L_3 L_1 &= \eta_2, \\ \dot{L}_3 + \left(\frac{1}{I_1} - \frac{1}{I_2}\right) L_1 L_2 &= \eta_3. \end{aligned} \quad (2.11)$$

2.2. El cuerpo rígido libre de torcas

De ahora en adelante nos va a interesar sólomente el caso en el que la torca $\boldsymbol{\eta}$ relativa al punto fijo del cuerpo rígido es nula. Cuando esto sucede, la torca en el sistema inercial también tiene que ser nula, y de acuerdo con (2.2) y (2.4) se tiene que satisfacer la ecuación

$$\sum_i (\mathbf{R} \mathbf{a}_i) \times \mathbf{F}_i = \mathbf{R} \boldsymbol{\eta} = \mathbf{0}. \quad (2.12)$$

Esta condición se cumple siempre que todas las fuerzas \mathbf{F}_i sean cero o porque todas las fuerzas \mathbf{F}_i sean proporcionales a la masa m_i . Las fuerzas \mathbf{F}_i pueden suponerse nulas cuando el cuerpo rígido se encuentre en una región del espacio muy alejada de otras masas. Las fuerzas \mathbf{F}_i en un campo gravitacional constante son proporcionales a la masa m_i , $\mathbf{F}_i = m_i \mathbf{g}$, y la ecuación (2.12) se cumple cuando el punto fijo es el centro de masa, ya que entonces la suma $\sum m_i \mathbf{a}_i$ es el origen de coordenadas.

Debido a que en este trabajo nos interesa el caso general en el que el punto fijo no necesariamente es el centro de masa, tendremos que suponer que el cuerpo rígido está siempre ubicado en una región del espacio muy alejada de otras masas, de este modo garantizamos que la torca en el sistema inercial cumpla con el requisito de ser siempre nula. Dicho de otro modo, cuando tengamos un cuerpo rígido sobre el que no actúe ningún potencial ($V = 0$), se tratará siempre de un cuerpo rígido libre de torcas.

En estas circunstancias, la ecuación (2.4) proporciona de inmediato la conservación del vector de momento angular \mathbf{J} del sistema inercial, esto es,

$$\mathbf{J} = \text{constante de movimiento}, \quad (2.13)$$

y la ecuación de Euler (2.10) se convierte en

$$\dot{\mathbf{L}} + (\mathbf{I}^{-1} \mathbf{L}) \times \mathbf{L} = \mathbf{0}, \quad (2.14)$$

que es ahora, la ecuación de movimiento para el vector de momento angular \mathbf{L} del sistema anclado. Esta ecuación se separa ahora en las tres ecuaciones

$$\begin{aligned} \dot{L}_1 &= \left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I_2} \right) L_2 L_3, \\ \dot{L}_2 &= \left(\frac{1}{I_1} - \frac{1}{I_3} \right) L_3 L_1, \\ \dot{L}_3 &= \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_1} \right) L_1 L_2. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Al hacer el producto escalar de (2.14) con el vector de momento angular \mathbf{L} , se encuentra que este vector es de magnitud constante,

$$\mathbf{L}^T \mathbf{L} = \text{constante}, \quad (2.16)$$

lo cual era de esperarse, ya que el vector \mathbf{J} que es constante de movimiento, es la rotación del vector \mathbf{L} , es decir

$$\mathbf{J} = \mathbf{R} \mathbf{L}. \quad (2.17)$$

Si ahora denotamos por ℓ a la magnitud de los vectores \mathbf{L} y \mathbf{J} , se encuentra que las componentes del vector de momento angular \mathbf{L} del sistema anclado, deben satisfacer la ecuación de una esfera de radio ℓ en el espacio de momentos angulares, esto es,

$$\mathbf{L}^T \mathbf{L} = \ell^2. \quad (2.18)$$

Por otro lado, al hacer el producto escalar de la ecuación (2.14) con el vector de velocidad angular

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{I}^{-1} \mathbf{L}^T, \quad (2.19)$$

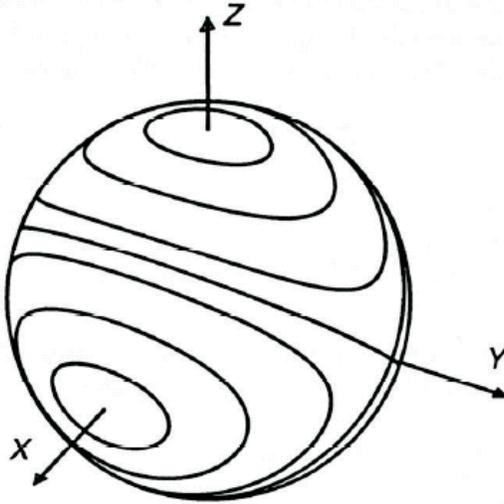


Figura 2.1: Intersección sobre la esfera de momento angular de varios elipsoides de energía constante.

se encuentra que la energía cinética de rotación es también una constante de movimiento

$$K_c = \frac{1}{2} \mathbf{L}^T \mathbf{I}^{-1} \mathbf{L} = \text{constante de movimiento}, \quad (2.20)$$

la cual al ser denotada por la letra E , se encuentra que las componentes del vector de momento angular \mathbf{L} del sistema anclado deben también satisfacer la ecuación del elipsoide

$$\mathbf{L}^T \mathbf{I}^{-1} \mathbf{L} = 2E. \quad (2.21)$$

Se concluye entonces que el vector de momento angular \mathbf{L} , debe satisfacer simultáneamente la ecuación de la esfera (2.18) y la ecuación del elipsoide (2.21), lo cual geoméricamente significa que el vector de momento angular se mueve en la intersección de estas dos superficies.

Las curvas de intersección serán en general alabeadas, excepto cuando el elipsoide de energía fuese de revolución por tener dos momentos principales de inercia iguales.

La figura (2.1) muestra en perspectiva una esfera en el espacio de momentos angulares, sobre la cual se dibujaron las intersecciones con elipsoides de diferentes energías constantes.

Debido a la forma (1.46) en la que se ordenaron los momentos principales de inercia,

$$I_1 \leq I_2 \leq I_3,$$

el semieje mayor del elipsoide va en la dirección del eje 3 y el semieje menor en la dirección del eje 1.

La intersección de la esfera (2.18) y el elipsoide (2.21) se verifica formalmente, al demostrar que la energía dividida por el cuadrado del vector de momento angular, está acotada por los inversos de los momentos principales de inercia 1 y 3

$$\frac{1}{I_1} \geq \frac{2E}{\ell^2} \geq \frac{1}{I_3}, \quad (2.22)$$

donde es evidente, que el radio de la esfera deberá ser mayor o igual que el semieje menor, y menor o igual que el semieje mayor. Cuando se cumplen las desigualdades, inevitablemente tiene que haber una intersección entre la esfera y el elipsoide, pero cuando la energía toma los valores extremos

$$E = \frac{J^2}{2I_1}, \quad (2.23)$$

y

$$E = \frac{J^2}{2I_3}, \quad (2.24)$$

la esfera y el elipsoide se tocan tangencialmente en la dirección de dos ejes principales de inercia, y entonces el vector \mathbf{L} es una constante de movimiento.

Por otro lado, debido a que el vector \mathbf{J} es una constante de movimiento, tenemos libertad de elegir su dirección en el sistema inercial como mejor convenga. En la literatura es común asociar al vector \mathbf{J} con la dirección constante del eje tres, mientras que a \mathbf{L} se le dan como coordenadas esféricas los ángulos de Euler θ y ψ . Sin embargo la simetría del problema no sugiere en absoluto la introducción de coordenadas esféricas para \mathbf{L} , excepto cuando el elipsoide (2.21) sea de revolución. Sólo en tal circunstancia convendría usar los ángulos de Euler. En general no son los ángulos de Euler las coordenadas apropiadas, y en su lugar tenemos las coordenadas esferoconales,

que incluyen como curvas coordenadas sobre la esfera a la intersección con elipsoides o conos elípticos.

2.3. Coordenadas esferoconales

Las coordenadas esferoconales [ver apéndice C] denotadas por las letras r , ϕ_1 , y ϕ_2 , se expresan con ayuda de las funciones elípticas de Jacobi, y se introducen por medio de la transformación [7]

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(\phi_1, \kappa_1) \operatorname{sn}(\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{cn}(\phi_1, \kappa_1) \operatorname{cn}(\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{sn}(\phi_1, \kappa_1) \operatorname{dn}(\phi_2, \kappa_2) \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

donde κ_1 y κ_2 son parámetros asociados con el periodo de las funciones elípticas sn , cn , y dn .

Un mejor manejo de este sistema de coordenadas, se logra al expresar los tres momentos principales de inercia I_1 , I_2 , I_3 , en términos de dos nuevos parámetros Q y P , en la forma

$$\frac{1}{I_j} = Q + Pe_j \quad (j = 1, 2, 3), \quad (2.26)$$

donde Q y P están definidos por las ecuaciones

$$Q = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_2} + \frac{1}{I_3} \right) \quad (2.27)$$

y

$$P^2 = \frac{4}{9} \left(\frac{1}{I_1^2} + \frac{1}{I_2^2} + \frac{1}{I_3^2} - \frac{1}{I_1 I_2} - \frac{1}{I_2 I_3} - \frac{1}{I_3 I_1} \right), \quad (2.28)$$

de tal modo que los parámetros e_1 , e_2 , y e_3 no sean independientes entre sí, sino que estén relacionados por las restricciones:

$$e_1 + e_2 + e_3 = 0 \quad (2.29)$$

y

$$e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = \frac{3}{2}, \quad (2.30)$$

lo cual permite que los tres parámetros e_1 , e_2 , y e_3 , se puedan escribir en función de un solo parámetro independiente σ :

$$\begin{aligned} e_1 &= \cos \sigma, \\ e_2 &= \cos\left(\sigma - \frac{2\pi}{3}\right) \quad \left(0 \leq \sigma \leq \frac{\pi}{3}\right), \\ e_3 &= \cos\left(\sigma + \frac{2\pi}{3}\right). \end{aligned} \tag{2.31}$$

donde el parámetro σ resulta ser una medida del grado de asimetría del cuerpo. El cuerpo será simétrico prolato para $\sigma = 0$ y simétrico oblató cuando $\sigma = \pi/3$. El cuerpo más asimétrico se tendrá en $\sigma = \pi/6$.

El hecho de que el vector de momento angular \mathbf{L} sea de magnitud constante, sugiere hacer $r = 1$, sin que esto implique pérdida de generalidad. Debido a esto, de ahora en adelante se considera sólomente el vector unitario

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{sn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{cn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{cn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{sn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{dn}(c\phi_2, \kappa_2) \end{pmatrix}, \tag{2.32}$$

en donde además se introdujo la constante adimensional

$$c = \sqrt{e_1 - e_3}, \tag{2.33}$$

para hacer compatible este modelo con el del caso cuántico.

2.4. El hamiltoniano en coordenadas esféricas

Una vez establecido el sistema de coordenadas que vamos a utilizar, lo que sigue es usar la formulación de Hamilton-Jacobi [8] para tratar de resolver el problema. El primer paso en este procedimiento consiste en construir la función lagrangiana L de nuestro sistema, la cual como se sabe, depende de las coordenadas generalizadas q_j , las velocidades generalizadas \dot{q}_j , y en algunos casos del tiempo t ,

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i, t). \tag{2.34}$$

Las coordenadas generalizadas pueden ser cualquier conjunto de parámetros independientes que sirvan para describir el sistema de interés. En nuestro caso las coordenadas generalizadas son las coordenadas esferoconales ϕ_1 , y ϕ_2 .

Recordemos ahora, que la función lagrangiana se construye como la diferencia entre la energía cinética K_c y la energía potencial V

$$\mathcal{L} = K_c - V, \quad (2.35)$$

sin embargo, también recordemos que para el cuerpo rígido libre de torcas el potencial V es nulo ($V = 0$), y en consecuencia la función \mathcal{L} será igual a la energía cinética de rotación, es decir,

$$\mathcal{L} = K_c = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{I} \boldsymbol{\omega}. \quad (2.36)$$

La matriz de inercia \mathbf{I} que aparece en (2.36), no depende ni de las coordenadas, ni de las velocidades generalizadas, toda la dependencia de \mathcal{L} está contenida en el vector de velocidad angular $\boldsymbol{\omega}$. Para hacer explícita esta dependencia, conviene utilizar la ecuación (1.31) que define al vector de velocidad angular del sistema anclado, en términos de los vectores \mathbf{u} , \mathbf{v} y el parámetro adicional γ

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v}} [\dot{\mathbf{u}} \times (\mathbf{u} + \mathbf{v})] + \dot{\gamma} \mathbf{u},$$

donde \mathbf{u} está definido por (2.32) y \mathbf{v} es un vector indefinido hasta el momento.

Con el uso de esta parametrización, debemos considerar al parámetro γ como una tercera coordenada generalizada, la cual es cíclica, y en consecuencia su momento canónico conjugado deberá ser una constante de movimiento.

La formulación de Hamilton-Jacobi requiere del conocimiento previo del hamiltoniano H del sistema, para construirlo, recordemos que si el potencial es independiente de las velocidades y las ecuaciones de transformación que definen las coordenadas generalizadas son independientes del tiempo, entonces el hamiltoniano será igual a la energía total del sistema. Ambas condiciones se cumplen para el cuerpo rígido libre de torcas, ya que $V = 0$ y la transformación (2.25) es independiente del tiempo, por lo tanto,

$$H = K_c = \frac{1}{2} \mathbf{L}^T \mathbf{I}^{-1} \mathbf{L}. \quad (2.37)$$

El hamiltoniano es en general una función de las coordenadas generalizadas q_j , los momentos canónicos $p_j = \partial\mathcal{L}/\partial q_j$, y del tiempo t

$$H = H(q_i, p_j, t). \quad (2.38)$$

En nuestro caso el hamiltoniano es la constante de movimiento (2.37), donde la matriz \mathbf{I} no depende de ninguna de las variables antes mencionadas, toda la dependencia de H está contenida en el vector de momento angular \mathbf{L} .

Por definición, los momentos conjugados a las coordenadas ϕ_1 , ϕ_2 , y γ , se expresan como

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_1} = \mathbf{L}^T \frac{\partial\boldsymbol{\omega}}{\dot{\phi}_1}, \\ p_2 &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_2} = \mathbf{L}^T \frac{\partial\boldsymbol{\omega}}{\dot{\phi}_2}, \\ p_\gamma &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\gamma}} = \mathbf{L}^T \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (2.39)$$

donde el momento p_γ tendrá que ser una constante de movimiento.

Para desarrollar las derivadas que aparecen en las ecuaciones (2.39), resulta útil definir la siguiente base de vectores

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \frac{\partial(\mathbf{u}+\mathbf{v})}{\partial\phi_1}, \\ \mathbf{e}_2 &= \frac{\partial(\mathbf{u}+\mathbf{v})}{\partial\phi_2}, \\ \mathbf{e}_3 &= (\mathbf{u}+\mathbf{v}), \end{aligned} \quad (2.40)$$

la cual no es una base ortogonal, aunque los vectores \mathbf{e}_1 y \mathbf{e}_2 sí son ortogonales cuando se cumple la condición

$$\kappa_1^2 + \kappa_2^2 = 1. \quad (2.41)$$

Este hecho y la condición (2.29) nos permite escribir a los parámetros κ_1 y κ_2 en la forma

$$\kappa_1 = \sqrt{\frac{e_2 - e_3}{e_1 - e_3}}, \quad (2.42)$$

y

$$\kappa_2 = \sqrt{\frac{e_1 - e_2}{e_1 - e_3}}. \quad (2.43)$$

Es evidente que la base (2.40) depende de la elección del vector \mathbf{v} ; esta elección es arbitraria, pero una vez que se realiza, la base queda completamente definida.

Independientemente de cuál sea la elección del vector \mathbf{v} , con ayuda de la base (2.40) podemos llegar a las expresiones

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{1}{1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v}} \mathbf{L}^T [\mathbf{e}_1 \times (\mathbf{u} + \mathbf{v})], \\ p_2 &= \frac{1}{1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v}} \mathbf{L}^T [\mathbf{e}_2 \times (\mathbf{u} + \mathbf{v})], \\ p_\gamma &= \mathbf{L}^T \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

donde se usó que

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{e}_1 \dot{\phi}_1 + \mathbf{e}_2 \dot{\phi}_2 \quad (2.45)$$

Para encontrar la dependencia explícita del vector de momento angular \mathbf{L} en las coordenadas esferoconales ϕ_1 , ϕ_2 , y en los momentos canónicos p_1 , p_2 , y p_γ , el primer paso consiste en escribir al vector \mathbf{L} como una combinación lineal de los vectores (2.40), esto es

$$\mathbf{L} = A_1 \mathbf{e}_1 + A_2 \mathbf{e}_2 + A_3 \mathbf{e}_3. \quad (2.46)$$

Los coeficientes A_1 , A_2 , y A_3 , se encuentran con ayuda de la base dual de (2.40), esta base está formada por los vectores

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^1 &= \frac{\mathbf{e}_2 \times (\mathbf{u} + \mathbf{v})}{F(1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v})}, \\ \mathbf{e}^2 &= \frac{-[\mathbf{e}_1 \times (\mathbf{u} + \mathbf{v})]}{F(1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v})}, \\ \mathbf{e}^3 &= \frac{\mathbf{u}}{1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v}}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

donde

$$F = (e_1 - e_3) - (e_2 - e_3) \operatorname{sn}^2(c\phi_1, \kappa_1) - (e_1 - e_2) \operatorname{sn}^2(c\phi_2, \kappa_2), \quad (2.48)$$

considerando a los vectores \mathbf{e}_1 y \mathbf{e}_2 ortogonales.

Para calcular esta función se usaron las siguientes propiedades de las funciones elípticas

$$\operatorname{sn}^2(\phi, \kappa) + \operatorname{cn}^2(\phi, \kappa) = 1, \quad (2.49)$$

$$\kappa \operatorname{sn}^2(\phi, \kappa) + \operatorname{dn}^2(\phi, \kappa) = 1, \quad (2.50)$$

$$\operatorname{dn}^2(\phi, \kappa) - \kappa^2 \operatorname{cn}^2(\phi, \kappa) = 1 - \kappa^2. \quad (2.51)$$

Al comparar las ecuaciones (2.44) y (2.47) se encuentran expresiones más sencillas para los momentos p_1 , p_2 , y p_γ

$$\begin{aligned} p_1 &= -F \mathbf{L}^T \mathbf{e}^2, \\ p_2 &= F \mathbf{L}^T \mathbf{e}^1, \\ p_\gamma &= (1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v}) \mathbf{L}^T \mathbf{e}^3, \end{aligned} \quad (2.52)$$

los cuales, junto con la propiedad $\mathbf{e}_i^T \mathbf{e}^k = \delta_i^k$, permiten finalmente encontrar la expresión que se requiere para el vector \mathbf{L} , esto es

$$\mathbf{L} = \left[\frac{p_2}{F} \mathbf{e}_1 - \frac{p_1}{F} \mathbf{e}_2 \right] + \frac{p_\gamma}{1 + \mathbf{u}^T \mathbf{v}} (\mathbf{u} + \mathbf{v}). \quad (2.53)$$

Debido a que aún no se ha establecido cuál es la forma explícita del vector \mathbf{v} , la tercera componente de \mathbf{L} se encuentra indefinida, esto nos obliga a hacer una elección particular, la cual, como se mencionó anteriormente es arbitraria y obviamente elegiremos aquel vector que nos permita una mayor simplificación del problema.

Usando el hecho de que el vector \mathbf{J} es una constante de movimiento, podemos asociarlo con la dirección del eje uno, y no con la del eje tres que comúnmente se maneja en la literatura; al hacer esto conviene elegir al vector \mathbf{v} como

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.54)$$

ya que entonces

$$p_\gamma = \mathbf{L}^T \mathbf{u} = \mathbf{J}^T \mathbf{v} = 0. \quad (2.55)$$

Con este resultado la expresión del vector de momento angular (2.53) se simplifica enormemente, quedando sólo

$$\mathbf{L} = \frac{1}{F} [\mathbf{e}_1 p_2 - \mathbf{e}_2 p_1]. \quad (2.56)$$

Antes de sustituir este vector en el hamiltoniano (2.37), conviene usar las ecuaciones (2.26) para expresarlo en la forma

$$H = \frac{Q}{2} \mathbf{L}^2 + \frac{P}{2} \mathbf{L}^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{L}, \quad (2.57)$$

donde $\boldsymbol{\xi}$ es la matriz diagonal

$$\begin{pmatrix} e_1 & 0 & 0 \\ 0 & e_2 & 0 \\ 0 & 0 & e_3 \end{pmatrix}. \quad (2.58)$$

Usando ahora (2.56) es fácil demostrar que

$$\mathbf{L}^2 = \frac{1}{F} (p_1^2 + p_2^2), \quad (2.59)$$

y

$$\mathbf{L}^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{L} = \frac{1}{F^2} (\mathbf{e}_1^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1 p_2^2 + \mathbf{e}_2^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2 p_1^2). \quad (2.60)$$

Esta última expresión se puede escribir de una manera más conveniente al usar la forma explícita de los vectores \mathbf{e}_1 y \mathbf{e}_2 , esto es,

$$\mathbf{e}_1 = c \begin{pmatrix} -\kappa_1^2 \operatorname{sn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{cn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{sn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ -\operatorname{sn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{dn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{cn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ -\operatorname{cn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{dn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{dn}(c\phi_2, \kappa_2) \end{pmatrix}, \quad (2.61)$$

y

$$\mathbf{e}_2 = c \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{cn}(c\phi_2, \kappa_2) \operatorname{dn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ -\operatorname{cn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{sn}(c\phi_2, \kappa_2) \operatorname{dn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ -\kappa_2^2 \operatorname{sn}(c\phi_1, \kappa_1) \operatorname{sn}(c\phi_2, \kappa_2) \operatorname{cn}(c\phi_2, \kappa_2) \end{pmatrix}, \quad (2.62)$$

logrando con esto desarrollar los productos $\mathbf{e}_1^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1$ y $\mathbf{e}_2^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2$, en la forma

$$\mathbf{e}_1^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1 = [e_3 + (e_2 - e_3) \operatorname{sn}^2(c\phi_1, \kappa_1)]F, \quad (2.63)$$

y

$$\mathbf{e}_2^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2 = [e_1 - (e_1 - e_2) \operatorname{sn}^2(c\phi_2, \kappa_2)]F, \quad (2.64)$$

o bien definir las funciones

$$\wp_1(\phi_1) = e_3 + (e_2 - e_3) \operatorname{sn}^2(c\phi_1, \kappa_1), \quad (2.65)$$

y

$$\wp_2(\phi_2) = e_1 - (e_1 - e_2) \operatorname{sn}^2(c\phi_2, \kappa_2), \quad (2.66)$$

para obtener

$$\mathbf{e}_1^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1 = \wp_1(\phi_1)F, \quad (2.67)$$

y

$$\mathbf{e}_2^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2 = \wp_2(\phi_2)F, \quad (2.68)$$

donde $\wp_1(\phi_1)$ y $\wp_2(\phi_2)$ son funciones relacionadas con las funciones elípticas de Weierstrass.

Al sustituir (2.67) y (2.68) en la expresión (2.60), se encuentra que

$$\mathbf{L}^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{L} = \frac{1}{F} [\wp_2(\phi_2)p_1^2 + \wp_1(\phi_1)p_2^2] \quad (2.69)$$

y al sustituir (2.59) y (2.69) en (2.57), se obtiene finalmente la expresión para el hamiltoniano en términos de las coordenadas esferoconales ϕ_1 , ϕ_2 , y los momentos canónicos p_1 , p_2 .

$$H = \frac{Q}{2F} [p_1^2 + p_2^2] + \frac{P}{2F} [\wp_2(\phi_2)p_1^2 + \wp_1(\phi_1)p_2^2] \quad (2.70)$$

2.5. Ecuación de Hamilton-Jacobi en coordenadas esferoconales

Debido a que el hamiltoniano (2.70) es independiente del tiempo, podemos construir la ecuación de Hamilton-Jacobi para la función característica

$$W = W(\phi_1, \phi_2, \alpha_1, \alpha_2), \quad (2.71)$$

donde α_1 y α_2 son los nuevos momentos canónicos constantes que requiere la teoría.

La ecuación de Hamilton-Jacobi será entonces de la forma

$$H(\phi_1, \phi_2, \frac{\partial W}{\partial \phi_1}, \frac{\partial W}{\partial \phi_2}) - \alpha_1 = 0, \quad (2.72)$$

es decir

$$\frac{Q}{2F} [(\frac{\partial W}{\partial \phi_1})^2 + (\frac{\partial W}{\partial \phi_2})^2] + \frac{P}{2F} [\wp_2(\phi_2)(\frac{\partial W}{\partial \phi_1})^2 + \wp_1(\phi_1)(\frac{\partial W}{\partial \phi_2})^2] = \alpha_1, \quad (2.73)$$

la cual, con una sencilla manipulación se puede separar en las dos ecuaciones ordinarias

$$(\frac{dW_1}{d\phi_1})^2 + \frac{2\alpha_1}{P} - C(P\wp_1(\phi_1) + Q) = 0 \quad (2.74)$$

$$(\frac{dW_2}{d\phi_2})^2 - \frac{2\alpha_1}{P} + C(P\wp_2(\phi_2) + Q) = 0 \quad (2.75)$$

donde C es la constante de separación.

Desde aquí podemos considerar que el problema está resuelto, ya que en principio podemos conocer las funciones W_1 y W_2 , con las que se construye la función (2.71) en la forma

$$W(\phi_1, \phi_2, \alpha_1, \alpha_2) = W_1(\phi_1, \alpha_1) + W_2(\phi_2, \alpha_2), \quad (2.76)$$

para posteriormente usar las ecuaciones de transformación canónica y terminar con la solución explícita del problema. Sin embargo esta solución no es en realidad necesaria, lo que realmente interesa es mostrar que un procedimiento análogo a éste, donde se use el mismo sistema de coordenadas,

nos conduce también a una solución en variables separables del problema cuántico, aunque ya no en forma de sumas sino de productos de funciones.

Capítulo 3

El cuerpo rígido cuántico

En la formulación de Schrödinger de la mecánica cuántica, se postula que el estado de un sistema en algún instante de tiempo, puede ser representado por una función de onda o función de estado Ψ , la cual para ser físicamente aceptable debe cumplir con los requisitos de ser una función acotada, continua, y univaluada. Toda la información física relativa al estado del sistema está contenida en esa función de onda, cuya evolución temporal está determinada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi, \quad (3.1)$$

donde \hbar es la constante de Planck dividida entre 2π , y \hat{H} es el operador hamiltoniano definido como la suma de los operadores de energía cinética \hat{K}_c y energía potencial \hat{V}

$$\hat{H} = \hat{K}_c + \hat{V}. \quad (3.2)$$

Cuando el operador hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo, la solución de la ecuación de Schrödinger (3.1) se separa en el producto

$$\Psi = \Psi(\mathbf{r})T(t), \quad (3.3)$$

donde $T(t)$ es de la forma

$$T(t) = A \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (3.4)$$

y $\Psi(\mathbf{r})$ es solución de la ecuación de eigenvalores

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (3.5)$$

conocida como ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Resolver esta ecuación significa encontrar tanto los eigenvalores $\{E_n\}$ que representan las energías permitidas del sistema, como sus correspondientes eigenfunciones $\{\Psi_n(\mathbf{r})\}$ que representan los estados del sistema. Para cada una de estas soluciones, existe una solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo de la forma

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = A\Psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad (3.6)$$

lo que quiere decir que cuando el operador hamiltoniano de algún sistema no depende explícitamente del tiempo, el problema de encontrar las funciones de onda $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$, se reduce a resolver la ecuación de eigenvalores (3.5).

3.1. El operador de energía cinética \hat{K}_c y los operadores de momento angular $\hat{\mathbf{L}}$ y $\hat{\mathbf{J}}$

Recordemos ahora que para construir el modelo cuántico de la molécula rígida, pretendemos seguir un camino similar al que se usó para desarrollar el modelo clásico del cuerpo rígido libre de torcas. La primera idea importante que se tiene que tomar en cuenta en esta analogía, es la de considerar nulo al operador de energía potencial ($\hat{V} = 0$); esto quiere decir que el operador hamiltoniano será igual al operador de energía cinética de rotación \hat{K}_c

$$\hat{H} = \hat{K}_c. \quad (3.7)$$

Este operador es básicamente un operador laplaciano, el cual tendrá que ser construido en términos de algún conjunto conocido de parámetros rotacionales, como los estudiados en el capítulo uno. Para lograrlo, será necesario recurrir al uso de conceptos y notaciones de la geometría de Riemann, y por supuesto también al uso del modelo clásico del cuerpo rígido libre de torcas.

Lo que se hace es construir una expresión general para la energía cinética clásica en términos de las velocidades generalizadas \dot{q}^j , para después compararla con alguna de las expresiones de la energía cinética ya conocidas, y encontrar con ello una métrica en el espacio de Riemann que nos sirva para

construir el operador laplaciano en términos de algún conjunto conocido de parámetros rotacionales.

Concretamente, si consideramos las coordenadas $\{q^j\}$ como contravariantes y a sus momentos conjugados $\{p_j\}$ como coordenadas covariantes, la energía cinética se expresa de manera general como una forma cuadrática de los momentos p_j , esto es,

$$K_c = \frac{1}{2}g^{jk}(q)p_j p_k, \quad (3.8)$$

donde se usa la convención de suma de Einstein para índices repetidos.

Cuando el hamiltoniano es igual a la energía cinética del sistema, las ecuaciones de Hamilton nos permiten obtener las velocidades generalizadas \dot{q}^j en términos de los momentos $\{p_j\}$

$$\dot{q}^j = \frac{\partial \hat{K}_c}{\partial p_j} = g^{jk}(q)p_k, \quad (3.9)$$

esta relación lineal entre las velocidades y los momentos se puede invertir si multiplicamos ambos lados de (3.9) por g_{jk} (el inverso del tensor g^{jk}), con lo que se obtiene

$$p_k = g_{jk}(q)\dot{q}^j. \quad (3.10)$$

Al combinar esta ecuación con (3.8), se obtiene finalmente la energía K_c como una función de las velocidades generalizadas \dot{q}^j

$$K_c = \frac{1}{2}g_{jk}(q)\dot{q}^j \dot{q}^k. \quad (3.11)$$

Es ahora conveniente considerar al espacio de configuración como un espacio de Riemann con métrica

$$ds^2 = g_{jk}(q)dq^j dq^k, \quad (3.12)$$

con lo que el operador de energía cinética \hat{K}_c se expresa en la forma

$$\hat{K}_c = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta, \quad (3.13)$$

donde Δ es el operador laplaciano sobre el espacio de Riemann definido como

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^j} (\sqrt{g} g^{jk} \frac{\partial}{\partial q^k}). \quad (3.14)$$

La cantidad g que aparece en la última expresión es el determinante de la matriz de componentes g_{jk} .

Si ahora comparamos la ecuación (3.11) con la expresión (1.44) de la energía cinética clásica de rotación

$$K_c = \frac{\dot{\boldsymbol{\zeta}}^T \mathbf{B}^T \mathbf{I} \mathbf{B} \dot{\boldsymbol{\zeta}}}{2},$$

es fácil darse cuenta que el tensor métrico g_{jk} , asociado con los parámetros $\boldsymbol{\zeta}$, está dado por la expresión

$$g_{jk} = (\mathbf{B}^T \mathbf{I} \mathbf{B})_{jk}. \quad (3.15)$$

Usando este resultado en la fórmula (3.14), se tiene que

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \zeta^j} \{ \sqrt{g} [\mathbf{B}^{-1} \mathbf{I}^{-1} (\mathbf{B}^T)^{-1}]^{jk} \frac{\partial}{\partial \zeta^k} \}, \quad (3.16)$$

donde el determinante g es de la forma

$$g = |\mathbf{B}^T \mathbf{I} \mathbf{B}| = I_1 I_2 I_3 \frac{64}{1 - \zeta^2}. \quad (3.17)$$

Al desarrollar los cálculos que aparecen en (3.16) se encuentra la forma explícita del operador laplaciano en términos de los parámetros $\boldsymbol{\zeta}$, esto es,

$$\Delta = [(\mathbf{B}^T)^{-1} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\zeta}}]^T \mathbf{I}^{-1} [(\mathbf{B}^T)^{-1} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\zeta}}], \quad (3.18)$$

y al sustituir este resultado en (3.13) se encuentra finalmente el operador de energía cinética rotacional en términos de esos mismos parámetros

$$\hat{K}_c = -\frac{\hbar^2}{2} [(\mathbf{B}^T)^{-1} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\zeta}}]^T \mathbf{I}^{-1} [(\mathbf{B}^T)^{-1} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\zeta}}]. \quad (3.19)$$

Es importante darse cuenta que si definimos el operador $\hat{\mathbf{L}}$ como

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar (\mathbf{B}^T)^{-1} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\zeta}}, \quad (3.20)$$

el operador de energía cinética (3.19) se puede expresar en la misma forma que la función de energía cinética clásica (2.37), es decir

$$\hat{K}_c = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{L}}^T \mathbf{I}^{-1} \hat{\mathbf{L}}. \quad (3.21)$$

Recordemos que \mathbf{L} es el vector de momento angular en el sistema anclado; por lo tanto, al comparar (3.21) con (2.37) podemos considerar al operador $\hat{\mathbf{L}}$ como el operador de momento angular en el sistema anclado.

Esta analogía se verifica fácilmente cuando se calculan los momentos conjugados a las coordenadas $\boldsymbol{\zeta}$, esto es

$$\mathbf{p} = (\mathbf{B}^T \mathbf{I} \mathbf{B}) \dot{\boldsymbol{\zeta}}, \quad (3.22)$$

los cuales al combinarse con (1.34) y (1.43) se expresan como

$$\mathbf{p} = \mathbf{B}^T \mathbf{L}, \quad (3.23)$$

y el vector de momento angular \mathbf{L} se puede escribir en la forma

$$\mathbf{L} = (\mathbf{B}^T)^{-1} \mathbf{p}. \quad (3.24)$$

Similarmente, se puede definir el operador

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\zeta}}, \quad (3.25)$$

y escribir el operador (3.20) en la misma forma que el vector de momento angular clásico (3.24), esto es,

$$\hat{\mathbf{L}} = (\mathbf{B}^T)^{-1} \hat{\mathbf{p}}, \quad (3.26)$$

lo cual es consistente con la analogía antes mencionada.

El operador de momento angular del sistema inercial se denota por $\hat{\mathbf{J}}$, y se encuentra al rotar el operador de momento angular (3.20)

$$\hat{\mathbf{J}} = \mathbf{R}[-i\hbar(\mathbf{B}^T)^{-1} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\zeta}}] = -i\hbar \mathbf{B}^{-1} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\zeta}}; \quad (3.27)$$

este operador se expresa en una forma más adecuada usando la definición (3.25)

$$\hat{\mathbf{J}} = \mathbf{B}^{-1} \hat{\mathbf{p}}, \quad (3.28)$$

y de este modo, la analogía con el vector de momento angular clásico se encuentra fácilmente al de rotar el vector (3.24), esto es,

$$\mathbf{J} = \mathbf{R}(\mathbf{B}^T)^{-1}\mathbf{p} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{p}. \quad (3.29)$$

Con estos resultados la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, adquiere la forma

$$\frac{1}{2}\hat{\mathbf{L}}^T\mathbf{I}^{-1}\hat{\mathbf{L}}\Psi = E\Psi, \quad (3.30)$$

y en principio, el siguiente paso sería resolverla para encontrar las funciones de onda Ψ y sus correspondientes eigenvalores E_n , que van a caracterizar los niveles de energía de rotación de la molécula.

Sin embargo, la obtención de estos resultados no es tan directa; antes de intentar resolver la ecuación (3.30), se tienen que tomar en cuenta algunos aspectos de la teoría cuántica, que por su importancia, serán discutidos en la siguiente sección. Por lo pronto nos adelantamos a mencionar que será de gran utilidad conocer las expresiones de los operadores $\hat{\mathbf{L}}$ y $\hat{\mathbf{J}}$, en términos de los ángulos de Euler.

Estas expresiones se encuentran al usar la transformación de coordenadas (1.24)

$$\zeta = \pm \begin{pmatrix} \text{sen}(\frac{\theta}{2})\cos(\frac{\phi-\psi}{2}) \\ \text{sen}(\frac{\theta}{2})\text{sen}(\frac{\phi-\psi}{2}) \\ \cos(\frac{\theta}{2})\text{sen}(\frac{\phi+\psi}{2}) \end{pmatrix},$$

con la que después de algunos cálculos, se obtienen finalmente las componentes de los vectores $\hat{\mathbf{L}}$ y $\hat{\mathbf{J}}$, en la forma

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(\cos\psi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\text{sen}\psi}{\text{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \cot\theta\text{sen}\psi\frac{\partial}{\partial\psi}\right) \quad (3.31)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(-\text{sen}\psi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\psi}{\text{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \cot\theta\cos\psi\frac{\partial}{\partial\psi}\right) \quad (3.32)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\psi}\right) \quad (3.33)$$

y

$$\hat{J}_x = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\text{sen}\phi}{\text{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\psi} - \cot\theta\text{sen}\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \quad (3.34)$$

$$\hat{J}_y = -i\hbar\left(\text{sen}\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\text{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\psi} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \quad (3.35)$$

$$\hat{J}_z = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \quad (3.36)$$

3.2. Los estados del sistema. Eigenfunciones comunes de \hat{H} , $\hat{\mathbf{J}}^2$ y \hat{J}_z

De la sección anterior sabemos que las funciones de onda que representan los estados de la molécula rígida, tendrán que ser solución de la ecuación de Schrödinger (3.30)

$$\frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}}^T \mathbf{I}^{-1} \hat{\mathbf{L}})\Psi = E\Psi.$$

Sin embargo, esta condición es necesaria pero no suficiente para determinar completamente los estados del sistema; de hecho, lo ideal sería encontrar un conjunto completo de funciones de onda que nos sirva para construir cualquier estado, como combinación lineal de los elementos de ese conjunto.

En general, se sabe que cuando tres operadores, digamos \hat{A} , \hat{B} , y \hat{C} , conmutan entre sí

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0, \quad (3.37)$$

$$[\hat{A}, \hat{C}] = 0, \quad (3.38)$$

$$[\hat{B}, \hat{C}] = 0, \quad (3.39)$$

y ningún otro operador conmuta simultáneamente con ellos, entonces es posible encontrar un conjunto completo de funciones de onda $\{\Psi_{abc}\}$ que satisfagan simultáneamente las ecuaciones de eigenvalores

$$\hat{A}\Psi_{abc} = a\Psi_{abc}, \quad (3.40)$$

$$\hat{B}\Psi_{abc} = b\Psi_{abc}, \quad (3.41)$$

$$\hat{C}\Psi_{Eab} = c\Psi_{abc}, \quad (3.42)$$

donde a , b , y c son valores bien definidos de las variables dinámicas representadas por los operadores \hat{A} , \hat{B} y \hat{C} ; de este modo, cada estado Ψ_{abc} está completamente determinado, y además de manera única por la terna de eigenvalores a, b, c .

Cuando uno de los operadores, por ejemplo \hat{A} , es igual al operador hamiltoniano \hat{H} , generalmente existen otros conjuntos de operadores de la forma $\{\hat{H}, \hat{D}, \hat{F}\}$, $\{\hat{H}, \hat{G}, \hat{M}\}$, etc., distintos del conjunto $\{\hat{H}, \hat{B}, \hat{C}\}$, que también satisfacen las reglas de conmutación antes mencionadas, e igualmente sirven para construir un conjunto completo de funciones de onda para el sistema que se esté tratando; sin embargo, sólo uno de esos conjuntos puede ser utilizado, y una vez que se elige, también se elijen los eigenvalores que van a caracterizar los estados del sistema.

En el caso particular de la molécula rígida, nos interesa conocer las eigenfunciones comunes de los operadores \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$, y \hat{J}_z , para lo cual, tenemos que conocer primero las ecuaciones de eigenvalores de esos tres operadores. Una de esas ecuaciones es obviamente la ecuación (3.30), las dos restantes se encuentran al demostrar que

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{J}}^2, \quad (3.43)$$

ya que de este modo es posible usar la teoría estándar del momento angular, en la que aparecen las ecuaciones

$$\hat{\mathbf{L}}^2\Psi = \hbar^2 l(l+1)\Psi, \quad (3.44)$$

y

$$\hat{J}_z\Psi = \hbar m\Psi, \quad (3.45)$$

donde l y m son números enteros sujetos a la condición de que $-l \leq m \leq l$.

Nuestro objetivo es entonces encontrar las soluciones comunes de las ecuaciones (3.30), (3.44), y (3.45), esto es,

$$\frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}}^T \mathbf{I}^{-1} \hat{\mathbf{L}})\Psi = E\Psi,$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \Psi = \hbar^2 l(l+1) \Psi,$$

$$\hat{J}_z \Psi = \hbar m \Psi.$$

Es interesante señalar que así como en el caso clásico, el estado de un sistema puramente rotacional está determinado por tres parámetros independientes, en el caso cuántico cualquier función de estado para la molécula rígida va a estar determinada por los tres números cuánticos E , l , y m .

Una simplificación importante del sistema de ecuaciones anterior se obtiene al considerar el uso de los operadores de escalera

$$\hat{J}_x \pm i \hat{J}_y, \quad (3.46)$$

los cuales al actuar sobre una solución común de las ecuaciones (3.30), (3.44), y (3.45), dan como resultado una solución a las mismas ecuaciones con el mismo valor de E y l , pero con el entero m aumentado o reducido en una unidad. Esta propiedad nos permite considerar sólo las soluciones con $m = 0$ sin que esto implique pérdida de generalidad, ya que las funciones restantes pueden ser construidas por la aplicación sucesiva de los operadores (3.46).

El efecto de la condición $m = 0$ sobre las funciones de onda, se obtiene al considerar la forma explícita (3.36) del operador \hat{J}_z en la ecuación (3.45), encontrándose con ello que las funciones de onda Ψ deberán ser independientes del ángulo ϕ , y las derivadas respecto a esa variable tendrán que ser eliminadas de todos los lugares en donde aparezcan. Esto simplifica en gran medida las componentes (3.31)-(3.33) del operador de momento angular $\hat{\mathbf{L}}$, quedando ahora en la forma

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(\cos \psi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \psi \frac{\partial}{\partial \psi} \right), \quad (3.47)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(-\sin \psi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \psi \frac{\partial}{\partial \psi} \right), \quad (3.48)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \psi}. \quad (3.49)$$

Estas componentes son muy semejantes a las componentes del operador de momento angular en coordenadas esféricas del átomo de hidrógeno, excepto por el signo y la transformación $\psi = \pi/2 - \varphi$, sin embargo, esta diferencia resulta irrelevante cuando lo que interesa es el cuadrado del operador $\hat{\mathbf{L}}$.

Con estos resultados el problema se vuelve más sencillo, ya que además de haber eliminado una de las variables del problema, ahora sólomente se tienen que resolver dos ecuaciones simultáneas, la (3.30) y la (3.44).

Conviene detenerse en este punto para revisar algunas analogías con el modelo clásico. La primera de ellas se da entre el par de ecuaciones (2.18) y (2.21), con las (3.30) y (3.44). Se trata de dos pares de ecuaciones muy semejantes, sólo que en un caso deben ser satisfechas por el vector \mathbf{L} , y en el otro por las funciones de onda Ψ .

La segunda analogía se da entre la ecuación (3.43), y el hecho de que los vectores \mathbf{L} y \mathbf{J} del modelo clásico, tienen la misma magnitud.

Una tercera analogía está en el efecto que causan las condiciones clásica ($p_\gamma = 0$), y la cuántica ($m = 0$). En el primer caso se elimina una de las tres componentes del vector de momento angular (2.53), mientras que en el otro se elimina una de las tres ecuaciones simultáneas que determinan las funciones de onda del sistema.

Para continuar con un procedimiento análogo al que condujo a la solución en variables separables del modelo clásico, hacen falta básicamente dos cosas: introducir los parámetros e_1 , e_2 , e_3 , y expresar las componentes del operador de momento angular $\hat{\mathbf{L}}$ en términos de coordenadas esferoconales.

Al igual que en el caso clásico, los parámetros e_1 , e_2 , y e_3 se introducen considerando el sistema de ejes principales de inercia, con lo cual la ecuación (3.30) se convierte en

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\hat{L}_1^2}{I_1} + \frac{\hat{L}_2^2}{I_2} + \frac{\hat{L}_3^2}{I_3} \right) \Psi = E \Psi. \quad (3.50)$$

Una vez hecho esto podemos volver a utilizar las ecuaciones (2.26)

$$\frac{1}{I_j} = Q + P e_j \quad (j = 1, 2, 3),$$

para escribir la ecuación (3.50) en la forma

$$(e_1 \hat{L}_1^2 + e_2 \hat{L}_2^2 + e_3 \hat{L}_3^2) \Psi = \left(\frac{2E - Ql(l+1)\hbar^2}{P} \right) \Psi. \quad (3.51)$$

Es importante mencionar que el parámetro σ definido en (2.31) sigue siendo una medida del grado de asimetría del cuerpo rígido, la única diferencia es que ahora se trata de un cuerpo rígido microscópico.

Podemos ahora definir la energía reducida E^* y construir la cantidad

$$2E^* = \frac{2E - Ql(l+1)\hbar^2}{P}, \quad (3.52)$$

la cual se usa para escribir la ecuación (3.51) en la forma

$$(e_1 \hat{L}_1^2 + e_2 \hat{L}_2^2 + e_3 \hat{L}_3^2)\Psi = 2E^*\Psi. \quad (3.53)$$

Es claro que ya no se trata de una ecuación de eigenvalores de energía, debido a que la cantidad $2E^*$ tiene las mismas dimensiones que \hbar^2 , sin embargo, las eigenfunciones que satisfacen ésta ecuación sí son las mismas que satisfacen la ecuación (3.50), y los eigenvalores de energía se pueden encontrar por medio de la transformación

$$\frac{2E}{\hbar^2 l(l+1)} = Q + P \frac{2E^*}{\hbar^2 l(l+1)}. \quad (3.54)$$

La ecuación (3.53) también se puede escribir en la forma

$$\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}} \Psi = 2E^* \Psi, \quad (3.55)$$

donde al igual que en el modelo clásico, el símbolo $\boldsymbol{\xi}$ representa la matriz diagonal

$$\begin{pmatrix} e_1 & 0 & 0 \\ 0 & e_2 & 0 \\ 0 & 0 & e_3 \end{pmatrix}. \quad (3.56)$$

Finalmente podemos concluir que el sistema de ecuaciones que hay que resolver, está formado por las ecuaciones (3.44) y (3.55), esto es

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \Psi = \hbar^2 l(l+1) \Psi,$$

y

$$\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}} \Psi = 2E^* \Psi,$$

donde los operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ y $\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}}$ tendrán que ser previamente expresados en coordenadas esferoconales.

Capítulo 4

Los operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ y $\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}}$ en coordenadas esferoconales

El primer paso de este capítulo es encontrar una transformación que nos permita pasar de los ángulos de Euler θ y ψ , a las coordenadas esferoconales ϕ_1 y ϕ_2 . Posteriormente con ayuda de alguna base adecuada de vectores, expresaremos al operador $\hat{\mathbf{L}}$ en términos de las coordenadas esferoconales, y finalmente haremos las operaciones necesarias para construir los operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ y $\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}}$.

4.1. La transformación de coordenadas

En la sección dos del capítulo uno, se mencionó que la dirección del sistema anclado que se rota en el vector constante (1.21) del sistema inercial

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

es de la forma

$$\begin{pmatrix} \text{sen } \theta \text{sen } \psi \\ \text{sen } \theta \text{cos } \psi \\ \text{cos } \theta \end{pmatrix}.$$

Por otro lado, en la sección tres del capítulo dos podemos encontrar que cualquier vector unitario \mathbf{u} del sistema anclado, se expresa en términos de las coordenadas esferoconales ϕ_1 y ϕ_2 , en la forma (2.32)

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(c\phi_1, \kappa_1)\operatorname{sn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{cn}(c\phi_1, \kappa_1)\operatorname{cn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{sn}(c\phi_1, \kappa_1)\operatorname{dn}(c\phi_2, \kappa_2) \end{pmatrix}.$$

Con estos resultados podemos concluir, que siempre que el vector \mathbf{u} se rote en el vector constante (1.21), se cumple la igualdad

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\psi \\ \operatorname{sen}\theta\cos\psi \\ \cos\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(c\phi_1, \kappa_1)\operatorname{sn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{cn}(c\phi_1, \kappa_1)\operatorname{cn}(c\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{sn}(c\phi_1, \kappa_1)\operatorname{dn}(c\phi_2, \kappa_2) \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

la cual define la transformación que nos interesa.

Obsérvese que al igual que en el modelo clásico, el vector \mathbf{u} se rota en el vector constante (1.21), aunque es importante señalar que en el caso anterior teníamos libertad para elegir esta dirección, mientras ahora, el vector \mathbf{u} necesariamente se tiene que rotar en el vector constante (1.21) para que la transformación (4.1) sea posible.

4.2. El operador $\hat{\mathbf{L}}$ en coordenadas esferoconales

Así como en el modelo clásico nos apoyamos en la base (2.40) para expresar al vector de momento angular \mathbf{L} en coordenadas esferoconales, en el caso cuántico hacemos uso de una base similar para escribir al operador $\hat{\mathbf{L}}$ en el mismo sistema de coordenadas. Esta base se define como

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \phi_1}, \\ \mathbf{e}_2 &= \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \phi_2}, \\ \mathbf{e}_3 &= \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde a diferencia de (2.40), ésta sí es una base ortogonal cuando se cumple la condición (2.41).

Por ser $\hat{\mathbf{L}}$ un operador de momento angular orbital, está definido como

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad (4.3)$$

donde para este caso particular

$$\mathbf{r} = r\mathbf{u}, \quad (4.4)$$

y la expresión

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad (4.5)$$

representa al operador gradiente en coordenadas esferoconales. La forma explícita de este operador, se encuentra con ayuda de la base dual de (4.2), y con la fórmula general

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{e}^l \frac{\partial}{\partial y^l}, \quad (4.6)$$

donde y^l representa a un sistema de coordenadas arbitrario.

El resultado que se obtiene es la expresión

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{u} \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_1 \frac{1}{rF} \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \mathbf{e}_2 \frac{1}{rF} \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \quad (4.7)$$

donde F es la misma función que aparece en (2.48).

Al sustituir (4.4) y (4.7) en (4.3), y desarrollar las operaciones que ahí se indican, se encuentra finalmente la expresión del operador de momento angular $\hat{\mathbf{L}}$ en coordenadas esferoconales

$$\hat{\mathbf{L}} = i\hbar \frac{1}{F} (\mathbf{e}_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2} - \mathbf{e}_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1}); \quad (4.8)$$

este operador es idéntico a la expresión del vector de momento angular \mathbf{L} (2.56) en coordenadas esferoconales. Los vectores \mathbf{e}_1 y \mathbf{e}_2 son los mismos que aparecen en ambas expresiones, la diferencia está en la constante $i\hbar$ y en el hecho de que los momentos p_1 y p_2 son sustituidos por los operadores diferenciales $(\partial/\partial\phi_1)$ y $(\partial/\partial\phi_2)$ respectivamente, esto es,

$$p_1 \rightarrow \frac{\partial}{\partial \phi_1}, \quad (4.9)$$

$$p_2 \rightarrow \frac{\partial}{\partial \phi_2}. \quad (4.10)$$

Estamos ahora preparados para calcular los operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ y $\mathbf{L}^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{L}$ en coordenadas esferoconales.

4.3. El operador $\hat{\mathbf{L}}^2$ en coordenadas esferoconales

La aplicación del operador $\hat{\mathbf{L}}^2$ sobre alguna función de ϕ_1 y ϕ_2 , es equivalente a aplicar dos veces el operador $\hat{\mathbf{L}}$ sobre esa misma función, esto es,

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^T \hat{\mathbf{L}}, \quad (4.11)$$

y de acuerdo con (4.8) tendremos que

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \frac{1}{F} (\mathbf{e}_1^T \frac{\partial}{\partial \phi_2} - \mathbf{e}_2^T \frac{\partial}{\partial \phi_1}) \left[\frac{1}{F} (\mathbf{e}_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2} - \mathbf{e}_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1}) \right], \quad (4.12)$$

o bien, al desarrollar las derivadas que aquí se indican

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 = & - \frac{\hbar^2}{F} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right) \right. \\ & + \left(-\frac{1}{F} \mathbf{e}_1 \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_1}{\partial \phi_2} + \frac{1}{F} \mathbf{e}_1 \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_2}{\partial \phi_1} \right) \frac{\partial}{\partial \phi_2} \\ & \left. + \left(-\frac{1}{F} \mathbf{e}_2 \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_2}{\partial \phi_1} + \frac{1}{F} \mathbf{e}_2 \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_1}{\partial \phi_2} \right) \frac{\partial}{\partial \phi_1} \right]. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Es posible demostrar que los coeficientes que multiplican a las primeras derivadas $(\partial/\partial \phi_1)$ y $(\partial/\partial \phi_2)$ son cero, es decir

$$-\frac{1}{F} \mathbf{e}_1 \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_1}{\partial \phi_2} + \frac{1}{F} \mathbf{e}_1 \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_2}{\partial \phi_1} = 0, \quad (4.14)$$

y

$$-\frac{1}{F} \mathbf{e}_2 \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_2}{\partial \phi_1} + \frac{1}{F} \mathbf{e}_2 \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_1}{\partial \phi_2} = 0, \quad (4.15)$$

con lo que finalmente se llega a que

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\frac{\hbar^2}{F} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right), \quad (4.16)$$

y nuevamente hemos encontrado una expresión muy similar a la del escalar clásico \mathbf{L}^2 en coordenadas esferoconales (2.59).

4.4. El operador $\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}}$ en coordenadas esferoconales

Debido a la presencia de la matriz $\boldsymbol{\xi}$, el cálculo del operador $\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}}$ resulta mucho más complicado. De acuerdo con (4.8), este operador se expresa en la forma

$$\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}} = -\frac{i\hbar}{F} (\mathbf{e}_2^T \frac{\partial}{\partial \phi_1} - \mathbf{e}_1^T \frac{\partial}{\partial \phi_2}) \left[-\frac{i\hbar}{F} (\boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} - \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}) \right], \quad (4.17)$$

donde al desarrollar las derivadas que ahí se indican, y usar las funciones (2.67) y (2.68), se obtiene la expresión

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}} &= -\frac{\hbar^2}{F} \left\{ [\varrho_2(\phi_2) \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \left(\frac{1}{F} \mathbf{e}_2^T \frac{\partial}{\partial \phi_1} (\boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2) \right. \right. \\ &+ \left. \left. (\mathbf{e}_2^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2) \frac{\partial}{\partial \phi_1} \left(\frac{1}{F} \right) - \frac{1}{F} \mathbf{e}_1^T \frac{\partial}{\partial \phi_2} (\boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2) \right) \frac{\partial}{\partial \phi_1} \right] \\ &+ \left[\varrho_1(\phi_1) \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} + \left(\frac{1}{F} \mathbf{e}_1^T \frac{\partial}{\partial \phi_2} (\boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1) \right. \right. \\ &+ \left. \left. (\mathbf{e}_1^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1) \frac{\partial}{\partial \phi_2} \left(\frac{1}{F} \right) - \frac{1}{F} \mathbf{e}_2^T \frac{\partial}{\partial \phi_1} (\boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1) \right) \frac{\partial}{\partial \phi_2} \right] \}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

En este caso también es posible demostrar que los coeficientes que multiplican a las primeras derivadas $(\partial/\partial \phi_1)$ y $(\partial/\partial \phi_2)$ son cero, es decir,

$$\frac{1}{F} \mathbf{e}_2^T \frac{\partial}{\partial \phi_1} (\boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2) + (\mathbf{e}_2^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2) \frac{\partial}{\partial \phi_1} \left(\frac{1}{F} \right) - \frac{1}{F} \mathbf{e}_1^T \frac{\partial}{\partial \phi_2} (\boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_2) = 0, \quad (4.19)$$

y

$$\frac{1}{F} \mathbf{e}_1^T \frac{\partial}{\partial \phi_2} (\boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1) + (\mathbf{e}_1^T \boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1) \frac{\partial}{\partial \phi_2} \left(\frac{1}{F} \right) - \frac{1}{F} \mathbf{e}_2^T \frac{\partial}{\partial \phi_1} (\boldsymbol{\xi} \mathbf{e}_1) = 0, \quad (4.20)$$

con lo que finalmente se llega a la expresión

$$\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}} = -\frac{\hbar^2}{F} [\wp_2(\phi_2) \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \wp_1(\phi_1) \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2}], \quad (4.21)$$

que también coincide con la expresión clásica (2.69).

Cabe señalar que ninguna de estas analogías son obvias, aunque sí bastante afortunadas.

Capítulo 5

Características de las funciones de onda

Ahora que tenemos los operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ y $\hat{\mathbf{L}}^T \boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{L}}$ en coordenadas esféricas, los sustituimos en las ecuaciones (3.44) y (3.55), para obtener la forma explícita del sistema de ecuaciones que nos interesa resolver, esto es,

$$-\frac{1}{F} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] \Psi = l(l+1)\Psi, \quad (5.1)$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{F} \left[\wp_2(\phi_2) \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \wp_1(\phi_1) \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] \Psi = 2E^* \Psi. \quad (5.2)$$

En realidad no existe un método estándar para encontrar las soluciones de este sistema de ecuaciones, sin embargo, el hecho de que los resultados obtenidos hasta el momento sean tan similares a los del modelo clásico del capítulo dos, nos hace pensar en la posibilidad de que también en este caso la solución sea de variables separables. Para verificar si esto funciona, vamos a suponer como hipótesis que las funciones de onda Ψ son de la forma

$$\Psi = \Lambda_1(\phi_1)\Lambda_2(\phi_2). \quad (5.3)$$

5.1. La ecuación de Lamé y los armónicos esferoconales

La sustitución de la función (5.3) en las ecuaciones (5.1) y (5.2), nos conduce a las expresiones

$$\Lambda_2 \frac{d^2 \Lambda_1}{d\phi_1^2} + \Lambda_1 \frac{d^2 \Lambda_2}{d\phi_2^2} = -l(l+1)F\Lambda_1\Lambda_2, \quad (5.4)$$

y

$$\Lambda_2 \wp_2(\phi_2) \frac{d^2 \Lambda_1}{d\phi_1^2} + \Lambda_1 \wp_1(\phi_1) \frac{d^2 \Lambda_2}{d\phi_2^2} = -\frac{2E^*}{\hbar^2} F\Lambda_1\Lambda_2. \quad (5.5)$$

Si por otro lado comparamos las funciones (2.65) y (2.66) con (2.48), se puede demostrar que la función F se escribe también en la forma

$$F = \wp_2(\phi_2) - \wp_1(\phi_1), \quad (5.6)$$

este resultado nos permite manipular las ecuaciones (5.4) y (5.5) para finalmente obtener el par de ecuaciones desacopladas

$$\frac{d^2 \Lambda_1(\phi_1)}{d\phi_1^2} - [l(l+1)\wp_1(\phi_1) - \frac{2E^*}{\hbar^2}] \Lambda_1(\phi_1) = 0, \quad (5.7)$$

y

$$\frac{d^2 \Lambda_2(\phi_2)}{d\phi_2^2} + [l(l+1)\wp_2(\phi_2) - \frac{2E^*}{\hbar^2}] \Lambda_2(\phi_2) = 0. \quad (5.8)$$

Resulta además conveniente definir las cantidades

$$h_1 = -\frac{2E^*}{\hbar^2}, \quad (5.9)$$

$$h_2 = -h_1, \quad (5.10)$$

y las funciones

$$\mathcal{P}_1(\phi_1) = \wp_1(\phi_1), \quad (5.11)$$

$$\mathcal{P}_2(\phi_2) = -\wp_2(\phi_2), \quad (5.12)$$

las cuales nos permiten escribir las ecuaciones (5.7) y (5.8) en la misma forma y resumirlas en una sola expresión, esto es

$$\frac{d^2\Lambda_i(\phi_i)}{d\phi_i^2} = [l(l+1)\mathcal{P}_i(\phi_i) + h_i]\Lambda_i(\phi_i); \quad i = 1, 2. \quad (5.13)$$

Cada una de las ecuaciones que aquí aparecen son de la forma

$$\frac{d^2\Lambda}{du^2} = [l(l+1)\mathcal{P}(u) + B]\Lambda, \quad (5.14)$$

la cual es conocida en la literatura [9] como ecuación de Lamé en la forma de Jacobi. Las soluciones Λ de este tipo de ecuaciones diferenciales, son conocidas como funciones de Lamé, y han sido ampliamente estudiadas por distintos autores desde que Lamé las descubrió en 1837. Estas funciones dependen del valor de la constante B , la cual es por supuesto arbitraria, y existe en consecuencia un número infinito de funciones de Lamé para cada ecuación. Esto también significa que existe un número infinito de funciones de onda de la forma (5.3); sin embargo, es posible demostrar [10] que la constante B se puede elegir de tal forma, que para valores enteros de l las funciones de onda (5.3) sean acotadas, continuas y univaluadas, además de que esta elección se puede hacer de $(2l+1)$ formas diferentes.

Este hecho es verdaderamente importante para nuestros propósitos, ya que además de garantizar que las funciones de onda cumplan con los requisitos mínimos para representar estados reales del sistema, también se está garantizando la existencia de $(2l+1)$ funciones de onda para cada valor entero de l , tal como lo predice la teoría estándar del momento angular.

También es posible demostrar que las funciones de Lamé son polinomios cuyas raíces, denotadas por θ_j , son todas reales, distintas, y acotadas. Estos polinomios se clasifican en cuatro especies distintas, lo que a su vez implica que existan cuatro especies distintas de las funciones de onda, también conocidas como armónicos esferoconales.

Las raíces θ_j , permiten resumir las cuatro especies de armónicos en una sola expresión en términos de coordenadas cartesianas, esto es

$$\left\{ \begin{array}{ccc} x & yz & \\ 1 & y & zx \quad xyz \\ & z & xy \end{array} \right\} \prod_{j=1}^m \left(\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j} \right), \quad (5.15)$$

donde m es el número de factores en el producto que ahí aparece, y toma los valores $\frac{1}{2}l$, $\frac{1}{2}(l-1)$, $\frac{1}{2}(l-2)$, y $\frac{1}{2}(l-3)$, para los armónicos de primera, segunda, tercera, y cuarta especie respectivamente. Los parámetros a , b , y c corresponden a los semiejes del elipsoide

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1, \quad (5.16)$$

conocido como elipsoide fundamental, el cual resulta necesario para construir la expresión (5.15)

Aunque de momento podría sorprender el uso repentino de las coordenadas cartesianas, más adelante veremos que esta forma de expresar a los armónicos es realmente conveniente; por el momento es necesario aclarar que se trata de un resultado general que deberá ser ajustado a los parámetros de nuestro sistema.

Comencemos por especificar cada una de las cuatro especies de armónicos en la expresión (5.15).

Los productos de la forma

$$\prod_{j=1}^m \left(\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j} \right), \quad (5.17)$$

son los armónicos de primera especie, mientras que los productos

$$x \prod_{j=1}^m \left(\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j} \right), \quad (5.18)$$

$$y \prod_{j=1}^m \left(\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j} \right), \quad (5.19)$$

$$z \prod_{j=1}^m \left(\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j} \right), \quad (5.20)$$

son los armónicos de segunda especie. De manera análoga los productos de la forma

$$yz \prod_{j=1}^m \left(\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j} \right), \quad (5.21)$$

$$zx \prod_{j=1}^m \left(\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j} \right), \quad (5.22)$$

$$xy \prod_{j=1}^m \left(\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j} \right), \quad (5.23)$$

son los armónicos de tercera especie, y finalmente, los productos de la forma

$$xyz \prod_{j=1}^m \left(\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j} \right), \quad (5.24)$$

son los armónicos de cuarta especie.

Es importante comentar que cuando l es un número par, existen $\frac{1}{2}l + 1$ armónicos de primera especie y $\frac{3}{2}l$ armónicos de tercera especie; cuando l es impar hay $\frac{3}{2}(l+1)$ armónicos de segunda especie y $\frac{1}{2}(l-1)$ armónicos de cuarta especie, y en ambos casos se tiene un total de $(2l + 1)$ armónicos, además en cualquier caso, los $(2l + 1)$ armónicos forman un conjunto fundamental que nos permite construir cualquier otro armónico de grado l como combinación lineal de estos.

Obsérvese ahora que la expresión

$$\frac{x^2}{a^2 + \theta_j} + \frac{y^2}{b^2 + \theta_j} + \frac{z^2}{c^2 + \theta_j}, \quad (5.25)$$

que aparece en todas las especies de armónicos, se puede escribir como el producto matricial

$$(x \ y \ z) \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2 + \theta_j} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2 + \theta_j} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2 + \theta_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

el cual después de usar la transformación (1.25) con $r = 1$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(\phi_1, \kappa_1) \operatorname{sn}(\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{cn}(\phi_1, \kappa_1) \operatorname{cn}(\phi_2, \kappa_2) \\ \operatorname{sn}(\phi_1, \kappa_1) \operatorname{dn}(\phi_2, \kappa_2) \end{pmatrix} = \mathbf{u}, \quad (5.27)$$

y definir la matriz

$$\mathbf{A}(\theta_j) = \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2 + \theta_j} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2 + \theta_j} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2 + \theta_j} \end{pmatrix}, \quad (5.28)$$

se puede expresar en la forma

$$\mathbf{u}^T \mathbf{A}(\theta_j) \mathbf{u}. \quad (5.29)$$

En realidad lo único que hace falta para construir los armónicos esferoconales de nuestro sistema, es conocer la forma explícita de la matriz (5.28) en términos de parámetros conocidos, es decir, hace falta definir quienes van ser los parámetros a , b , y c .

Aunque el cálculo de esta matriz no es nada sencillo, el resultado que se obtiene es bastante simple, pues la matriz que se requiere en nuestro caso, está dada por la expresión

$$\mathbf{A}(\alpha_j) = \begin{pmatrix} \frac{1}{e_1 - \alpha_j} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{e_2 - \alpha_j} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{e_3 - \alpha_j} \end{pmatrix}, \quad (5.30)$$

donde hemos cambiado al símbolo α_j para denotar las raíces de las funciones de Lamé.

Con este resultado el producto (5.29) adquiere la forma

$$\mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha_j) \mathbf{u} = \frac{[\mathcal{P}_1(\phi_1) - \alpha_j][\mathcal{P}_2(\phi_2) - \alpha_j]}{(e_1 - \alpha_j)(e_2 - \alpha_j)(e_3 - \alpha_j)}, \quad (5.31)$$

el cual al ser empleado junto con la transformación (5.27) en la expresión (5.15), conduce finalmente a que las cuatro especies de armónicos esferoconales que resuelven nuestro problema, son de la forma

$$\Lambda_1 \Lambda_2 = \left\{ \begin{array}{cccc} & u_1 & u_2 u_3 & \\ 1 & u_2 & u_3 u_1 & u_1 u_2 u_3 \\ & u_3 & u_1 u_2 & \end{array} \right\} \prod_{j=1}^m \frac{[\mathcal{P}_1(\phi_1) - \alpha_j][\mathcal{P}_2(\phi_2) - \alpha_j]}{(e_1 - \alpha_j)(e_2 - \alpha_j)(e_3 - \alpha_j)}, \quad (5.32)$$

donde salvo un factor constante, las cuatro especies de armónicos esferoconales, son el producto de dos polinomios, uno en $\mathcal{P}_1(\phi_1)$, y el otro en $\mathcal{P}_2(\phi_2)$, ambos con las mismas raíces α_j .

Por cierto, el factor constante es el inverso del producto de tres valores del mismo polinomio calculado en los valores e_1 , e_2 y e_3 respectivamente.

5.2. Cálculo de los armónicos esferoconales de menor orden

Ahora que conocemos la forma general de los armónicos esferoconales que resuelven nuestro problema, el siguiente y último paso consiste en calcular de manera explícita los armónicos correspondientes a cada valor de l .

Como una preparación para el cálculo general de los armónicos esferoconales de cualquier orden, vamos a calcular sólomente los armónicos correspondientes a $l = 0$, $l = 1$, $l = 2$, y $l = 3$.

De acuerdo con la receta que se da en la sección anterior acerca de cómo calcular el número de armónicos de cada especie, tenemos que para $l = 0$ existe un sólo armónico de primera especie y grado cero, el cual consiste en la función constante

$$\Psi(0) = 1. \quad (5.33)$$

Esta función satisface de manera trivial la ecuación (5.1), y al sustituirla en la ecuación (5.2) se obtiene que el eigenvalor de energía reducida correspondiente a esta función de onda, tiene que valer cero

$$E^*(0) = 0, \quad (5.34)$$

lo cual significa que la molécula está en su nivel de energía más bajo.

Para el caso en el que $l = 1$, existen sólomente tres armónicos de segunda especie y grado cero, los cuales, de acuerdo con (5.32) están dados como

$$\Psi(1_{10}) = u_1, \quad (5.35)$$

$$\Psi(1_{11}) = u_2, \quad (5.36)$$

y

$$\Psi(1_{01}) = u_3, . \quad (5.37)$$

Obsérvese que efectivamente existen un total de $3 = 2l + 1$ armónicos, los cuales deben ser soluciones comunes de las ecuaciones (5.1) y (5.2), para verificarlo, se sustituyen en el lado izquierdo de estas ecuaciones y se obtiene que

$$-\frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] u_i = 2\hbar^2 u_i, \quad (5.38)$$

y

$$-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} \left[\wp_2 \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \wp_1 \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] u_i = \frac{\hbar^2}{2} e_i u_i. \quad (5.39)$$

Es claro que la ecuación (5.1) se satisface de manera automática, mientras que la ecuación (5.2) se satisface siempre y cuando el eigenvalor E^* tome los valores

$$E^*(1_{10}) = -\frac{\hbar^2}{2} e_1, \quad (5.40)$$

$$E^*(1_{11}) = -\frac{\hbar^2}{2} e_2, \quad (5.41)$$

$$E^*(1_{01}) = -\frac{\hbar^2}{2} e_3, \quad (5.42)$$

correspondientes a cada una de las funciones de onda (5.35), (5.36), y (5.37) respectivamente.

Recordemos ahora que cada uno de los parámetros e_1 , e_2 , y e_3 , dependen de un sólo parámetro σ , el cual es una medida del grado de asimetría de la molécula, esto significa que las eigenfunciones Ψ que se obtienen, así como sus correspondientes eigenvalores, dependen de la simetría de la molécula.

Si tomamos ahora $l = 2$, se encuentran dos armónicos de primera especie de grado uno y tres armónicos de tercera especie de grado cero.

De acuerdo con la ecuación (5.32), los armónicos de primera especie deberán ser de la forma

$$\mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u}, \quad (5.43)$$

y para encontrarlos explícitamente hay que sustituir primero esta expresión en el lado izquierdo de la ecuación (5.1), de donde se obtiene que

$$-\frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u} = 6\hbar^2 \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u} - 2\hbar^2 \text{Tr}(\mathbf{A}(\alpha)), \quad (5.44)$$

esto quiere decir que los armónicos (5.43) van a ser soluciones de la ecuación (5.1), siempre y cuando se cumpla la condición

$$\text{Tr}(\mathbf{A}(\alpha)) = 0. \quad (5.45)$$

De la matriz (5.30) se encuentra que

$$\text{Tr}(\mathbf{A}(\alpha)) = \frac{1}{e_1 - \alpha} + \frac{1}{e_2 - \alpha} + \frac{1}{e_3 - \alpha} = \frac{3\alpha^2 - \frac{3}{4}}{e_1 e_2 e_3 + \frac{3}{4}\alpha - \alpha^3}, \quad (5.46)$$

por lo tanto la condición (5.45) se cumple cuando α toma los valores

$$\alpha_+ = \frac{1}{2} \quad \text{y} \quad \alpha_- = -\frac{1}{2}. \quad (5.47)$$

Si ahora sustituimos los armónicos (5.43) en el lado izquierdo de la ecuación (5.2), se encuentra que

$$-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} \left[\wp_2 \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \wp_1 \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u} = -3\hbar^2 \alpha \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u}, \quad (5.48)$$

donde es claro que para $\alpha = -\frac{1}{2}$, la energía reducida E^* deberá tomar el valor

$$E^*(2_{20}) = \frac{3}{2} \hbar^2, \quad (5.49)$$

y para $\alpha = \frac{1}{2}$, el valor

$$E^*(2_{02}) = -\frac{3}{2}\hbar^2, \quad (5.50)$$

los cuales corresponden respectivamente a cada a cada una de las funciones de onda

$$\Psi(2_{20}) = \mathbf{u}^T \mathbf{A} \left(-\frac{1}{2}\right) \mathbf{u}, \quad (5.51)$$

y

$$\Psi(2_{02}) = \mathbf{u}^T \mathbf{A} \left(\frac{1}{2}\right) \mathbf{u}. \quad (5.52)$$

Regresando a la ecuación (5.32), se encuentra que para $l = 2$, los tres armónicos de tercera especie son de la forma

$$u_i u_j \quad \text{con } i \neq j, \quad (5.53)$$

los cuales al ser sustituidos en el miembro izquierdo de las ecuaciones (5.1) y (5.2), se obtienen las expresiones

$$-\frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] u_i u_j = 6\hbar^2 u_i u_j \quad (5.54)$$

y

$$-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} \left[\wp_2 \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \wp_1 \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] u_i u_j = -\frac{3}{2} (e_i + e_j) u_i u_j, \quad (5.55)$$

esto quiere decir que los eigenvalores de energía correspondientes a las funciones de onda

$$\Psi(2_{10}) = u_2 u_3, \quad (5.56)$$

$$\Psi(2_{11}) = u_3 u_1, \quad (5.57)$$

$$\Psi(2_{01}) = u_1 u_2, \quad (5.58)$$

están dados respectivamente por

$$E^*(2_{10}) = \frac{3}{2}\hbar^2 e_1, \quad (5.59)$$

$$E^*(2_{11}) = \frac{3}{2}\hbar^2 e_2, \quad (5.60)$$

$$E^*(2_{01}) = \frac{3}{2}\hbar^2 e_3. \quad (5.61)$$

Nuevamente el número de funciones de onda que se obtienen para $l = 2$, es el que se esperaba, es decir $5 = (2l + 1)$.

Si consideramos finalmente $l = 3$ tendremos seis armónicos de segunda especie de grado uno y un armónico de cuarta especie de grado cero.

De acuerdo con la ecuación (5.32), los seis armónicos de segunda especie son de la forma

$$u_i \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u}; \quad i = 1, 2, 3, \quad (5.62)$$

de los cuales deberán existir dos para cada valor de i .

Al sustituir (5.62) en el lado izquierdo de la ecuación (5.1), se encuentra que

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] u_i \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u} &= 12\hbar^2 u_i \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u} \\ &+ 2u_i (2A_{ii}(\alpha) + \mathbf{E} : \mathbf{A}(\alpha)), \end{aligned} \quad (5.63)$$

donde los dos puntos indican una doble contracción, que es realidad otra forma de expresar la traza de la matriz $\mathbf{A}(\alpha)$.

Esta ecuación indica que la condición para que los armónicos (5.62) sean solución de la ecuación (5.1), es que

$$2A_{ii}(\alpha) + \mathbf{E} : \mathbf{A}(\alpha) = 0, \quad (5.64)$$

o bien que

$$\frac{3}{e_i - \alpha} + \frac{1}{e_j - \alpha} + \frac{1}{e_k - \alpha} = \frac{5\alpha^2 - \frac{3}{4} - 2\alpha(e_j + e_k) + 2e_j e_k}{(e_1 - \alpha)(e_2 - \alpha)(e_3 - \alpha)} = 0, \quad (5.65)$$

para cada valor de i .

Si usamos ahora la propiedad (2.29), tendremos que

$$e_j + e_k = -e_i, \quad (5.66)$$

con lo que la condición (5.64) se escribe finalmente en la forma

$$5\alpha^2 + 2\alpha e_i + 2e_i^2 - \frac{9}{4} = 0. \quad (5.67)$$

Al resolver esta ecuación se obtienen los seis valores de α

$$\alpha = \frac{-2e_i \pm \sqrt{45 - 36e_i^2}}{10}, \quad (5.68)$$

dos para cada valor de i .

Con estos resultados, podemos sustituir las expresiones (5.62) en la ecuación (5.2), y obtener que

$$-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} [\wp_2 \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \wp_1 \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2}] u_i \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u} = -5\hbar^2 \left(\frac{e_i}{2} + \alpha \right) u_i \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha) \mathbf{u}, \quad (5.69)$$

donde se han suprimido los términos que se anulan por la condición de armonicidad (5.64).

De los resultados anteriores tenemos que cuando $i = 1$ se encuentran los dos valores de α

$$\alpha_{1\pm} = \frac{1}{5} (-e_1 \pm 3\sqrt{\frac{5}{4} - e_1^2}), \quad (5.70)$$

los cuales al ser usados en la ecuación (5.69), nos permiten encontrar los dos eigenvalores de energía reducida

$$E^*(3_{1\pm}) = -5\hbar^2 \left(\frac{e_1}{2} + \alpha_{1\pm} \right), \quad (5.71)$$

correspondientes a las funciones de onda

$$\Psi(3_{21}) = u_1 \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha_{1+}) \mathbf{u}, \quad (5.72)$$

y

$$\Psi(3_{12}) = u_1 \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha_{1-}) \mathbf{u}. \quad (5.73)$$

De manera análoga cuando $i = 2$, se encuentran los valores de α

$$\alpha_{2\pm} = \frac{1}{5} (-e_2 \pm 3\sqrt{\frac{5}{4} - e_2^2}), \quad (5.74)$$

los cuales permiten encontrar los dos eigenvalores de energía reducida

$$E^*(3_{2\pm}) = -5\hbar^2\left(\frac{e_2}{2} + \alpha_{2\pm}\right) \quad (5.75)$$

correspondientes a las funciones de onda

$$\Psi(3_{31}) = u_2 \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha_{2+}) \mathbf{u}, \quad (5.76)$$

y

$$\Psi(3_{13}) = u_2 \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha_{2-}) \mathbf{u}. \quad (5.77)$$

Por último, cuando $i = 3$ se obtienen los valores de α

$$\alpha_{3\pm} = \frac{1}{5}(-e_3 \pm 3\sqrt{\frac{5}{4} - e_3^2}), \quad (5.78)$$

dando lugar a los dos eigenvalores de energía reducida

$$E^*(3_{3\pm}) = -5\hbar^2\left(\frac{e_3}{2} + \alpha_{3\pm}\right) \quad (5.79)$$

correspondientes a las funciones de onda

$$\Psi(3_{30}) = u_3 \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha_{3+}) \mathbf{u}, \quad (5.80)$$

y

$$\Psi(3_{03}) = u_3 \mathbf{u}^T \mathbf{A}(\alpha_{3-}) \mathbf{u}. \quad (5.81)$$

Nos falta todavía calcular el armónico de cuarta especie de orden cero, el cual está dado por la expresión

$$u_1 u_2 u_3. \quad (5.82)$$

Al sustituir este resultado en las ecuaciones (5.1) y (5.2) se obtiene que

$$-\frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] u_1 u_2 u_3 = 12\hbar^2 u_1 u_2 u_3 \quad (5.83)$$

$$-\frac{\hbar^2}{\wp_2 - \wp_1} \left[\wp_2 \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \wp_1 \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] u_1 u_2 u_3 = 0, \quad (5.84)$$

lo cual quiere decir que el eigenvalor de energía correspondiente a este armónico o función de onda

$$\Psi(3_{22}) = u_1 u_2 u_3, \quad (5.85)$$

es igual a cero, es decir

$$E^*(3_{22}) = 0. \quad (5.86)$$

De esta forma podríamos seguir calculando las funciones de onda y sus respectivos eigenvalores de energía reducida E^* para $l = 4, l = 5, l = 6, \dots$ etc., aunque es claro que entre mayor sea el valor de l , el álgebra y las condiciones de armonicidad se complican. Sin embargo, los resultados ya obtenidos podrían servir para buscar otras alternativas; por ejemplo, la construcción de un modelo para calcular niveles de energía, a partir del estudio cualitativo de los niveles de energía ya conocidos. Aunque esta idea es un poco aventurada parece ser prometedora, de acuerdo a lo que se muestra en la siguiente sección.

5.3. Descripción cualitativa de los niveles de energía para $l = 1, 2, 3$.

En los resultados de la sección anterior se muestra cómo los niveles de energía de rotación (para $l = 1, 2, 3$) dependen del parámetro de asimetría σ , el cual toma valores en el intervalo $0 \leq \sigma \leq \pi/3$. Esta dependencia nos permite estudiar el efecto que causa sobre los niveles de energía, un cambio en la simetría de la molécula, además nos permite saber cómo son estos niveles en los casos extremos, cuando la molécula tiene simetría cilíndrica (ya sea prolata u oblata) o cuando es completamente asimétrica.

Para el caso $l = 1$, la figura (5.1) muestra que en $\sigma = 0$ los eigenvalores de energía reducida $E^*(1_{01})$ y $E^*(1_{11})$ son iguales, mientras que el eigenvalor $E^*(1_{10})$ es distinto a los otros dos, esto es, existe una degeneración en los niveles de energía para $\sigma = 0$; la cual se rompe en cuanto cambiamos este valor. Ésto es consistente con el hecho de que para $\sigma = 0$ la molécula tiene simetría cilíndrica prolata, en la que dos de sus momentos principales de inercia son iguales, siendo el momento de inercia distinto, el de menor valor en este caso. De acuerdo con la forma (1.46) en la que se ordenaron los momentos principales de inercia, se tiene que para $\sigma = 0$, $I_1 < I_2 = I_3$, lo

cual concuerda con la forma en la que aparecen los niveles de energía reducida para este valor de σ . Algo similar ocurre cuando $\sigma = \pi/3$, ya que también en este caso dos de los momentos principales de inercia son iguales, solo que ahora el momento de inercia distinto es el de mayor valor y la molécula tiene ahora simetría cilíndrica oblatas. De acuerdo con la expresión (1.46), el momento de inercia distinto es I_3 , por lo que la degeneración ocurre entre los niveles $E^*(1_{11})$ y $E^*(1_{10})$, tal como se muestra en la figura (5.1). Finalmente para $\sigma = \pi/6$, que es el caso de la molécula más asimétrica, los tres valores de energía reducida son distintos, lo cual concuerda con el hecho de que en este caso los tres momentos de inercia son distintos.

Es interesante notar que conforme el valor de σ crece, los niveles de energía $E^*(1_{01})$ y $E^*(1_{11})$ se separan, mientras que los niveles $E^*(1_{11})$ y $E^*(1_{10})$ se acercan hasta unirse justo en $\sigma = \pi/3$. Nótese también que la gráfica es simétrica respecto al punto $(\pi/6, 0)$.

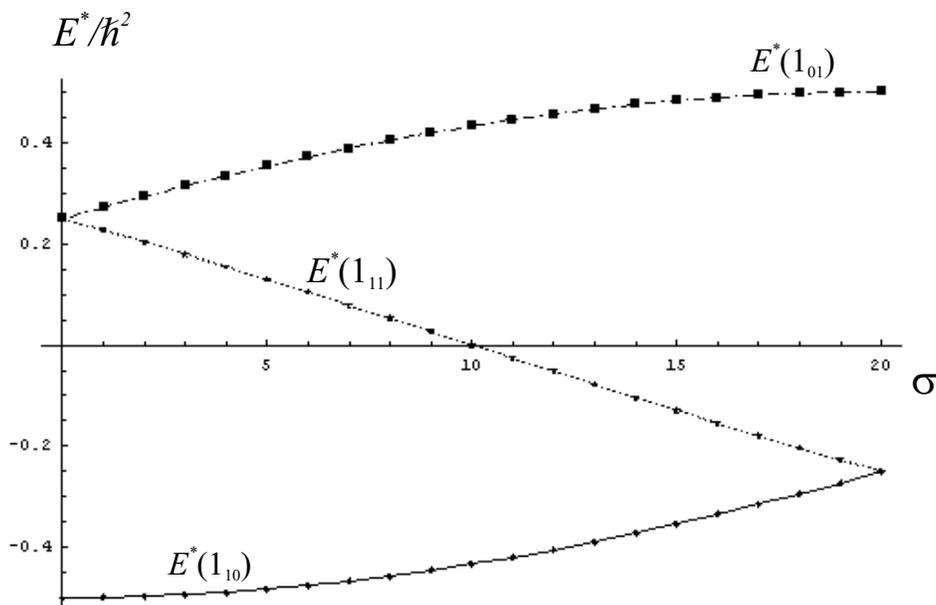


Figura 5.1: Gráfica de los niveles de energía reducida para $l = 1$, en función del parámetro de asimetría σ .

Por otra parte cuando $l = 2$, la figura (5.2) muestra que para $\sigma = 0$ y $\sigma = \pi/3$ existen dos degeneraciones, una de las cuales se rompe más rápido

que la otra. Para $\sigma = 0$, la degeneración entre los niveles $E^*(2_{20})$ y $E^*(2_{10})$ se conserva aproximadamente hasta $\sigma = \pi/60$, desde el origen, mientras que la degeneración entre los niveles $E^*(2_{11})$ y $E^*(2_{01})$ se rompe en cuanto $\sigma \neq 0$. De manera análoga para $\sigma = \pi/3$ la degeneración entre los niveles $E^*(2_{02})$ y $E^*(2_{01})$ se conserva aproximadamente hasta $\sigma = 19\pi/60$, hacia el origen, mientras que la degeneración entre los niveles $E^*(2_{11})$ y $E^*(2_{10})$ se rompe en cuanto $\sigma \neq \pi/3$. Al igual que para $l = 1$, en el caso de mayor asimetría $\sigma = \pi/60$, los niveles de energía son no degenerados, y la la gráfica sigue siendo simétrica respecto al punto $(\pi/6, 0)$.

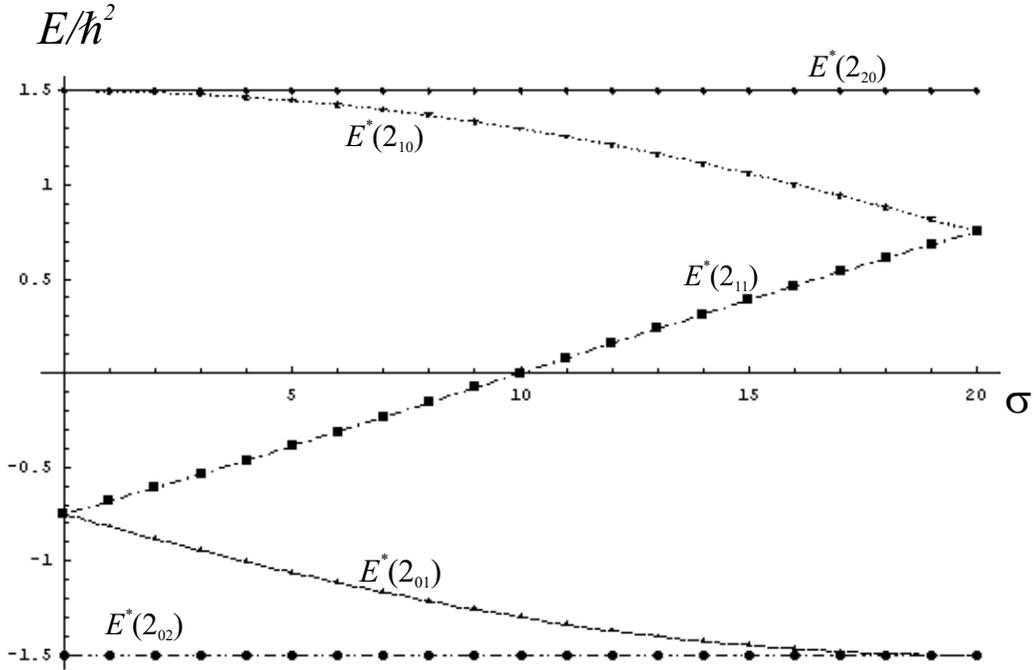


Figura 5.2: Gráfica de los niveles de energía reducida para $l = 2$, en función del parámetro de asimetría σ .

Finalmente para el caso $l = 3$, la figura (5.3) muestra que para $\sigma = 0$ y $\sigma = \pi/3$ existen tres degeneraciones de los niveles de energía reducida, una de las cuales se rompe en cuanto cambiamos estos valores, mientras que las otras dos persisten hasta un cierto valor de σ . Para $\sigma = 0$ la degeneración de los niveles $E^*(3_{3-})$ y $E^*(3_{2-})$ se conserva aproximadamente hasta $\sigma = 7\pi/60$, desde el origen; y la degeneración entre los niveles $E^*(3_{1-})$ y $E^*(3_{22})$ se

conserva aproximadamente hasta $\sigma = \pi/60$, desde el origen; mientras que la degeneración entre los niveles $E^*(3_{3+})$ y $E^*(3_{2+})$ se rompe en cuanto $\sigma \neq 0$. Por otra parte, para $\sigma = \pi/3$, la degeneración entre los niveles $E^*(3_{1+})$ y $E^*(3_{2+})$ se rompe aproximadamente hasta $\sigma = 13\pi/60$, hacia el origen; y la degeneración entre los niveles $E^*(3_{3+})$ y $E^*(3_{22})$ se rompe aproximadamente en $\sigma = 19\pi/60$, hacia el origen; por último la degeneración entre los niveles $E^*(3_{1-})$ y $E^*(3_{2-})$ se rompe en cuanto $\sigma \neq \pi/3$. Nótese que la gráfica sigue siendo simétrica respecto al punto $(\pi/6, 0)$.

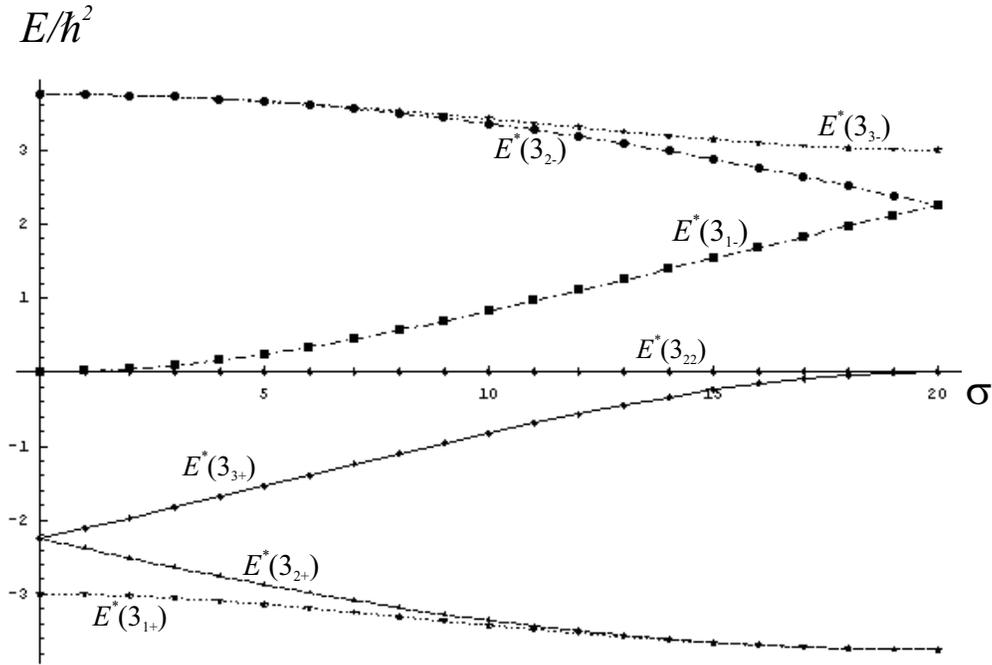


Figura 5.3: Gráfica de los niveles de energía reducida para $l = 3$, en función del parámetro de asimetría σ .

Hasta el momento podemos concluir que para $l = n$ existen n degeneraciones en $\sigma = 0$ y $\sigma = \pi/3$, una de las cuales se rompe automáticamente al cambiar estos valores, y el resto se preservan en forma gradual para distintos valores de σ . Además de que todas las gráficas son simétricas respecto al punto $(\pi/6, 0)$. Sin embargo, aunque el comportamiento de las gráficas antes vistas parece tener una tendencia clara para valores de l mayores que tres, aún es muy pronto para saber si esto va a ocurrir realmente; primero

es necesario calcular de manera exacta los eigenvalores de energía para algunos otros valores de l (digamos $l = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$), y si al graficarlos la tendencia anterior persiste, estaremos en posibilidad de dar el siguiente paso; tratar de construir un modelo para calcular niveles de energía, a partir del análisis cualitativo de las gráficas obtenidas. Claro que esto es solo una posibilidad, que en caso de fallar tendríamos que recurrir a otras como el análisis numérico.

Conclusiones

En relación a nuestro objetivo principal, que fué el de construir un modelo matemático para caracterizar los niveles de energía de la molécula rígida, podemos decir que se logró establecer un método con el que se calculan de forma explícita los eigenvalores de energía reducida E^* para $l = 0, 1, 2, 3$, los cuales al ser graficados como función del parámetro de asimetría σ , muestran que basta con calcular estos niveles en el intervalo $0 \leq \sigma \leq \pi/6$ para conocerlos también en el intervalo $\pi/6 \leq \sigma \leq \pi/3$; esto se logra mediante las transformaciones $\sigma \rightarrow (\pi/3 - \sigma)$ y $E^* \rightarrow (-E^*)$. En el caso particular de la molécula simétrica se observa claramente cómo al conocer los niveles de energía para el caso de simetría prolata, también podemos conocerlos en el caso de simetría oblata. Estos resultados concuerdan con los publicados por otros autores como James E. Wollrab [17] en 1967 y H.W. Kroto [18] en 1992.

En lo que respecta a los resultados analíticos, muchos de los que aparecen en este trabajo concuerdan con los de Kramers e Ittmann [1] de 1929, además de que el parámetro σ utilizado para medir el grado de asimetría de la molécula, está directamente relacionado con el parámetro de asimetría κ introducido por Ray [4] en 1932, esto es,

$$\cos \sigma = \frac{3 - \kappa}{2\sqrt{3 + \kappa^2}}.$$

Por otra parte, la energía de Ray $E(\kappa)$ se expresa en términos de la energía reducida E^* , en la forma

$$E(\kappa) = \frac{\kappa}{3}\hbar^2 l(l+1) + \sqrt{\frac{4}{3} + \frac{4}{9}\kappa^2 E^*}.$$

Por último, es importante mencionar que la simplificación $m = 0$ que se hace en la **sección 3.2**, ofrece grandes ventajas a la hora de resolver

el problema de la molécula simétrica, ya que a diferencia de la solución en términos de polinomios de Jacobi que manejan otros autores, en nuestro caso la solución queda sólo en términos de polinomios de Legendre, los cuales son por mucho más sencillos que los anteriores.

Perspectivas

Como trabajo a futuro sería interesante tratar de calcular de forma exacta, los eigenvalores de energía reducida E^* para valores de l mayores que tres, y verificar si sus gráficas como función del parámetro de asimetría σ continúan con el comportamiento mostrado en los casos $l = 0, 1, 2, 3$. De este modo tendríamos más seguridad a la hora de sacar conclusiones acerca del comportamiento de los niveles de energía.

Por otra parte, es posible realizar estudios acerca de reglas de selección y reglas de suma para el espectro de rotación molecular. Algunas de estas reglas ya han sido calculadas, y podrían ser generalizadas para obtener nuevas relaciones.

También existe la posibilidad de hacer un estudio numérico para calcular las funciones de onda y los eigenvalores de energía rotacional como una función del momento angular y el grado de asimetría de la molécula.

El reto más ambicioso (quizá imposible) es el de encontrar una fórmula mediante la cual se obtengan los niveles de energía rotacional para cualquier valor de l .

En lo que se refiere a las aplicaciones, es importante mencionar que la mayor parte de las moléculas detectadas en entornos astronómicos tales como estrellas, medio interestelar, envolturas circunestelares, regiones de formación, galaxias, etc., han sido descubiertas a través de sus transiciones rotacionales por medio de observaciones con radiotelescopios terrestres. Actualmente se cree que la espectroscopía rotacional también puede ser importante para la detección de sustancias orgánicas del medio interestelar.

Otra aplicación no menos importante aparece en los métodos espectroscópicos para medir y controlar la concentración de gases contaminantes en la atmósfera.

Apéndice A

Integrales elípticas

A.1. Integración de una función racional

Consideremos la función racional

$$R_1(z, s) = \frac{A_0 + A_1s + A_2s^2 + \cdots + A_\kappa s^\kappa}{B_0 + B_1s + B_2s^2 + \cdots + B_\kappa s^\kappa}, \quad (\text{A.1})$$

donde las A 's y las B 's son funciones enteras de z , y s^2 es de la forma

$$s^2 = A(z - a_1)(z - a_2)(z - a_3)(z - a_4). \quad (\text{A.2})$$

De esta última relación se observa que las potencias pares de s deberán ser funciones enteras de z , mientras que las potencias impares de s serán igual a una función entera de z multiplicada por s . Debido a esto la función (A.1) adquiere la forma

$$R_1(z, s) = \frac{A'_0 + A'_1s}{B'_0 + B'_1s} = \frac{(A'_0 + A'_1s)(B'_0 - B'_1s)}{B'^2_0 - B'^2_1s^2} = \frac{C + Ds}{E}, \quad (\text{A.3})$$

donde C , D , y E , son funciones enteras de z , así como A'_0 , A'_1 , B'_0 , y B'_1 .

Podemos ahora definir las funciones

$$\frac{C}{E} = p(z) \quad \text{y} \quad \frac{D}{E} = q(z),$$

para expresar (A.3) en la forma

$$R_1(z, s) = p(z) + \frac{Q(z)}{s} \quad (\text{A.4})$$

donde $Q(z)$ se define como $q(z)s^2$, y tanto $q(z)$, $p(z)$, y $Q(z)$, son funciones racionales de z .

Consideremos ahora la integral

$$\int R_1(z, s) dz = \int p(z) dz + \int \frac{Q(z)}{s} dz. \quad (\text{A.5})$$

La primera integral de la derecha se puede reducir a integrales elementales, por lo que toda nuestra atención estará concentrada en la integral

$$\int \frac{Q(z)}{s} dz, \quad (\text{A.6})$$

la cual se puede escribir en la forma

$$\int \frac{f(z)}{\sqrt{R(z)}} dz, \quad (\text{A.7})$$

donde $f(z)$ denota una función racional de z , y $s = \sqrt{R(z)}$.

Podemos suponer que en general

$$R(z) = C_0 z^n + C_1 z^{n-1} + \dots + C_n \quad (\text{A.8})$$

donde las C 's son coeficientes constantes. De este modo cuando $n = 2$ la integral (A.7) estará relacionada con funciones circulares; mientras que cuando $n = 3$ o 4 la integral (A.7) se define como una integral elíptica, y finalmente cuando $n > 4$, la integral (A.7) se define como una integral hiperelíptica.

Debido a que la función $f(z)$ es una función racional, esta se puede escribir en la forma

$$f(z) = \frac{g_1(z)}{g(z)} = G(z) + \frac{G_1(z)}{g(z)}, \quad (\text{A.9})$$

donde las g 's y G 's denotan funciones enteras de z , siendo $g(z)$ de la forma

$$g(z) = B(z - b_1)^{\lambda_1} (z - b_2)^{\lambda_2} (z - b_3)^{\lambda_3} \dots \quad (\text{A.10})$$

Esta última expresión nos permite desarrollar la función $f(z)$ en fracciones parciales, obteniendo con ello que

$$f(z) = G(z) + \sum_i \frac{A_{\lambda_i}}{(z - b_i)^{\lambda_i}}, \quad (A_{\lambda_i} \text{ constante}), \quad (\text{A.11})$$

por lo que la integral (A.7) se escribe ahora en la forma

$$\int \frac{f(z)dz}{\sqrt{R(z)}} = \int \frac{G(z)}{\sqrt{R(z)}}dz + \sum_i A_{\lambda_i} \int \frac{dz}{(z - b_i)^{\lambda_i} \sqrt{R(z)}}. \quad (\text{A.12})$$

Debido a que $G(z)$ es una función entera de z , la primera integral de la derecha se puede descomponer en integrales de la forma

$$\int \frac{z^\kappa}{\sqrt{R(z)}}dz, \quad (\text{A.13})$$

razón por la cual tendremos que considerar sólomente dos tipos generales de integrales

$$I_\kappa = \int \frac{z^\kappa}{\sqrt{R(z)}}dz, \quad (\text{A.14})$$

y

$$H_\kappa = \int \frac{dz}{(z - b)^\kappa \sqrt{R(z)}}. \quad (\text{A.15})$$

Sin embargo, es posible demostrar [18] que basta considerar las integrales (A.14)

$$I_\kappa = \int \frac{z^\kappa}{\sqrt{R(z)}}dz,$$

junto con la integral

$$H_1 = \int \frac{dz}{(z - b)\sqrt{R(z)}}, \quad (\text{A.16})$$

donde $\kappa = 0, 1, \dots, n - 2$, siendo n es el grado de la función entera $R(z)$ y b una raíz de la ecuación $g(z) = 0$. Es importante mencionar que existen tantas integrales del tipo H_1 como raíces de la ecuación $g(z) = 0$. La cantidad b se conoce como el parámetro de la integral H_1 .

De acuerdo con lo dicho anteriormente, para $n = 4$ tendremos las integrales elípticas I_0 , I_1 , I_2 , y H_1 ; para $n = 3$ tendremos las integrales I_0 , I_1 , y H_1 . En el primer caso la integral I_1 se reduce a integrles elementales, y las integrales I_0 , I_2 , y H_1 , reciben el nombre de integrales elípticas de primera, segunda y tercera especie respectivamente, esto es,

$$I_0 = \int \frac{dz}{\sqrt{R(z)}} \quad (\text{integral elíptica de primera especie}) \quad (\text{A.17})$$

$$I_2 = \int \frac{z^2 dz}{\sqrt{R(z)}} \quad (\text{integral elíptica de segunda especie}) \quad (\text{A.18})$$

$$H_1 = \int \frac{dz}{(z-b)\sqrt{R(z)}} \quad (\text{integral elíptica de tercera especie}) \quad (\text{A.19})$$

A.2. Formas normales de Legendre de las integrales elípticas

Cuando $n = 4$ la forma explícita de la expresión

$$\frac{dz}{\sqrt{R(z)}}$$

se escribe como

$$\frac{dz}{\sqrt{R(z)}} = \frac{dz}{\sqrt{A(z-a_1)(z-a_2)(z-a_3)(z-a_4)}}. \quad (\text{A.20})$$

Si ahora hacemos la transformación

$$z = \frac{at+b}{ct+d}, \quad (\text{A.21})$$

se encuentra que

$$\frac{dz}{\sqrt{R(z)}} = \frac{(ad-bc)dt}{\sqrt{A[(a-ca_1)t+b-da_1][(a-ca_2)t+b-da_2][(a-ca_3)t+b-da_3][(a-ca_4)t+b-da_4]}}. \quad (\text{A.22})$$

Podemos notar que la expresión dentro de la raíz sigue siendo esencialmente la misma, ya que aún se tiene una función entera de cuarto grado.

Legendre tuvo la idea de determinar las constantes a , b , c , y d , de tal manera que sólo las potencias pares de t permanezcan en el radicando. Con este propósito, al despreciar la constante A , el radicando en (A.22) se puede escribir como

$$[g_0t^2 + g_1t + g_2][h_0t^2 + h_1t + h_2], \quad (\text{A.23})$$

donde

$$g_0 = (a - ca_1)(a - ca_2), \quad (\text{A.24})$$

$$g_1 = (a - ca_1)(b - da_2) + (a - ca_2)(b - da_1), \quad (\text{A.25})$$

$$g_2 = (b - da_1)(b - da_2), \quad (\text{A.26})$$

y h_0 , h_1 , y h_2 se obtienen intercambiando a_1 con a_3 y a_2 con a_4 en las expresiones de las g 's.

Para que los coeficientes de t^3 y t desaparezcan, es necesario que

$$h_0g_1 + g_0h_1 = 0, \quad (\text{A.27})$$

y

$$g_1h_2 + h_1g_2 = 0. \quad (\text{A.28})$$

Estas dos ecuaciones se satisfacen siempre que

$$g_1 = 0 \quad \text{y} \quad h_1 = 0;$$

cuando se cumplen estas condiciones la expresión (A.23) se convierte en

$$[g_0t^2 + g_2][h_0t^2 + h_2], \quad (\text{A.29})$$

y la expresión (A.22) toma la forma

$$\frac{dz}{\sqrt{Rz}} = \frac{(ad - bc)dt}{\sqrt{A(g_0t^2 + g_2)(h_0t^2 + h_2)}}. \quad (\text{A.30})$$

Si además hacemos el cambio

$$\frac{g_0}{g_2} = -p^2, \quad \frac{h_0}{h_2} = -q^2,$$

se encuentra que

$$\frac{dz}{\sqrt{Rz}} = \frac{(ad - bc)dt}{\sqrt{Ag_2h_2(1 - p^2t^2)(1 - q^2t^2)}}. \quad (\text{A.31})$$

Haciendo finalmente el cambio de variable $t = \frac{y}{p}$, se encuentra que

$$\frac{dz}{\sqrt{R(z)}} = \frac{\frac{1}{p}(ad - bc)dy}{\sqrt{Ag_2h_2(1 - y^2)(1 - \frac{q^2}{p^2}y^2)}}, \quad (\text{A.32})$$

donde todavía podemos hacer una simplificación definiendo

$$\frac{q^2}{p^2} = k^2 \quad \text{y} \quad C = \frac{ad - bc}{p\sqrt{Ag_2h_2}},$$

para obtener

$$\frac{dz}{\sqrt{R(z)}} = \frac{Cdy}{\sqrt{(1 - y^2)(1 - k^2y^2)}}. \quad (\text{A.33})$$

La cantidad k es llamada el módulo. En investigaciones teóricas puede tomar cualquier valor real o imaginario; sin embargo, en aplicaciones a la geometría y a la física es necesario que este módulo sea siempre real y menor que la unidad.

Usando los resultados obtenidos anteriormente en la integral (A.6)

$$\int \frac{Q(z)dz}{\sqrt{R(z)}},$$

ésta se puede escribir como

$$\int \frac{f(y)dy}{\sqrt{(1 - y^2)(1 - k^2y^2)}}, \quad (\text{A.34})$$

donde $f(y)$ denota una función racional de y . Esta función se puede escribir en la forma

$$f(y) = \frac{\phi(y^2) + y\phi_1(y^2)}{\psi(y^2) + y\psi_1(y^2)}, \quad (\text{A.35})$$

donde ϕ , ϕ_1 , ψ , y ψ_1 denotan funciones enteras de y . Si multiplicamos el numerador y el denominador de esta última expresión por $\psi(y^2) - y\psi_1(y^2)$, se encuentra que $f(y)$ es de la forma

$$f(y) = f_0(y^2) + yf_1(y^2), \quad (\text{A.36})$$

donde f_0 y f_1 son funciones racionales de y .

Con estas modificaciones la integral (A.34) se escribe como

$$\int \frac{f(y)dy}{\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}} = \int \frac{f_0(y^2)dy}{\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}} + \int \frac{yf_1(y^2)dy}{\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}}. \quad (\text{A.37})$$

donde la segunda integral de la derecha se puede reducir a integrales elementales haciendo el cambio de variable $y^2 = \zeta$, mientras que la integral

$$\int \frac{f_0(y^2)dy}{\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}}, \quad (\text{A.38})$$

se construye como combinación de las integrales

$$\int \frac{dy}{\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}}, \quad (\text{A.39})$$

$$\int \frac{y^2 dy}{\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}}, \quad (\text{A.40})$$

$$\int \frac{dy}{(y^2 - b)\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}}. \quad (\text{A.41})$$

Estas integrales son conocidas como *integrales normales de Legendre* de primera, segunda y tercera especie respectivamente.

El nombre de integral elíptica es debido al hecho de que una integral semejante aparece al calcular la longitud de arco de una elipse. La ecuación de la elipse se escribe como

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1, \quad (\text{A.42})$$

y la longitud de arco está determinada por la ecuación

$$\mathcal{S} = \int_0^x \sqrt{1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2} dx = \int_0^x \sqrt{\frac{a^4 - (a^2 - b^2)x^2}{a^2(a^2 - x^2)}} dx. \quad (\text{A.43})$$

Introduciendo la excentricidad de la elipse, mediante la ecuación

$$\frac{b^2}{a^2} = 1 - \epsilon,$$

se encuentra que

$$\mathcal{S} = \int_0^x \sqrt{\frac{a^2 - \epsilon^2 x^2}{a^2 - x^2}} dx = \int_0^x \frac{a^2 - \epsilon^2 x^2}{\sqrt{(a^2 - x^2)(a^2 - \epsilon^2 x^2)}}. \quad (\text{A.44})$$

Esta integral también es considerada un tipo de integral normal elíptica de segunda especie, aunque en realidad está compuesta por las formas normales de primera y segunda especie antes definidas.

Haciendo $a = 1$ y cambiando x por y , podemos decir que una integral normal elíptica de segunda especie también es de la forma

$$\int \frac{\sqrt{1 - k^2 y^2} dy}{\sqrt{1 - y^2}}, \quad (\text{A.45})$$

donde hemos puesto el módulo k en lugar de la excentricidad ϵ

Si en las ecuaciones (A.39), (A.45), y (A.41) hacemos el cambio $y = \text{sen } \phi$, tendremos que las formas normales de las integrales elípticas de primera segunda y tercera especie se escriben respectivamente como

$$F(\phi, k) = \int \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \text{sen}^2 \phi}}, \quad (\text{A.46})$$

$$E(\phi, k) = \int \sqrt{1 - k^2 \text{sen}^2 \phi} d\phi \quad (\text{A.47})$$

$$\Pi(\phi, k) = \int \frac{d\phi}{(1 + n \text{sen}^2 \phi) \sqrt{1 - k^2 \text{sen}^2 \phi}} \quad (\text{A.48})$$

Resulta de gran utilidad definir las integrales elípticas completas de primera, segunda, y tercera especie, como

$$K(k) = F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \text{sen}^2 \phi}}, \quad (\text{A.49})$$

$$E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k^2 \text{sen}^2 \phi} d\phi, \quad (\text{A.50})$$

$$\Pi\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{(1 + n\text{sen}^2\phi)\sqrt{1 - k^2\text{sen}^2\phi}}. \quad (\text{A.51})$$

La importancia de las integrales elípticas radica en que aparecen en muchos problemas de física y las matemáticas, entre los que se encuentran el movimiento del péndulo simple, el cálculo de inductancias de solenoides, el cálculo de longitudes de secciones cónicas, el cálculo de ángulos sólidos de círculos vistos oblicuamente, entre otros.

Apéndice B

Funciones elípticas

Para comprender las funciones elípticas es necesario explicar en qué sentido estas funciones se relacionan con las integrales elípticas de las cuales se habló en el apéndice A. Consideremos con este objeto la integral

$$\int_0^y \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}}, \quad (\text{B.1})$$

que no es otra cosa que la función $(\text{sen}^{-1}y)$. Si no conociéramos la función inversa, que es el $(\text{sen } y)$, resultaría bastante complicado estudiar la integral (B.1), puesto que mientras el $(\text{sen } y)$ es una función simplemente periódica uniforme, el $(\text{sen}^{-1}y)$ es polídroma de infinitos valores.

Abel tuvo la brillante idea de invertir de manera análoga las integrales elípticas, cuyo estudio se dificultaba debido precisamente a su polidromía, y descubrió con Jacobi, que las funciones inversas son funciones doblemente periódicas, que es suficiente estudiar dentro de uno de sus paralelogramos de periodicidad para conocerlas en todo el plano complejo. Fueron estas las primeras funciones elípticas conocidas, extendiéndose después el nombre a todas las funciones doblemente periódicas.

Tenemos entonces que para estudiar las funciones elípticas, conviene comenzar estudiando las funciones trigonométricas, aunque desde un enfoque distinto al habitual.

Consideremos primero a la función $y = \text{sen } x$. Esta puede ser definida como la solución de cualquiera de las dos ecuaciones diferenciales:

$$y'' + y = 0 \quad y = 0, \quad y' = 1 \quad \text{en } x = 0, \quad (\text{B.2})$$

$$(y')^2 = 1 - y^2 \quad y = 0, \quad y' > 0 \quad \text{en } x = 0. \quad (\text{B.3})$$

Si suponemos que $(\text{sen } x)$ está definida por la ecuación (B.3), ¿qué podemos decir acerca de esta función? Es fácil ver que debe describir una curva como la que se muestra en la figura (B.1). Esto es, $y(x)$ oscila periódicamente entre ± 1 , con un periodo P , el cual está dado por la expresión

$$P = 2 \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1 - y^2}} = 4 \int_0^1 \frac{dy}{\sqrt{1 - y^2}}. \quad (\text{B.4})$$

De manera análoga podemos definir la función $(\text{cos } x)$, al cambiar las condiciones iniciales en la ecuación (B.3), y obtener con ello todas las propiedades conocidas de las funciones trigonométricas.

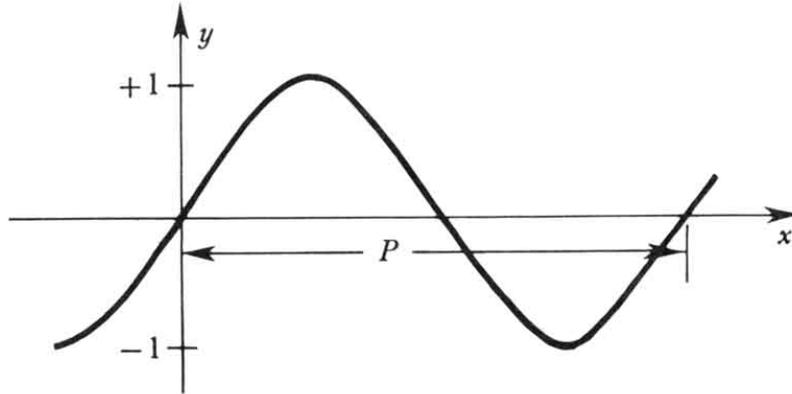


Figura B.1: Solución cualitativa de la ecuación (B.3)

Consideremos ahora la ecuación diferencial

$$(y')^2 = (1 - y^2)(1 - k^2 y^2) \quad y = 0, \quad y' > 0 \quad \text{en } x = 0, \quad (\text{B.5})$$

donde $0 < k < 1$. La solución que obedece esta ecuación diferencial, la definimos como $y = \text{sn } x$ y la llamamos función elíptica (sn) de Jacobi.

De la ecuación (B.5) se encuentra que

$$x = \int_0^y \frac{dy}{\sqrt{(1 - y^2)(1 - k^2 y^2)}}, \quad (\text{B.6})$$

de donde se observa que la función elíptica ($\text{sn } x$) es justamente la función inversa de la integral elíptica de primera especie en su forma normal de Legendre.

Siguiendo un razonamiento análogo al que se utilizó para encontrar las propiedades de la función ($\text{sen } x$), podemos ver que la función ($\text{sn } x$) es periódica con periodo

$$P = 4 \int_0^1 \frac{dy}{\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}} = 4K(k), \quad (\text{B.7})$$

siendo $K(k)$ la integral elíptica completa de primera especie [ver (A.49)]. Se tiene entonces, que la función $y = \text{sn } x$ deberá describir una curva como la que se muestra en la figura (B.2).

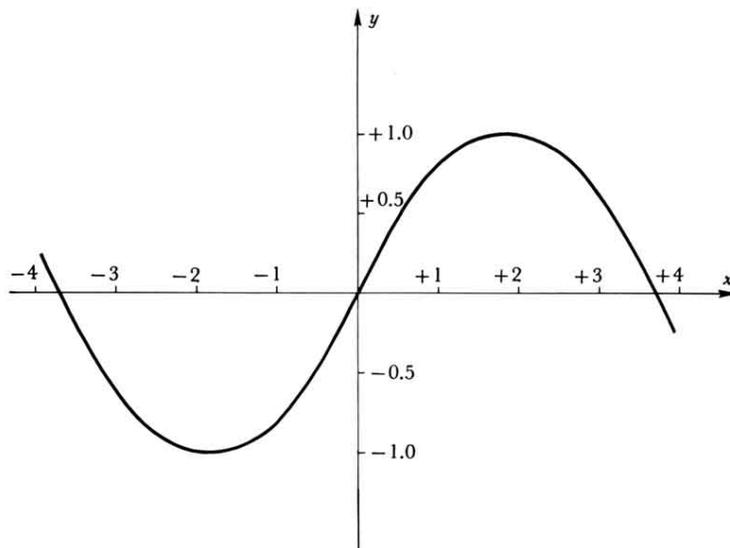


Figura B.2: Gráfica de $y = \text{sn } x$, con $k^2 = 0,5$ ($K = 1,854 \dots$)

Como se mencionó anteriormente, la característica interesante de ($\text{sn } x$), es que tiene un segundo periodo independiente P' , esto es, se trata de una función doblemente periódica. Para descubrir este segundo periodo, debemos trabajar en el plano complejo y considerar el mapeo conforme de y en x .

La integral (B.6) indica claramente que x varía como función del límite superior de integración y del parámetro k . Nos interesa analizar cómo varía

x cuando y recorre el eje real del plano complejo.

El integrando en (B.6), es el producto de los cuatro factores

$$\frac{1}{\sqrt{1+y}}, \quad \frac{1}{\sqrt{1-y}}, \quad \frac{1}{\sqrt{1+ky}}, \quad y \quad \frac{1}{\sqrt{1-ky}}, \quad (\text{B.8})$$

los cuales poseen polos respectivamente en los puntos $y = -1$, $y = 1$, $y = -1/k$, y $y = 1/k$. Para evitar tales puntos singulares, el camino de integración que recorre el eje real, se hará girar por encima de ellos, siguiendo semicircunferencias infinitamente pequeñas. Ahora bien, mientras que y va de cero 0 a 1 sobre el eje real, todos los factores (B.8) se mantienen reales, y lo mismo resulta entonces para x , que irá sobre el eje real del valor cero al valor

$$K(k) = \int_0^1 \frac{dy}{\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}}. \quad (\text{B.9})$$

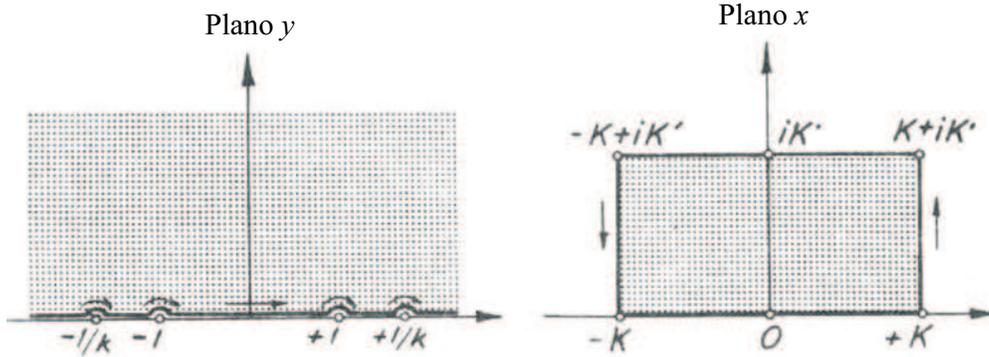


Figura B.3: Mapeo conforme de y en x

Cuando y está entre 1 y $1/k$, el factor $1/\sqrt{1-y}$ se vuelve imaginario, y se tiene que

$$\frac{1}{\sqrt{1-y}} = -\frac{i}{\sqrt{y-1}}, \quad (\text{B.10})$$

siendo $\sqrt{y-1}$ real. Se puede ahora escribir, tomando en cuenta (B.9), que

$$x = K + i \int_1^y \frac{dy}{\sqrt{(y^2-1)(1-k^2y^2)}}. \quad (\text{B.11})$$

La última integral es real y varía del valor cero, para $y = 1$, al valor

$$K'(k) = \int_1^{1/k} \frac{dy}{\sqrt{(y^2 - 1)(1 - k^2 y^2)}}, \quad (\text{B.12})$$

de modo que la variable x , que para $y = 1$ se halla en el punto K del eje real, para $y > 1$ se desvía normalmente a dicho eje, llegando para $y = 1/k$ al punto $x = K + iK'$. Si y sigue creciendo ya serán dos los factores (B.8) que se vuelven imaginarios: $(1/\sqrt{1-y})$ y $(1/\sqrt{1-ky})$. Su producto es entonces real pero negativo, de modo que, tomando en cuenta las relaciones (B.9) y (B.12), se encuentra que

$$x = K + iK' - \int_{1/k}^y \frac{dy}{\sqrt{(y^2 - 1)(k^2 y^2 - 1)}}, \quad (\text{B.13})$$

hallándose x sobre la paralela al eje real, a una distancia K' . Para $y = \infty$, efectuada la sustitución $y = 1/(ks)$, la última integral se convierte en

$$\int_{1/k}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{(y^2 - 1)(k^2 y^2 - 1)}} = - \int_1^0 \frac{ds}{\sqrt{(1 - s^2)(1 - k^2 s^2)}} = K,$$

obteniéndose que $x = iK'$.

Concluyendo, al ir y de 0 a ∞ , x recorre el contorno rectangular abierto $(0, K, K + iK', iK')$; si y va de 0 a $-\infty$, se ve de manera análoga que x recorre el contorno simétrico del anterior $(0, -K, -K + iK', iK')$, de donde se concluye que la relación funcional (B.6) transforma el eje real del plano complejo y , en el contorno rectangular $(K, K + iK', -K + iK', -K)$ del plano complejo x , tal como se muestra en la figura (B.3). Luego la misma relación hace corresponder los dos semiplanos en que el eje real corta al plano y , el uno al área interior y el otro al área exterior del rectángulo señalado. Precisamente, se comprueba que es el semiplano de las y 's positivas el que corresponde al interior del rectángulo. La fórmula (B.6) ofrece por tanto la transformación conforme que representa un semiplano en un rectángulo. Los puntos singulares de la transformación son los vértices del rectángulo, donde $dx/dy = \infty$.

Obsérvese que las dimensiones $2K$ y K' del rectángulo no son ambas arbitrarias, por estar K y K' ligadas a k , y por lo tanto entre sí por las relaciones (B.9) y (B.12).

La pregunta natural es ¿dónde está el segundo periodo de $(\operatorname{sn} x)$? Para encontrarlo consideremos primero el contorno que se muestra en la figura (B.4). Este contorno da un nuevo valor de x que no está dentro del rectángulo, pero que corresponde al mismo valor final de y . Para ver cómo los dos valores de x están relacionados, deformemos el contorno de la figura (B.4), como se muestra en la figura (B.5); este nuevo contorno difiere del que aparece en la figura (B.6) sólo porque en un caso se encierra al punto $y = 1$, y en el otro no. El valor de x correspondiente al contorno de la figura (B.5) es $r + s$. Por otro lado el valor de x correspondiente al contorno de la figura (B.6) es $r - s$. Por lo tanto $r - s = 2r - (r + s)$. Pero $r = K$; por lo tanto $r - s = 2K - (r + s)$. En términos de la función $y = \operatorname{sn} x$, lo que hemos probado es que

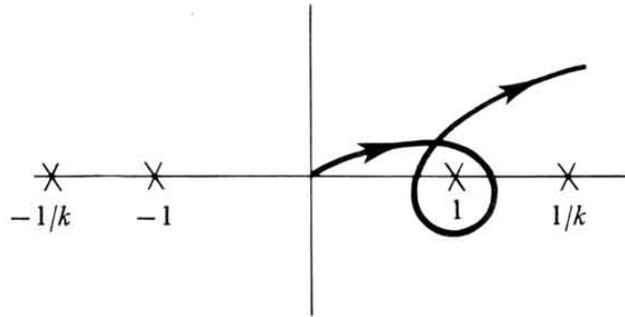


Figura B.4: Un contorno que finaliza en el semiplano superior y , pero que conduce a un valor de x fuera del rectángulo que se muestra en la figura (B.3)

$$\operatorname{sn} x = \operatorname{sn} (2K - x) \quad (\text{B.14})$$

De manera similar, el contorno de la figura (B.7) permite demostrar que

$$\operatorname{sn} x = \operatorname{sn} (x + 2iK'), \quad (\text{B.15})$$

mientras que el contorno y el contorno de la figura (B.8) nos conduce a probar que

$$\operatorname{sn} x = \operatorname{sn} (x + 4K), \quad (\text{B.16})$$

lo cual ya se sabía de la ecuación (B.7).

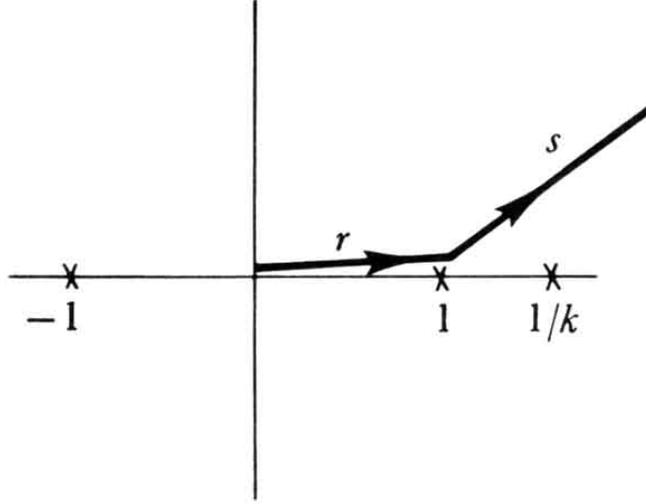


Figura B.5: Un contorno para el cual $x = r + s$ está en el interior del rectángulo de la figura (B.3)

El resultado es que $y = \operatorname{sn} x$ es una función doblemente periódica con periodos $4K$ y $2iK'$. Por lo tanto, podemos confinar nuestra atención al rectángulo con esquinas $x = \pm 2K - iK'$, $\pm 2K + iK'$. La función tiene polos en $x = \pm iK'$ y en las esquinas, y ceros en $x = 0$ y en $x = \pm 2K$.

Por otro lado, regresando a la ecuación diferencial (B.5)

$$\frac{dy}{dx} = \sqrt{(1 - y^2)(1 - k^2 y^2)},$$

podemos definir dos funciones elípticas más, mediante las ecuaciones

$$\operatorname{cn} x = \sqrt{1 - \operatorname{sn}^2 x} \quad \operatorname{cn} 0 = 1, \quad (\text{B.17})$$

y

$$\operatorname{dn} x = \sqrt{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x} \quad \operatorname{dn} 0 = 1, \quad (\text{B.18})$$

de lo cual, se encuentra directamente que

$$\operatorname{sn}^2 x + \operatorname{cn}^2 x = 1, \quad (\text{B.19})$$

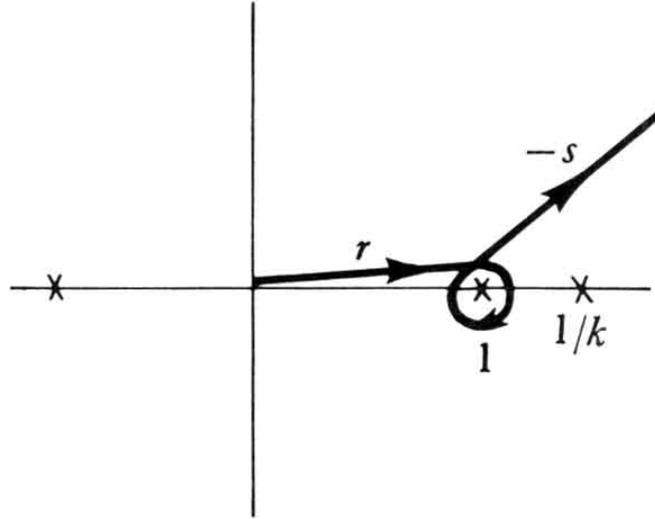


Figura B.6: Un contorno que difiere del de la figura (B.5) porque en este caso se encierra al punto $y = 1$; razón por la cual $x = r - s$.

$$\operatorname{dn}^2 x + k^2 \operatorname{sn}^2 x = 1, \quad (\text{B.20})$$

$$\frac{d}{dx} \operatorname{sn} x = \operatorname{cn} x \operatorname{dn} x, \quad (\text{B.21})$$

$$\frac{d}{dx} \operatorname{cn} x = -\operatorname{sn} x \operatorname{dn} x, \quad (\text{B.22})$$

y

$$\frac{d}{dx} \operatorname{dn} x = -k^2 \operatorname{sn} x \operatorname{cn} x. \quad (\text{B.23})$$

Cualquier función analítica (excepto por sus polos) doblemente periódica es llamada una función elíptica. Las funciones $\operatorname{sn} x$, $\operatorname{cn} x$, $\operatorname{dn} x$ son miembros de la clase llamada funciones elípticas de Jacobi. El estudio general de funciones analíticas doblemente periódicas conduce a una segunda clase de funciones elípticas, conocidas como funciones elípticas de Weierstrass.

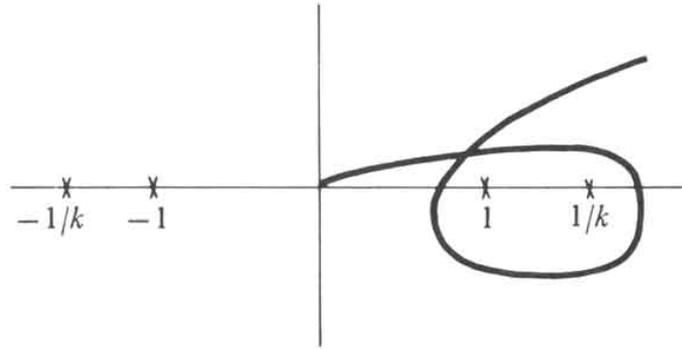


Figura B.7: Contorno mediante el cual se demuestra que $\operatorname{sn} x = \operatorname{sn}(x + 2iK')$

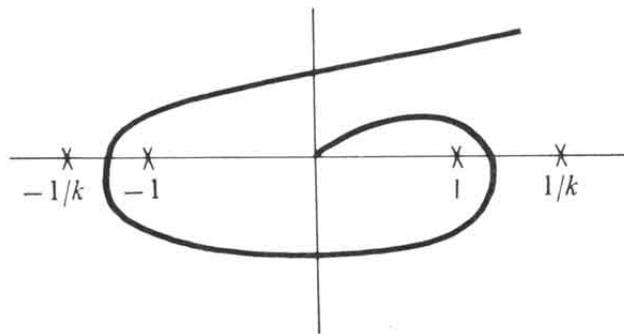


Figura B.8: Contorno mediante el cual se demuestra que $\operatorname{sn} x = \operatorname{sn}(x + 4K)$

Apéndice C

Coordenadas curvilíneas en el espacio E_3

Entre los sistemas de coordenadas, quizá el más conocido sea el sistema de coordenadas cartesianas. Este sistema tiene la única ventaja de que los tres vectores unitarios \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} , mediante los cuales se ubica cada punto del espacio, son vectores constantes. Desafortunadamente no todos los problemas físicos se pueden resolver en este sistema de coordenadas. Por ejemplo, si tenemos un problema de fuerza central $\mathbf{F} = \mathbf{r}_0 F(r)$, tal como la fuerza gravitatoria o la electrostática, las coordenadas cartesianas resultan inapropiadas en este tipo de problemas. Lo más adecuado es elegir un sistema de coordenadas en el que la distancia radial r sea una de las coordenadas; en estos casos el sistema más conveniente es el sistema de coordenadas esféricas. De lo que se trata entonces, es de elegir un sistema de coordenadas que nos permita la explotación de la simetría del problema.

En el sistema de coordenadas cartesianas, cada punto del espacio está definido por la intersección de tres planos mutuamente perpendiculares. Para describir todo el espacio, tenemos que tratar con tres familias de estos planos:

$$\begin{aligned}y^1 &= c_1, \\y^2 &= c_2, \\y^3 &= c_3,\end{aligned}\tag{C.1}$$

donde c_1 , c_2 , y c_3 son parámetros, y y^1 , y^2 , y y^3 son las coordenadas cartesianas.

Imaginemos ahora que superponemos otras tres familias de superficies sobre este sistema, las cuales no deberán estar formadas por planos, y una familia no podrá ser paralela a ninguna otra. No es necesario que las nuevas familias sean mutuamente perpendiculares, sin embargo, por simplicidad impondremos esta condición. Podemos ahora describir algún punto (y^1, y^2, y^3) en alguna región R del espacio euclídeo E_3 , como la intersección de tres planos en el sistema de coordenadas cartesianas o como la intersección de tres nuevas superficies en un sistema de coordenadas que llamaremos curvilíneo.

De manera formal consideremos al punto $P(y)$ del espacio euclideo E_3 , referido a un sistema de ejes cartesianos ortogonales Y , tal como se muestra en figura(C.1). Consideremos también una transformación funcional general

$$T : x^i = x^i(y^1, y^2, y^3) \quad (i = 1, 2, 3), \quad (\text{C.2})$$

tal que las x^i son de clase C^1 , y

$$J = \left| \frac{\partial x^i}{\partial y^j} \right| \neq 0 \quad (\text{C.3})$$

en alguna región R de E_3 . La transformación inversa

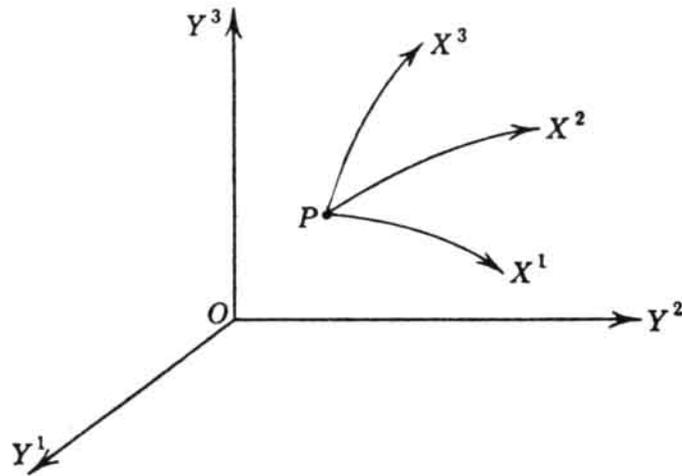


Figura C.1: Sistema de ejes cartesianos.

$$T^{-1} : y^i = y^i(x^1, x^2, x^3) \quad (i = 1, 2, 3), \quad (\text{C.4})$$

será entonces uniforme y las transformaciones T y T^{-1} establecerán una correspondencia biunívoca entre los sistemas de valores (y^1, y^2, y^3) y (x^1, x^2, x^3) . Llamaremos a la terna de números (x^1, x^2, x^3) coordenadas curvilíneas de P en R . La razón de esta terminología es la siguiente: si suponemos $x^1 = \text{constante}$ en T ,

$$x^1(y^1, y^2, y^3) = \text{constante}, \quad (\text{C.5})$$

define una superficie. Si damos ahora distintos valores a la constante, obtenemos una familia de superficies con un parámetro. De la misma forma

$$x^2(y^1, y^2, y^3) = \text{constante}, \quad (\text{C.6})$$

y

$$x^3(y^1, y^2, y^3) = \text{constante}, \quad (\text{C.7})$$

definen dos familias de superficies.

La condición de que el jacobiano $J \neq 0$ en la región que consideramos, expresa el hecho de que las tres superficies

$$x^1 = c_1, \quad x^2 = c_2, \quad x^3 = c_3 \quad (\text{C.8})$$

se cortan en un solo punto.

Llamaremos a las superficies definidas en (C.8) *superficies coordenadas* y sus intersecciones dos a dos serán las *líneas coordenadas*. De esta forma la línea de intersección de $x^1 = c_1$ y $x^2 = c_2$, es la línea coordenada x^3 , porque a lo largo de ella varía solamente la coordenada x^3 . Como ejemplo consideremos el sistema definido por la transformación

$$\begin{aligned} y^1 &= x^1 \text{sen } x^2 \cos x^3, \\ y^2 &= x^1 \text{sen } x^2 \text{sen } x^3, \\ y^3 &= x^1 \cos x^2. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Las superficies $x^1 = \text{constante}$ son esferas, $x^2 = \text{constante}$ son conos de revolución y $x^3 = \text{constante}$ son planos que pasan por el eje Y^3 , tal como se muestra en la figura (C.2).

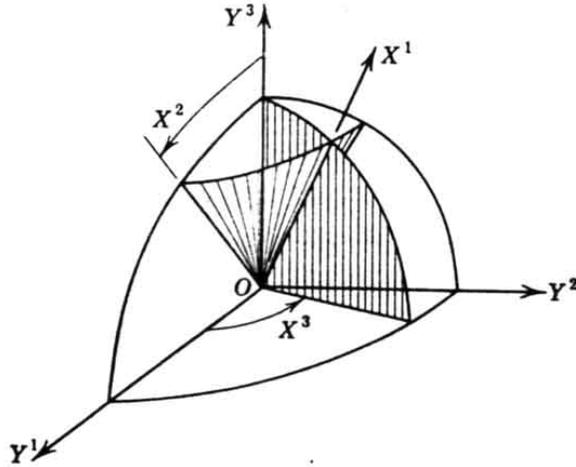


Figura C.2: Superficies que definen las coordenadas esféricas.

La transformación inversa en este caso viene dada por

$$\begin{aligned}
 x^1 &= \sqrt{(y^1)^2 + (y^2)^2 + (y^3)^2}, \\
 x^2 &= \arctan \frac{\sqrt{(y^1)^2 + (y^2)^2}}{y^3}, \\
 x^3 &= \arctan \frac{y^2}{y^1},
 \end{aligned}
 \tag{C.10}$$

si $x^1 > 0$, $0 < x^2 < \pi$, y $0 \leq x^3 < 2\pi$. Estas son las conocidas coordenadas esféricas.

Como otro ejemplo, la transformación

$$\begin{aligned}
 y^1 &= x^1 \cos x^2, \\
 y^2 &= x^1 \sin x^2, \\
 y^3 &= x^3,
 \end{aligned}
 \tag{C.11}$$

define un sistema de coordenadas cilíndricas, tal como se muestra en la figura (C.3)

De particular importancia para este trabajo es el sistema de coordenadas esferoconales r , μ , y ν , el cual se define por medio de la transformación

$$\begin{aligned} x &= \frac{r}{\beta}[(\beta^2 + \mu^2)(\beta^2 - \nu^2)]^{1/2}, \\ y &= \frac{r\mu\nu}{\alpha\beta}, \\ z &= \frac{r}{\alpha}[(\alpha^2 - \mu^2)(\alpha^2 + \nu^2)]^{1/2}, \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

donde se han cambiado (y^1, y^2, y^3) por (x, y, z) , y (x^1, x^2, x^3) por (r, μ, ν) .

Los parámetros α y β se eligen de tal modo que $\alpha^2 + \beta^2 = 1$; como consecuencia la superficie coordenada $r = \text{constante}$ es una esfera, y las superficies $\mu = \text{constante}$ y $\nu = \text{constante}$ son conos de sección transversal elíptica, cuyas ecuaciones están dadas por

$$\frac{x^2}{\beta^2 + \mu^2} + \frac{y^2}{\mu^2} - \frac{z^2}{\alpha^2 - \mu^2} = 0, \quad (\text{C.13})$$

y

$$-\frac{x^2}{\beta^2 - \nu^2} + \frac{y^2}{\nu^2} - \frac{z^2}{\alpha^2 + \nu^2} = 0. \quad (\text{C.14})$$

Los ejes de los conos $\mu = \text{constante}$ (C.13) y $\nu = \text{constante}$ (C.14), coinciden con el eje Z y el eje X respectivamente, tal como se muestra en la figura(C.4).

Por otra parte, si en la transformación (C.12) hacemos el cambio [7]

$$r = r; \quad \nu = \alpha \operatorname{cn}(\phi_1, \alpha); \quad \mu = \beta \operatorname{cn}(\phi_2, \beta), \quad (\text{C.15})$$

tendremos finalmente que

$$\begin{aligned} x &= r \operatorname{dn}(\phi_1, \alpha) \operatorname{sn}(\phi_2, \beta), \\ y &= r \operatorname{cn}(\phi_1, \alpha) \operatorname{cn}(\phi_2, \beta), \\ z &= r \operatorname{sn}(\phi_1, \alpha) \operatorname{dn}(\phi_2, \beta). \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

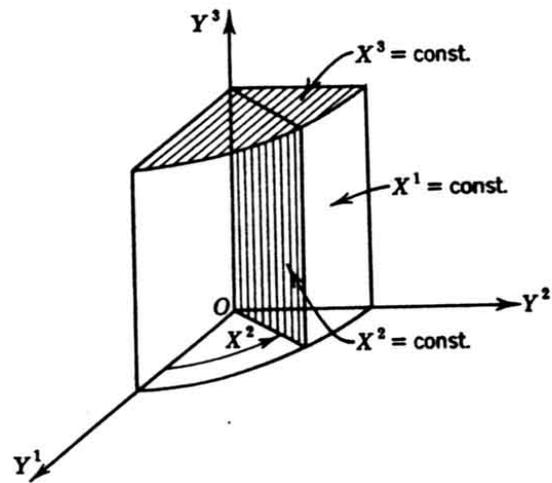


Figura C.3: Superficies que definen las coordenadas cilíndricas.

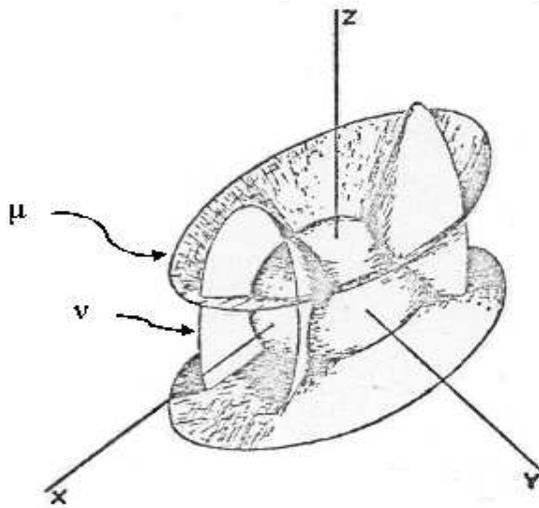


Figura C.4: Superficies que definen las coordenadas esferoconales.

Referencias

- [1] H.A. Kramers and G.P. Ittman, *On the quantization of the asymmetric top*, Z. Physik 53, 553-565 (1929)
- [2] S.C. Wang, *On the asymmetrical top in quantum mechanics*, Phys. Rev. 34, 243-252 (1929).
- [3] H.B.G. Casimir, *Rotation of a Rigid Body in Quantum Mechanics*. Wolters, The Hague, 1931.
- [4] B.S. Ray, *Eigenvalues of an asymmetrical rotator*, Z. Physik 78, 74-91 (1932).
- [5] E. Piña, *Dinámica de rotaciones*(UAM-Iztapalapa, México 1996)
- [6] E. Piña, *A new parametrization of the rotation matrix*, Am. J. Phy. 51 (1983) 375.
- [7] P.M. Morse, H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York, 1953, p. 659.
- [8] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1980.
- [9] E.T. Whittaker, G.N. Watson, *A Course of Modern Analysis*, Cambridge University Press, London 1965.
- [10] E.W. Hobson, Sc.D., LL.D., F.R.S., *The Theory of Spherical and Ellipsoidal Harmonics*, Cambridge University Press, London 1965.
- [11] E. Piña, *Solution by the separation method of the motion of a rigid body with no forces*. Rev. Mex. Fis. 43 (1997) 205.

- [12] E. Piña. *The non-symmetric top*, in: E.A. Lacomba, J. Llibre (Eds.), *Hamiltonian Systems and Celestial Mechanics*. World Scientific, Singapore, 1993, p. 149.
- [13] E.T. Whittaker, *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*, Cambridge University Press, London 1965.
- [14] L.C. Biedenharn, J.D. Louck, *Angular Momentum in Quantum Physics*, Addison-Wesley, Reading, MA. 1981.
- [15] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon Press, London, 1956.
- [16] G.W. King, R.M. Hainer, P.C. Cross, *The asymmetric rotor I. Calculation and symmetry classification of energy levels*, J. Chem Phys. 11 (1943) 27.
- [17] James E. Wollrab, *Rotational Spectra and Molecular Structure*, Academic Press, New York, 1967.
- [18] H.W. Kroto, *Molecular Rotation Spectroscopy*, Dover, New York, 1992.
- [19] Harris Hancock, *Lectures on the theory of elliptic functions*, John Wiley & Sons.



Caso abierta al tiempo

**PROPIEDADES ANALÍTICAS DEL ESPECTRO DE ROTACIÓN
MOLECULAR**

TESIS QUE PRESENTA EL

FIS. GUSTAVO BAUTISTA CARBAJAL

PARA LA OBTENCIÓN DEL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS

ABRIL DE 2004

ASESOR

DR. EDUARDO PIÑA GARZA

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA**



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00002

PROPIEDADES ANALITICAS DEL ESPECTRO DE ROTACION MOLECULAR.

En México, D.F., se presentaron a las 16:00 horas del día 6 del mes de abril del año 2005 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. EDUARDO PIÑA GARZA

DR. EUGENIO LEY KOO

DR. ELEUTERIO CASTAÑO TOSTADO

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA)

DE: GUSTAVO BAUTISTA CARBAJAL

Y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:



GUSTAVO BAUTISTA CARBAJAL
FIRMA DEL ALUMNO

REVISÓ

DR. CARMEN LLORENS FABREGAT
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. TOMAS VIVEROS GARCÍA

PRESIDENTE

DR. EDUARDO PIÑA GARZA

VOCAL

DR. EUGENIO LEY KOO

SECRETARIO

DR. ELEUTERIO CASTAÑO TOSTADO