



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ARMÓNICOS ESFEROCONALES, FUNCIONES
DE LAMÉ Y ROTACIONES MOLECULARES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

M A T E M Á T I C O

P R E S E N T A:

RICARDO MÉNDEZ FRAGOSO



FACULTAD DE CIENCIAS
UNAM

TUTOR: DR. EUGENIO LEY KOO

2007



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Datos del Jurado

1. Datos del Alumno

Méndez
Fragoso
Ricardo
57 40 12 59
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Matemáticas

2. Datos del tutor

Dr.
Eugenio
Ley
Koo

3. Datos de sinodal 1

Dr.
Antonmaria
Minzoni
Alessio

4. Datos de sinodal 2

Dr.
Carlos Arturo
Vargas
Guadarrama

5. Datos de sinodal 3

Dr.
Mara del Carmen
Jorge
y Jorge

6. Datos de sinodal 4

Dr.
Micho
Durdevich

7. Datos del trabajo escrito

Armónicos esferoconales, funciones de Lamé y rotaciones moleculares
62 p
2007

Agradecimientos

En especial agradezco a mi mamá Lucila Fragoso Fernández, a mi papá Ricardo Méndez Reyes y a mi hermana Diana Sai Méndez Fragoso.

Quiero expresar mis agradecimientos a mis familiares, amigos y profesores que estuvieron conmigo a lo largo de mi formación:

Nelly Fernández. José Méndez. Eloy Fragoso. Arturo Méndez. Eugenio Ley Koo. Marcos Ley Koo. Arturo Álvarez. Geogina Méndez. Esther Fragoso. Alberto Morales. Cesar Fragoso. Javier Páez. Antonio Nava. Nicolas Palma. Lorea Chaos. Jorge Luis Ramírez. Carolina Fragoso. Jorge Ramírez. Juan López. Karen Volke. Adrián Martínez. Gabriela del Valle. Gabriela Campero. María del Carmen Jorge y Jorge. Antonmaria Minzoni. Arturo Vargas. Micho Durdevich. Faustino Sánchez. Jocele. Carlos Torres. Leonardo Nava. Abraham Jurado. Pablo Barrera. Moisés Espinosa.

Quiero agradecer el apoyo económico que me brindó el CONACyT a través del SNI para realizar mi tesis con la que obtuve el título de Físico (Septiembre de 2006) y la presente tesis para obtener el título de Matemático.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Consideraciones sobre este trabajo	1
1.2. Objetivos de este trabajo	1
1.2.1. Contexto histórico de las rotaciones de moléculas asimétricas y trompo cuántico asimétrico	3
2. Rotaciones de moléculas asimétricas	5
2.1. Trompo cuántico asimétrico	5
2.2. Parametrizaciones del trompo cuántico asimétrico	7
3. Rotaciones del trompo cuántico asimétrico con evaluación matricial utilizando bases de armónicos esféricos	10
3.1. Solución matricial a la ecuación de Schrödinger $\hat{H}^*\Psi = E^*\Psi$	10
3.2. Algunos resultados numéricos ilustrativos	13
3.2.1. Propiedades de los eigenvalores de \hat{H}^*	13
3.2.2. Propiedades de los eigenvectores de \hat{H}^*	14
4. Coordenadas esferoconales	20
4.1. Funciones elípticas de Jacobi	20
4.2. Las coordenadas esferoconales	22
4.3. Operadores importantes en coordenadas esferoconales	25
5. Rotaciones del trompo cuántico asimétrico con evaluación matricial de funciones de Lamé	27
5.1. Separación y solución de la ecuación de Schrödinger $\hat{H}^*\Psi = E^*\Psi$ en coordenadas esferoconales	27
5.2. Evaluación matricial de funciones de Lamé	29

5.2.1. Propiedades de los eigenvalores de funciones de Lamé	32
5.2.2. Propiedades de las eigenfunciones de Lamé	33
5.3. Eigenvectores de \hat{H}^* en términos de funciones de Lamé	36
6. Armónicos esferoconales en términos de funciones de Lamé y función generadora	39
6.1. Potencial de Coulomb como función generadora de las funciones armónicas . . .	39
6.1.1. Teorema de la adición para armónicos esferoconales	40
6.2. Función generadora de armónicos esferoconales a partir de \hat{H}^*	41
7. Conclusión y discusión	46
7.1. Comentarios sobre la evaluación matricial de los armónicos esferoconales	46
7.2. Observaciones sobre la evaluación matricial de las funciones de Lamé	47
7.3. Conexión entre armónicos esféricos y armónicos esferoconales	48
7.4. Sobre los resultados numéricos obtenidos y sus aplicaciones	48
A. Coordenadas esféricas	49
A.1. Polinomios de Legendre	52
A.2. Armónicos esféricos	52
Bibliografía	54

Capítulo 1

Introducción

1.1. Consideraciones sobre este trabajo

El estudio de las rotaciones ha sido muy importante ya que nos permite resolver distintos problemas que se presentan en la ciencia. El tema de esta tesis se me presentó cuando el Dr. Eugenio Ley Koo me invitó a colaborar en el cálculo de eigenvalores y eigenvectores de unas matrices que modelan las rotaciones de moléculas asimétricas. Este tema de inmediato llamó mi atención porque involucraba operadores de rotación y funciones especiales que aparecen en el sistema de coordenadas esferoconales.

El problema que aquí se aborda tiene sus orígenes en la espectroscopía de moléculas asimétricas que realizan los Físicos y Químicos. Las Matemáticas involucradas detrás de ello son las que nos interesan en este trabajo y de esta manera dar solución al problema original. Por ello la presente tesis representa importantes avances para personas interesadas en las áreas de Física, Química, Ingenierías y Matemáticas. De manera retroactiva las aportaciones de este trabajo en el terreno de las matemáticas permiten un mejor entendimiento de funciones especiales que provienen de sistemas de coordenadas poco convencionales que aquí abordamos; incluso para el análisis numérico representa una herramienta muy práctica ya que los métodos aquí presentados mejoran por mucho en precisión y rapidez a los usualmente utilizados. Cabe mencionar que la presente tesis está escrita de tal forma que personas que se dedican a la Física, Química, Ingenierías y Matemáticas puedan leerla sin ningún problema.

1.2. Objetivos de este trabajo

El trompo cuántico asimétrico es el punto de partida de este trabajo ya que sirve para modelar las rotaciones de las moléculas asimétricas. Un panorama general de cómo se resuelve el trompo asimétrico se presenta en el Capítulo 2. En dicha sección se presenta una reparametrización del trompo con la finalidad de obtener todas las soluciones posibles en términos de un único parámetro. El objetivo de este trabajo es encontrar las soluciones del trompo cuántico asimétrico sin utilizar teoría de perturbaciones, y calcular las funciones de Lamé sin utilizar el método de fracciones continuas. En lugar de ello se presentan dos métodos matriciales distintos

que permiten calcular las soluciones de manera exacta. A lo largo de este trabajo se presentan resultados numéricos y gráficos en los que se ilustran la eficiencia y precisión de los métodos aquí utilizados. Para resolver el problema planteado se utiliza una reparametrización que mapea todo el conjunto de momentos de inercia (I_i) en términos de un único parámetro de asimetría. Ello se logra a través de separar la parte simétrica y asimétrica, [2] y [13]. Las soluciones para la parte simétrica son los armónicos esféricos, y en este trabajo nos concentramos en la parte asimétrica cuyas soluciones son los armónicos esferoconales.

En el Capítulo 3 se propone un método matricial que utiliza la base de los armónicos esféricos para calcular las soluciones. Este método no utiliza teoría de perturbaciones por lo que los cálculos se pueden hacer para cualquier asimetría y con precisión, [27].

Dentro del Capítulo 4 se introduce el sistema de coordenadas esferoconales con el objetivo de encontrar una solución separable para el problema del trompo cuántico asimétrico. Este sistema de coordenadas utiliza las funciones elípticas de Jacobi, mismas que se pueden considerar como una extensión de las funciones trigonométricas. También se identifican las propiedades de los operadores diferenciales necesarios para el estudio del trompo cuántico asimétrico en este sistema de coordenadas.

En el Capítulo 5 se muestra que el trompo cuántico asimétrico es separable e integrable en coordenadas esferoconales. Al hacer ésto se identifica la ecuación diferencial de Lamé, cuyas soluciones (funciones de Lamé) proporcionan los armónicos esferoconales. Tratamientos estándar sobre las funciones de Lamé se pueden encontrar en el libro E. T. Whittaker y G.N. Watson, [20]. Sin embargo, en la mayoría de los trabajos la evaluación de las funciones de Lamé utiliza el método de fracciones continuas que implica mucho trabajo de cómputo. Por ello es que en este trabajo se utiliza un método matricial para evaluarlas y de esta manera construir los armónicos esferoconales, [28]. Este método permite hacer una evaluación rápida y precisa de las funciones de Lamé sin recurrir al método de fracciones continuas que tradicionalmente se utiliza.

Finalmente reconocemos que las soluciones que se han encontrado son solución de la ecuación de Laplace. Es decir, tenemos que los armónicos esféricos y los armónicos esferoconales forman cada uno bases de eigenfunciones del operador de cuadrado de momento angular (parte angular de la ecuación de Laplace) pero en diferentes coordenadas. Con los desarrollos que aquí se exponen se puede ir de la base de los armónicos esféricos a la base de los armónicos esferoconales y viceversa. Ésto nos permite identificar una función generadora común para ambas bases que se expone en el Capítulo 6, [29].

En la Figura 1.1 se presenta de manera esquemática el contenido de esta tesis. En ella se observa el paralelismo que hay entre las soluciones en términos de armónicos esféricos (Capítulo 3) y las soluciones en términos de funciones de Lamé (Capítulo 5). En la parte final de la Figura se observa la unificación de las soluciones encontradas por dos caminos distintos. Cabe mencionar que este mismo paralelismo se observa desde el índice de esta tesis y de ahí la razón de los nombres elegidos para los Capítulos.

A continuación se presenta un marco histórico de cómo se ha tratado de resolver el problema del trompo cuántico asimétrico.

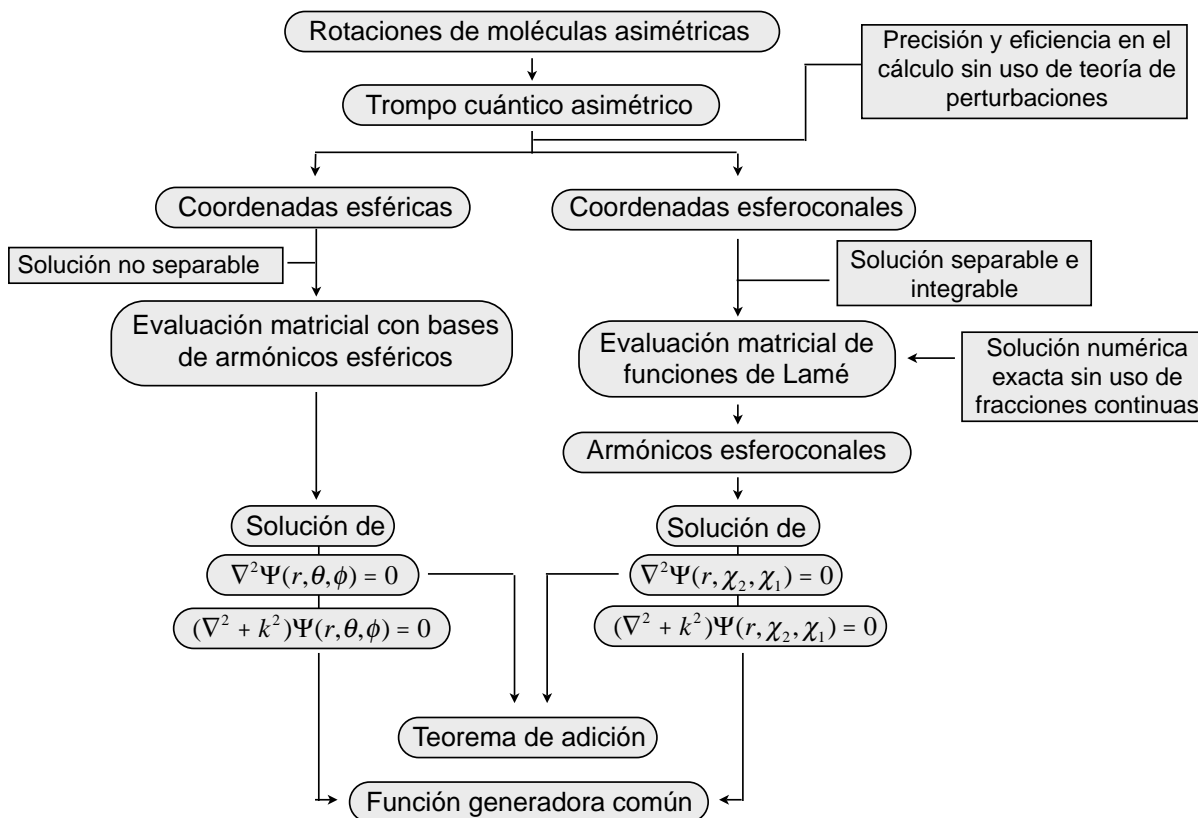


Figura 1.1: Organización de los temas que se abordan en esta Tesis.

1.2.1. Contexto histórico de las rotaciones de moléculas asimétricas y trompo cuántico asimétrico

Prácticamente desde los inicios de la mecánica cuántica se ha tratado de resolver el problema de un trompo asimétrico. En 1929 H. A. Kramers y G. P. Ittmann publicaron la versión cuántica del trompo asimétrico *Zur quantelung das asymmetrischen kreisels* [1]. En dicho trabajo hacen una descripción en términos de soluciones a la ecuación diferencial de Lamé para proporcionar el espectro de energías y las funciones de onda asociadas al trompo cuántico asimétrico. Sin embargo, las herramientas de cálculo de aquella época no permitieron obtener resultados numéricos de manera rápida y eficiente.

En la década de los 40's, Gilbert W. King, R. M. Hainer y Paul C. Cross realizaron una serie de trabajos en los que exponen resultados numéricos sobre el rotor cuántico asimétrico, *The asymmetric rotor* [3], [4] y [5]. Hacia 1954, Clasine Van Winter con su trabajo: *The asymmetric rotator in quantum mechanics* [6], explica cómo resolver el trompo cuántico asimétrico utilizando armónicos esféricos obteniendo las soluciones para los casos de un trompo prolato y oblato, mismos que utiliza para extender sus resultados a otras asimetrías intermedias utilizando teoría de perturbaciones.

A principios de los 60's se comenzaron a implementar programas de cómputo utilizando matrices para el cálculo de las energías rotacionales y de las funciones de onda. En todos estos

trabajos se buscan soluciones a las ecuaciones diferenciales asociadas al problema pasando por alto que se trata de operadores lineales lo cual hace que los cálculos sean complicados y laboriosos. Uno de los primeros trabajos que utilizaron herramientas de cómputo para proporcionar resultados numéricos con buena precisión fue escrito por F. Kneubühl, T. Gäumann y Hs. H. Günthard en 1959: *Program for automatic digital computation of transition frequencies and analysis of microwave rotational spectra of rigid tops*, [7]. Aunque el programa que presentaron calcula algunas transiciones entre niveles de energía, cabe mencionar que este programa de cómputo tarda del orden de horas para hacer el cálculo de los espectros de energías. Otros resultados numéricos utilizando el método de fracciones continuas fueron publicados por N. Jannuzzi y Sergio P. S. Porto en 1960, [8]. Incluso en 1960 fue publicado un método computacional que de acuerdo con J. M. Bennett, I. G. Ross y E. J. Wells mejoraba los cálculos que se tenían hasta ese momento, [9]. En esta década destaca el artículo de Donald G. Burkhard y Wesley E. Brittin, *The asymmetric top - An analytical treatment*, en el que se hace un tratamiento analítico para obtener las energías, [10].

Desde el punto de vista del álgebra lineal uno puede reducir el problema al cálculo de matrices, lo cual facilita en gran medida los cálculos. En los trabajos de James D. Louck se presentan métodos matriciales para encontrar las energías de rotación en lugar de resolver ecuaciones diferenciales, [11] y [12]. Sin embargo, en la gran mayoría de los trabajos se utiliza teoría de perturbaciones y técnicas de fracciones continuas para aproximar los eigenvalores de los operadores asociados al problema.

Una de las aplicaciones más importantes que se le han dado a las soluciones del trompo cuántico asimétrico es en el campo de la espectroscopía, ya que para las moléculas asimétricas éste resulta ser un buen modelo. Un trabajo muy completo sobre este tema es el libro *Molecular Rotation Spectra* de H. W. Kroto, [22]. También este problema resulta ser de mucha ayuda para conocer muchas de las propiedades de las funciones de Lamé y de las coordenadas esferoconales cuyo estudio se puede encontrar en los libros *A Course of Modern Analysis* de E. T. Whittaker y G. N. Watson [20], y *Methods of Theoretical Physics* de P. M. Morse y H. Feshbach, [19].

Aunque desde un principio Kramers en 1929 dio las bases para el cálculo de las soluciones de manera exacta, la mayoría de los trabajos utilizan el método de perturbaciones tomando como punto de partida las soluciones para los casos prolato y oblato. Recientemente se han hecho trabajos basados en resolver la ecuación diferencial de Lamé para algunos casos especiales como lo hace E. Piña en: *Some properties of the spectra of asymmetric molecules*, [14]. Este mismo autor en su trabajo: *The rotational spectra of the most asymmetric molecules* [18], aborda el caso para la mayor asimetría, y en él se propone que a partir de ésta se haga teoría de perturbaciones para conectar con los casos prolato y oblato. A diferencia dichos trabajos, en esta tesis se realiza el cálculo de manera exacta utilizando técnicas matriciales que se aprenden en un curso de álgebra lineal.

Rotaciones de moléculas asimétricas

2.1. Trompo cuántico asimétrico

El problema de interés en esta tesis es la modelación de rotaciones de moléculas asimétricas. Como es bien conocido la mecánica cuántica nos proporciona la forma de abordar el problema. La mecánica cuántica es una de las ramas de la Física que hace sus descripciones en términos de operadores lineales, situando este problema dentro del álgebra lineal y del análisis. De acuerdo con la mecánica cuántica, para modelar una molécula asimétrica es necesario encontrar las soluciones comunes a la ecuación de Schrödinger y la ecuación de eigenvalores del cuadrado de momento angular. El modelo de una molécula asimétrica es el equivalente cuántico de un trompo asimétrico, el cual queda descrito por la siguiente función hamiltoniana escrita en el sistema de coordenadas donde el trompo está fijo:

$$H = \frac{1}{2} \left[\frac{L_x^2}{I_1} + \frac{L_y^2}{I_2} + \frac{L_z^2}{I_3} \right] . \quad (2.1)$$

donde L_x , L_y y L_z son las componentes de momento angular a lo largo de los ejes principales, y las cantidades I_1 , I_2 e I_3 son los momentos de inercia del trompo respecto a cada uno de estos ejes. Una deducción de la anterior ecuación se puede encontrar en libros de mecánica clásica como el de V.I. Arnold [23]. Para la versión cuántica de la anterior ecuación se introducen los operadores de momento angular \hat{L}_x , \hat{L}_y y \hat{L}_z correspondientes¹:

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) , \quad (2.2)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) , \quad (2.3)$$

¹Consideramos a estos operadores diferenciales multiplicados por $-i\hbar$ ya que la forma tradicional de resolver este tipo de problemas surgió con la Mecánica Cuántica.

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) . \quad (2.4)$$

Estos operadores de momento angular son transformaciones lineales relacionadas con las rotaciones infinitesimales alrededor de cada uno de los ejes coordenados. En la versión cuántica de la ecuación (2.1) si se toman los tres momentos de inercia iguales se obtiene un trompo esférico cuyas soluciones son los armónicos esféricos. Si se toman dos momentos de inercia iguales y uno diferente se obtiene un trompo prolato si los dos momentos que son iguales son mayores que el que es diferente, u oblató si se tiene la desigualdad en sentido contrario. En general los tres momentos de inercia son diferentes y es el caso que nos interesa en este trabajo.

Para describir un trompo cuántico asimétrico es necesario contar con la ecuación de Schrödinger correspondiente. Para ello se toma el análogo que se tiene en mecánica clásica expresado en la ecuación (2.1). Al sustituir las componentes de momento angular por los operadores de momento angular que se utilizan en Mecánica Cuántica se obtiene la ecuación de Schrödinger correspondiente:

$$\hat{H}\Psi = \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{L}_x^2}{I_1} + \frac{\hat{L}_y^2}{I_2} + \frac{\hat{L}_z^2}{I_3} \right] \Psi = E\Psi , \quad (2.5)$$

donde E es el valor propio del operador Hamiltoniano (\hat{H}) y Ψ es la función propia. Para encontrar las soluciones del operador anterior buscamos un operador que conmute con él. Nótese que por construcción \hat{H} involucra los cuadrados de las componentes de momento angular, lo que garantiza que el operador cuadrado de momento angular \hat{L}^2 conmute con \hat{H} , es decir:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = \hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H} = 0 , \quad (2.6)$$

implicando que \hat{H} y \hat{L}^2 tienen eigenfunciones comunes. La ecuación de eigenvalores que define \hat{L}^2 es:

$$\hat{L}^2\Psi = \hbar^2\ell(\ell + 1)\Psi . \quad (2.7)$$

donde $\hbar^2\ell(\ell + 1)$ es el valor propio y las eigenfunciones son los armónicos esféricos que se detallan en el Apéndice A.

Otro operador importante es el de paridad que se define de la siguiente forma:

$$\hat{P}\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r}) , \quad (2.8)$$

donde \vec{r} es vector posición. Nótese que la dependencia cuadrática en cada una de las componentes de momento angular en \hat{H} hace que tengamos las siguientes reglas de conmutación:

$$[\hat{H}, \hat{P}_i] = 0 , \quad (2.9)$$

donde \hat{P}_i significa que el operador de paridad sólo actúa sobre la componente $i = x, y, z$, es decir, \hat{P}_i es tal que $x_i \rightarrow -x_i$. También se tiene la siguiente regla de conmutación para el cuadrado de momento angular:

$$[\hat{L}^2, \hat{P}_i] = 0 . \quad (2.10)$$

Las anteriores reglas de conmutación permiten clasificar las eigenfunciones de \hat{H} de acuerdo a su paridad respecto de cada uno de los ejes coordenados y de las eigenfunciones del cuadrado de momento angular. Esto permite identificar simetrías en las soluciones que se detallan en los capítulos siguientes. Sin embargo, es importante hacer notar que estas simetrías se tienen por construcción del hamiltoniano, ya que hasta el momento sólo se han utilizado propiedades de los operadores y no se ha hecho ningún cálculo.

2.2. Parametrizaciones del trompo cuántico asimétrico

Para resolver la ecuación (2.5) se han introducido diferentes parametrizaciones del trompo cuántico asimétrico, y la más utilizada es la que introdujo B. S. Ray en 1932, [2]. Sin embargo, en este trabajo utilizamos una parametrización alternativa utilizada por E. Piña en su trabajo *Some properties of the spectra of asymmetric molecules*, [14]. Esta parametrización consiste en reemplazar los momentos de inercia I_i extrayendo la parte asimétrica del operador \hat{H} . Esto se hace introduciendo la descomposición en dos partes de una matriz diagonal, una parte con traza y otra sin traza:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{I_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{I_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{I_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q & 0 & 0 \\ 0 & Q & 0 \\ 0 & 0 & Q \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} e_1 & 0 & 0 \\ 0 & e_2 & 0 \\ 0 & 0 & e_3 \end{pmatrix} , \quad (2.11)$$

donde se han introducido los parámetros Q, P, e_1, e_2 y e_3 . De manera que:

$$Q = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_2} + \frac{1}{I_3} \right) , \quad (2.12)$$

$$e_1 + e_2 + e_3 = 0 . \quad (2.13)$$

Entonces

$$Pe_1 = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{I_1} - \frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_3} \right) , \quad (2.14)$$

$$Pe_2 = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{I_2} - \frac{1}{I_3} - \frac{1}{I_1} \right) , \quad (2.15)$$

$$Pe_3 = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{I_3} - \frac{1}{I_1} - \frac{1}{I_2} \right) . \quad (2.16)$$

Al tomar la suma de los cuadrados de las ecuaciones (2.14) - (2.16) obtenemos:

$$P^2(e_1^2 + e_2^2 + e_3^2) = \frac{1}{3} \left[\left(\frac{1}{I_1} - \frac{1}{I_2} \right)^2 + \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_3} \right)^2 + \left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I_1} \right)^2 \right] \quad (2.17)$$

donde se han reagrupado los inversos de los momentos de inercia. Originalmente teníamos tres parámetros dados por $\{I_i^{-1}\}$, y en esta descomposición hemos introducido cinco, entonces para ser consistentes podemos imponer dos restricciones sobre los nuevos parámetros. La primera restricción está en la ecuación (2.13) y la segunda restricción es que la suma de los cuadrados de las $\{e_i\}$ sea una constante:

$$e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = \frac{3}{2} , \quad (2.18)$$

ello hace que el conjunto de las $\{e_i\}$ no sean independientes, y ello permite escribirlas de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} e_1 &= \cos \sigma & , & & e_2 &= \cos\left(\sigma - \frac{2\pi}{3}\right) & , \\ e_3 &= \cos\left(\sigma + \frac{2\pi}{3}\right) & , & & & & \end{aligned} \quad (2.19)$$

donde la elección de $3/2$ en la ecuación (2.18) hace que el conjunto de las $\{e_i\}$ se distribuya de manera simétrica. Sin pérdida de generalidad podemos ordenar los momentos de inercia como $I_1 < I_2 < I_3$ que corresponde a que $e_1 < e_2 < e_3$ y que $\sigma \in [0, \pi/3]$. Una representación gráfica de los números $\{e_i\}$ se muestra en Figura 2.1.

La parametrización que utilizó B. S. Ray, [2], involucra un parámetro de asimetría denotado por κ , y su relación con la parametrización que se utiliza en este trabajo es la siguiente:

$$e_1 = \cos \sigma = \frac{3 - \kappa}{2\sqrt{e + \kappa^2}} . \quad (2.20)$$

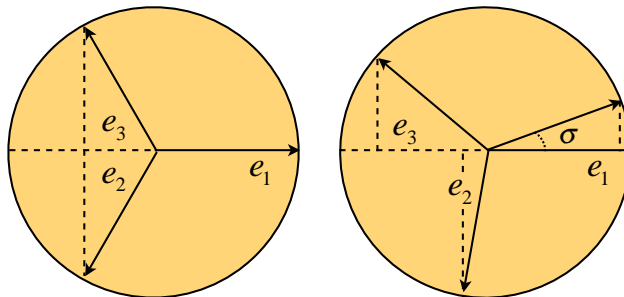


Figura 2.1: Representación vectorial de e_1 , e_2 y e_3 . Las proyecciones sobre el eje horizontal son los valores que toman.

Con las restricciones sobre el conjunto de las $\{e_i\}$ el valor de P queda finalmente como:

$$P^2 = \frac{2}{9} \left[\left(\frac{1}{I_1} - \frac{1}{I_2} \right)^2 + \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_3} \right)^2 + \left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I_1} \right)^2 \right]. \quad (2.21)$$

La elección de los cinco parámetros en las ecuaciones (2.12), (2.19) y (2.21) permite escribir el Hamiltoniano en la ecuación (2.5) de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} Q \hat{L}^2 + \frac{1}{2} P \left[e_1 \hat{L}_x^2 + e_2 \hat{L}_y^2 + e_3 \hat{L}_z^2 \right], \quad (2.22)$$

donde identificamos el siguiente operador:

$$\hat{H}^* = \frac{1}{2} \left[e_1 \hat{L}_x^2 + e_2 \hat{L}_y^2 + e_3 \hat{L}_z^2 \right], \quad (2.23)$$

que concentra la parte asimétrica de \hat{H} . Como puede verse en la ecuación (2.22) la parte simétrica es proporcional al operador de cuadrado de momento angular y cuyas soluciones son los armónicos esféricos. Si se tiene el caso $P = 0$ ($I_1 = I_2 = I_3$) se recupera el caso de un trompo con simetría esférica. Para cuando $P \neq 0$ se identifican principalmente los siguientes casos para un trompo asimétrico:

- Trompo prolato: $I_1 < I_2 = I_3 \Rightarrow e_1 = 1$ y $e_2 = e_3 = -1/2 \Rightarrow \sigma = 0$.
- Trompo oblató: $I_1 = I_2 < I_3 \Rightarrow e_1 = e_2 = 1/2$ y $e_3 = -1 \Rightarrow \sigma = \pi/3$.
- Trompo más asimétrico: $e_1 = \sqrt{3}/2 = -e_3$ y $e_2 = 0 \Rightarrow \sigma = \pi/6$.

Las representaciones gráficas de los casos anteriores se encuentran en la Figura 2.2. Debido a que \hat{H} y \hat{L}^2 conmutan, las soluciones de la ecuación 2.23 se pueden escribir como combinación lineal de los armónicos esféricos. Para ello presentamos en el siguiente Capítulo un método matricial que nos permite encontrar las soluciones de \hat{H}^* , mismas que se identifican más adelante como los armónicos esferoconales.

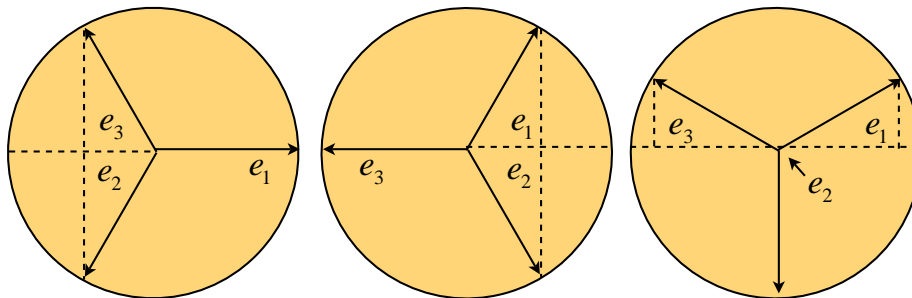


Figura 2.2: Se presentan los tres principales casos de asimetría para el conjunto de las $\{e_i\}$. A la izquierda el caso prolato, al centro el caso oblató y a la derecha el caso más asimétrico.

Capítulo 3

Rotaciones del trompo cuántico asimétrico con evaluación matricial utilizando bases de armónicos esféricos

En este Capítulo se utilizan los armónicos esféricos para el cálculo de las soluciones del trompo en su versión cuántica. Para ello se utiliza una evaluación matricial que proporciona las soluciones en términos de bases de armónicos esféricos.

3.1. Solución matricial a la ecuación de Schrödinger $\hat{H}^*\Psi = E^*\Psi$

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger \hat{H}^* requieren de los elementos de matriz de \hat{L}_x^2 , \hat{L}_y^2 y \hat{L}_z^2 en alguna de las bases de \hat{L}^2 . La base que genera los armónicos esféricos está caracterizada por las siguientes ecuaciones de eigenvalores:

$$\hat{L}^2 |\ell m_k\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) |\ell m_k\rangle , \quad (3.1)$$

$$\hat{L}_k |\ell m_k\rangle = \hbar m_k |\ell m_k\rangle , \quad (3.2)$$

donde $k = x, y$ ó z . Una vez que se ha elegido el eje k , estos operadores son diagonales en esta representación. En lugar de las otras componentes \hat{L}_i y \hat{L}_j , con $(i, j, k) = \text{cyc}(x, y, z)$, utilizamos los operadores ascenso y descenso:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_i + i\hat{L}_j , \quad (3.3)$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_i - i\hat{L}_j , \quad (3.4)$$

cuyos respectivos efectos sobre el vector $|\ell m\rangle$ son:

$$\hat{L}_{\pm} |\ell m_k\rangle = \hbar C_{\pm}(\ell, m_k) |\ell m_k \pm\rangle , \quad (3.5)$$

$$C_{\pm}(\ell, m_k) = \sqrt{(\ell \mp m_k)(\ell \pm m_k + 1)} . \quad (3.6)$$

Además los cuadrados de los operadores \hat{L}_i y \hat{L}_j toman las siguientes formas:

$$\hat{L}_i^2 = \frac{1}{4} (\hat{L}_+ \hat{L}_+ + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_- \hat{L}_-) , \quad (3.7)$$

$$\hat{L}_j^2 = \frac{1}{4} (-\hat{L}_+ \hat{L}_+ + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ - \hat{L}_- \hat{L}_-) . \quad (3.8)$$

Los efectos de los términos sucesivos de estas ecuaciones sobre el vector $|\ell m_k\rangle$ son los siguientes: el primer término incrementa m en dos unidades, los siguientes dos términos dejan igual el valor de m , y el último término reduce m en dos unidades. Con esto tenemos que las matrices que representan a \hat{H}^* en las bases sucesivas son respectivamente:

$$\begin{aligned} \langle \ell m'_x | \hat{H}^* | \ell m_x \rangle = & \quad (3.9) \\ & \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \left[e_1 m_x^2 + \frac{e_2 + e_3}{4} (C_+(\ell, m_x - 1)C_-(\ell, m_x) + C_-(\ell, m_x + 1)C_+(\ell, m_x)) \right] \delta_{m'_x, m_x} \right. \\ & \left. + \frac{e_2 - e_3}{4} [C_+(\ell, m_x + 1)C_+(\ell, m_x)\delta_{m'_x, m_x+2} + C_-(\ell, m_x - 1)C_-(\ell, m_x)\delta_{m'_x, m_x-2}] \right\} , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \ell m'_y | \hat{H}^* | \ell m_y \rangle = & \quad (3.10) \\ & \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \left[e_2 m_y^2 + \frac{e_3 + e_1}{4} (C_+(\ell, m_y - 1)C_-(\ell, m_y) + C_-(\ell, m_y + 1)C_+(\ell, m_y)) \right] \delta_{m'_y, m_y} \right. \\ & \left. + \frac{e_3 - e_1}{4} [C_+(\ell, m_y + 1)C_+(\ell, m_y)\delta_{m'_y, m_y+2} + C_-(\ell, m_y - 1)C_-(\ell, m_y)\delta_{m'_y, m_y-2}] \right\} , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \ell m'_z | \hat{H}^* | \ell m_z \rangle = & \quad (3.11) \\ & \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \left[e_3 m_z^2 + \frac{e_1 + e_2}{4} (C_+(\ell, m_z - 1)C_-(\ell, m_z) + C_-(\ell, m_z + 1)C_+(\ell, m_z)) \right] \delta_{m'_z, m_z} \right. \\ & \left. + \frac{e_1 - e_2}{4} [C_+(\ell, m_z + 1)C_+(\ell, m_z)\delta_{m'_z, m_z+2} + C_-(\ell, m_z - 1)C_-(\ell, m_z)\delta_{m'_z, m_z-2}] \right\} . \end{aligned}$$

Obsérvese que en estas matrices los elementos satisfacen las reglas de selección $m' = m + 2$, $m' = m$ y $m' = m - 2$. Ahora bien, recordemos que en armónicos esféricos el número m va desde $-\ell$ hasta ℓ por lo que estas matrices tienen dimensión $2\ell + 1$ y tomando en cuenta la observación anterior estas matrices se separan en dos bloques tridiagonales, uno de $(\ell + 1) \times (\ell + 1)$ y otro $\ell \times \ell$. En virtud de que \hat{H}^* es un operador hermitiano sabemos que éste es simétrico respecto de la diagonal principal, sin embargo también se identifica que las anteriores matrices son simétricas respecto de la otra diagonal debido a la forma de los coeficientes C_{\pm} en la ecuación (3.6). Lo anterior hace que los eigenvectores que obtengamos de estas matrices tengan paridad bien definida. Las observaciones antes mencionadas permiten clasificar las soluciones en dos especies (para ℓ par y ℓ non) con cuatro tipos de funciones cada una como se ilustran en las Tablas 1 y 2 de Whittaker y Watson [20].

La respectiva diagonalización de las ecuaciones (3.9) - (3.11) proporciona los eigenvalores y eigenvectores normalizados de H^* :

$$\Psi_{E\ell} = \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell m} |\ell m\rangle, \quad (3.12)$$

para cualquier valor del parámetro de asimetría (σ) de \hat{H}^* . La elección de cualquiera de las matrices en (3.9) - (3.11) produce los mismos eigenvalores y eigenfunciones. Sin embargo, dependiendo de la asimetría (σ) cada una de ellas puede ser más transparente en su uso. Por ejemplo, para el caso prolato es mucho más útil la representación en la ecuación (3.9) ya que $e_2 = e_3$ haciendo que los términos fuera de la diagonal sean nulos:

$$E_{\ell m_x}^*(\sigma = 0) = \frac{\hbar^2}{4} \left(3m_x^2 - \ell(\ell + 1) \right). \quad (3.13)$$

Para el caso oblato se tiene que $e_1 = e_2$ por lo que la ecuación (3.11) toma una forma diagonal:

$$E_{\ell m_z}^*(\sigma = \frac{\pi}{3}) = -\frac{\hbar^2}{4} \left(3m_z^2 - \ell(\ell + 1) \right). \quad (3.14)$$

Como puede observarse cuando $\sigma = 0$ y $\pi/3$ las soluciones se reducen a los armónicos esféricos con eje azimutal en la dirección del eje x y del eje z respectivamente. Para el caso más asimétrico se tiene $e_2 = 0$ y $e_1 = -e_3 = \sqrt{3}/2$ dando como resultado que la matriz \hat{H}^* toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \langle \ell m'_y | \hat{H}^* | \ell m_y \rangle = & \\ & -\hbar^2 \frac{\sqrt{3}}{4} \left\{ C_+(\ell, m_y + 1) C_+(\ell, m_y) \delta_{m'_y, m_y + 2} + C_-(\ell, m_y - 1) C_-(\ell, m_y) \delta_{m'_y, m_y - 2} \right\}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

La implementación de la diagonalización en el caso general para cualquier valor de σ de las ecuaciones (3.9) - (3.11) proporciona los mismos eigenvalores, ya que éstos son independientes de la base que se elija. Éste método matricial permite una evaluación rápida, eficiente y precisa de los eigenvalores y eigenvectores de \hat{H}^* para los diferentes valores que toma $\sigma \in [0, \pi/3]$.

3.2. Algunos resultados numéricos ilustrativos

Para diagonalizar las anteriores matrices se realizó un programa de cómputo hecho en lenguaje Fortran y utilizando librerías de álgebra lineal cuya eficiencia y precisión están comprobadas [15].

3.2.1. Propiedades de los eigenvalores de \hat{H}^*

En las Figuras 3.1 y 3.2 al final de este Capítulo se presentan los eigenvalores como función de σ para valores de $\ell = 1, 2, 3, \dots, 9, 10, 20$ y 30 . Como puede verse en dichas figuras se tienen eigenvalores degenerados por pares cuando $\sigma = 0$ y $\sigma = \pi/3$ tal como se muestra en las ecuaciones (3.13) y (3.14).

Cabe mencionar que m ya no es un buen número para caracterizar las eigenfunciones de \hat{H}^* ya que éstas son combinaciones de armónicos esféricos. Por tal razón designamos los eigenvalores como $E_{\ell n}^*$ donde $n = 1, 2, 3, \dots, 2\ell + 1$.

Se identifica la simetría que tienen los eigenvalores en las Figuras 3.1 y 3.2 al girarlas 180° , y como puede verse al hacer esto no se produce cambio alguno en la distribución de los eigenvalores. Esta simetría también se refleja en las ecuaciones (3.13) y (3.14), y se expresa en general como:

$$E_{\ell n_1}^*(\sigma_1) = E_{\ell n_2}^*(\sigma_2) \quad , \quad \text{con} \quad \sigma_1 + \sigma_2 = \frac{\pi}{3} \quad \text{y} \quad n_1 + n_2 = 2\ell + 1 \quad . \quad (3.16)$$

Nótese que debido a esto tenemos que $E_{\ell n=\ell+1}^*(\sigma = \pi/6) = 0$. La expresión en la ecuación (3.16) que relaciona los índices de los eigenvalores E^* con el parámetro σ la llamaremos relación de “asimetría complementaria”, ya que el mismo valor numérico de E^* se cumple para dos paraámetros de asimetría. En las Tablas (3.1) y (3.2) de eigenvalores para $\ell = 4$ y 5 se muestran resultados numéricos de las digonalizaciones y se pueden observar las anteriores simetrías.

σ	0°	15°	30°	45°	60°
$\ell = 4$	n				
1	-5	-5.47325098638820	-6.24499799839840	-6.80266075251004	-7
2	-4.25	-5.33848116723779	-6.22708271177908	-6.80174863502247	-7
3	-4.25	-3.14800932210267	-2.29128784747792	-1.85391409659007	-1.75
4	-2	-1.97211950357713	-1.89695569285688	-1.80294726130505	-1.75
5	-2	-1.32940976612184	0	1.32940976612184	2
6	1.75	1.80294726130506	1.89695569285688	1.97211950357713	2
7	1.75	1.85391409659007	2.29128784747792	3.14800932210267	4.25
8	7	6.80174863502247	6.22708271177908	5.33848116723779	4.25
9	7	6.80266075251004	6.24499799839840	5.47325098638820	5

Tabla 3.1: Eigenvalores $E_{4n}^*(\sigma)/\hbar^2$ como función del parámetro σ .

σ	0°	15°	30°	45°	60°
$\ell = 5$	n				
1	-7.5	-8.53609003391197	-9.95422298349734	-10.9157869390600	-11.25
2	-6.75	-8.47438204173658	-9.94987437106620	-10.9156870109073	-11.25
3	-6.75	-5.30330085889910	-4.64443406791265	-4.50804116692859	-4.5
4	-4.5	-4.5	-4.5	-4.5	-4.5
5	-4.5	-3.21639483018463	-1.18540161279861	0.309185221261808	0.75
6	-0.75	-0.500162130901852	0	0.500162130901855	0.75
7	-0.75	-0.309185221261801	1.18540161279861	3.21639483018464	4.5
8	4.5	4.5	4.5	4.5	4.5
9	4.5	4.50804116692860	4.64443406791266	5.30330085889911	6.75
10	11.25	10.9156870109073	9.94987437106620	8.47438204173658	6.75
11	11.25	10.9157869390600	9.95422298349735	8.53609003391198	7.5

Tabla 3.2: Eigenvalores $E_{5n}^*(\sigma)/\hbar^2$ como función del parámetro σ .

3.2.2. Propiedades de los eigenvectores de \hat{H}^*

A partir de la diagonalización del operador \hat{H}^* se obtienen los eigenvectores que permiten escribir las soluciones en términos de armónicos esféricos. Los coeficientes $a_{\ell m}$ que se obtienen a partir de este método garantizan la normalización y ortogonalidad de las soluciones.

Por la estructura de \hat{H}^* sabemos que las soluciones tiene paridad bien definida. Incluso, la simetría identificada en la sección anterior que tiene que ver con ecuación (3.16) también es heredada por las eigenfunciones. En las Figuras 3.3 y 3.3 al final de este Capítulo se muestran las eigenfunciones correspondientes a $\ell = 4$ y 5 respectivamente, mismas que están en correspondencia con las Tablas 3.1 y 3.2. En la columna central de las Figuras se presenta el caso mas asimétrico con $\sigma = \pi/3$. También puede verse cómo se cumple la condición (3.16) pero las funciones apuntan en dirección distinta debido a que para $\sigma = 0$ son armónicos esféricos con eje azimutal en la dirección x , y para $\sigma = \pi/3$ el eje azimutal es en la dirección z .

La paridad de las soluciones es una propiedad de las eigenfunciones que no depende de la base utilizada o de la coordenadas. En las Figura 3.3 se observa cómo para la función a la mitad de la columna (5^{ta} función) para el caso más asimétrico ($\sigma = 30^\circ$) tienen paridad (+ + +), ya que al hacer el cambio ($x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$) la función queda igual. Esta misma paridad se observa en la primera y última función de la misma columna. Haciendo el mismo ejercicio de cambiar la paridad ($\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$) en la segunda y sexta función obtenemos que la paridad es (+ - -), ya que a lo largo de la dirección x la función no cambia de signo. Para la tercera y séptima función se obtiene que la paridad es (- + -), y para la cuarta y octava función la paridad es (- - +). Al anterior conjunto de funciones las agrupamos en cuatro especies de acuerdo a su paridad: 1, $u_y u_z$, $u_x u_z$ y $u_x u_y$, y forman un solo tipo de funciones que tienen ℓ par. Esta notación sobre especies y tipos de funciones es utiliza por Whittaker y Watson [20], y es muy útil ya que nos dice a lo largo de qué eje la función es impar o cambia de signo. En la Figura 3.3 ponemos la anterior notación del lado izquierdo como referencia sobre la especie a la que pertenece la función que está a lo largo de cada renglón.

Obteniendo las paridades para las funciones en la Figura 3.4 obtenemos que las funciones en el tercer, séptimo y décimo primer renglón la paridad es $(- + +)$, para las funciones en el segundo, sexto y décimo renglón tienen paridad $(+ - +)$, para las funciones en el primer, quinto y noveno renglón tienen paridad $(+ + -)$, y para las funciones en el cuarto y octavo renglón tienen paridad $(- - -)$. A estas funciones las agrupamos en otro tipo de funciones distintas a las del párrafo anterior con las siguientes especies: u_x , u_y , u_z y $u_x u_y u_z$, y se caracterizan por tener ℓ non.

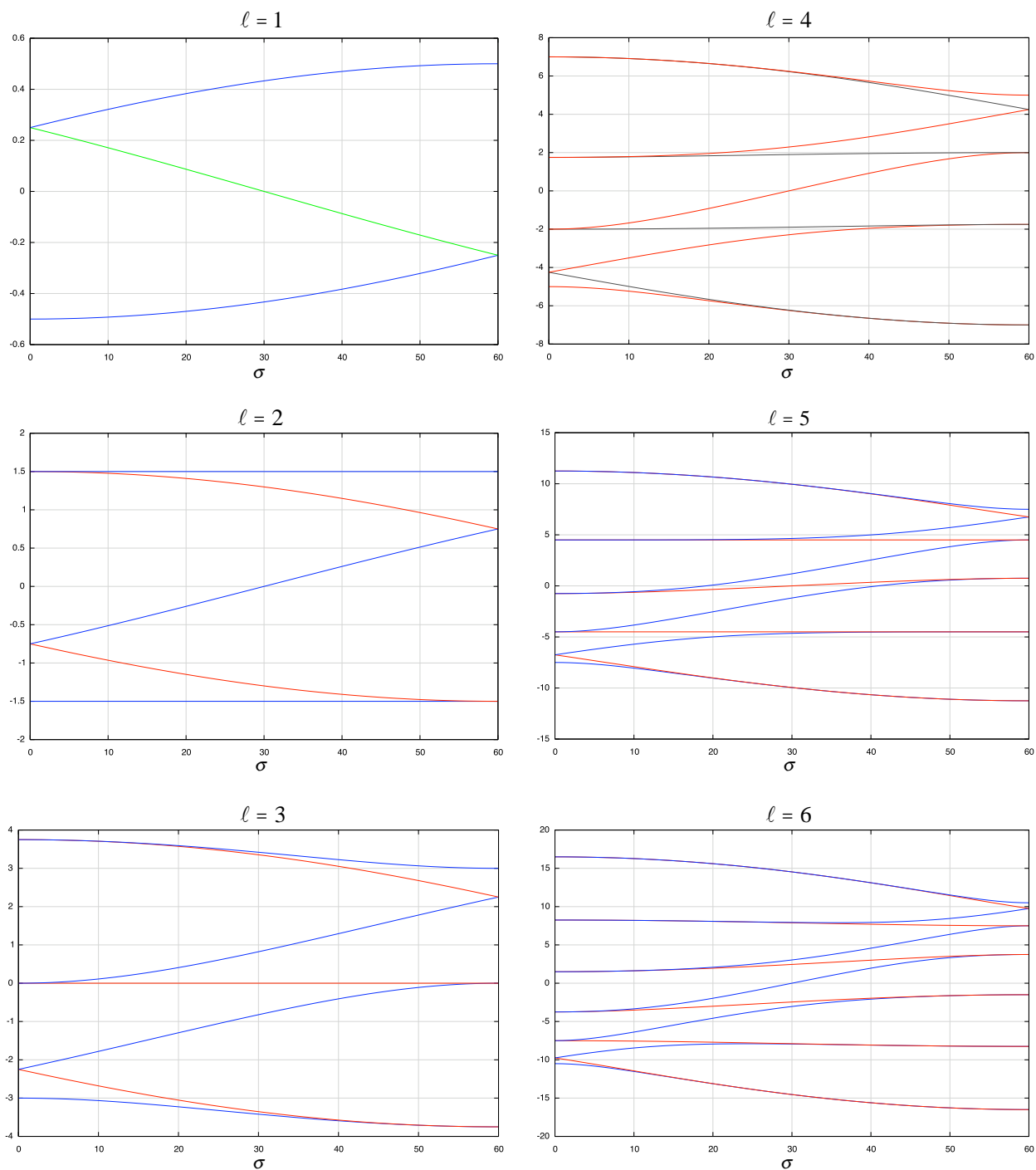


Figura 3.1: Eigenvalores como función del parámetro de asimetría σ . Se presentan gráficas para $\ell = 1, 2, 3, 4, 5$ y 6 .

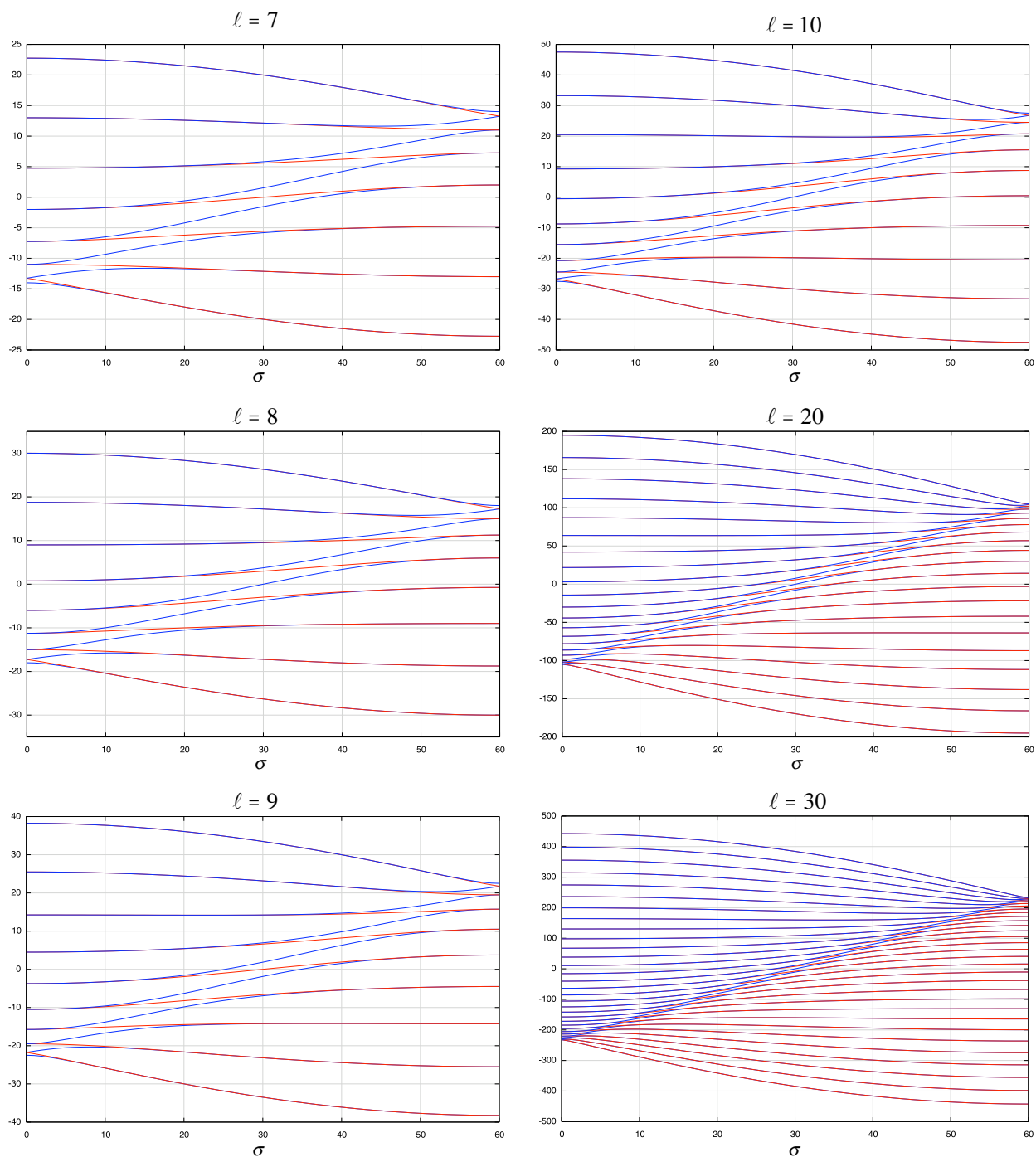


Figura 3.2: Eigenvalores como función del parámetro de asimetría σ . Se presentan gráficas para $l = 7, 8, 9, 10, 11$ y 12 .

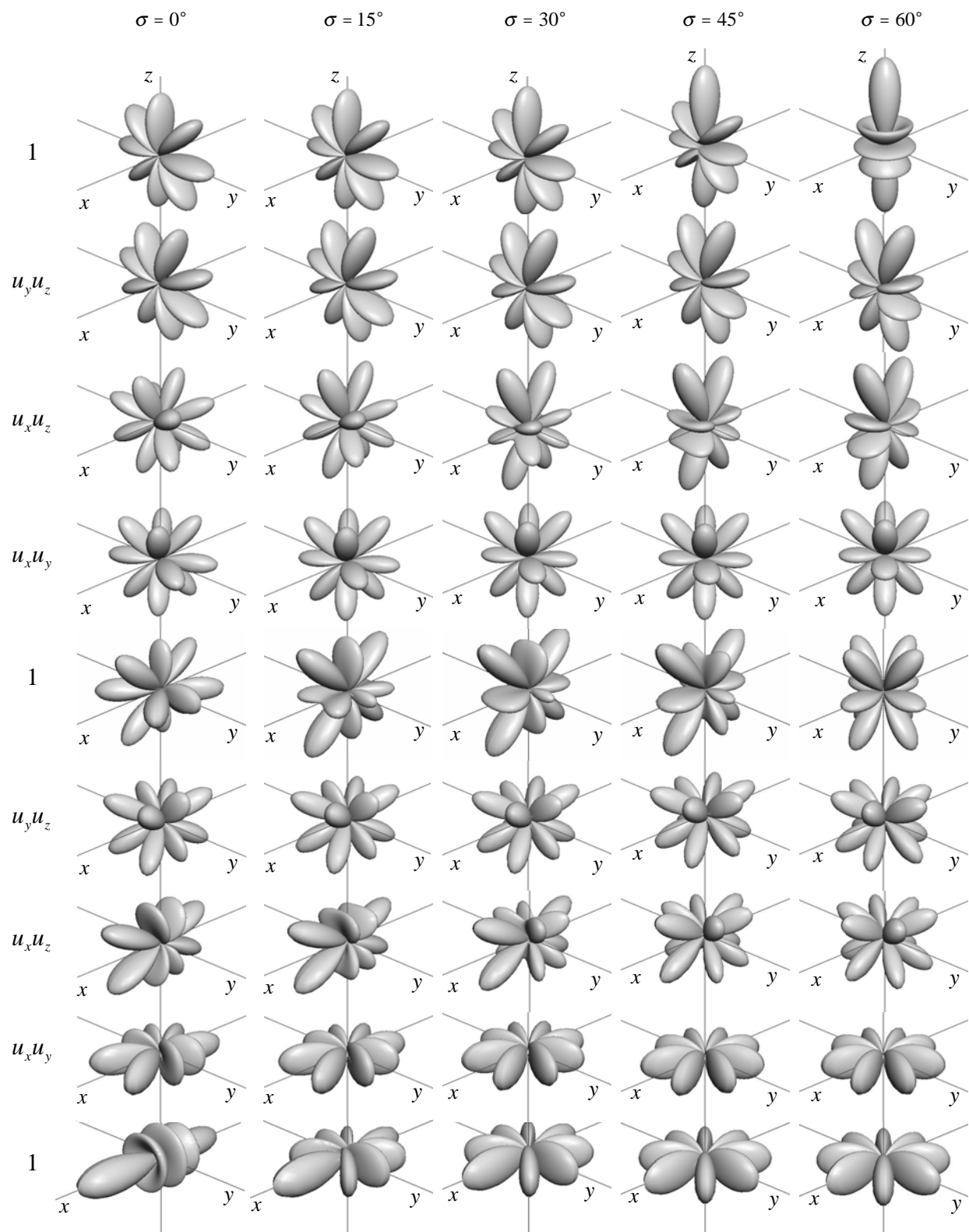


Figura 3.3: Eigenfunciones para $\ell = 4$ como función del parámetro σ .

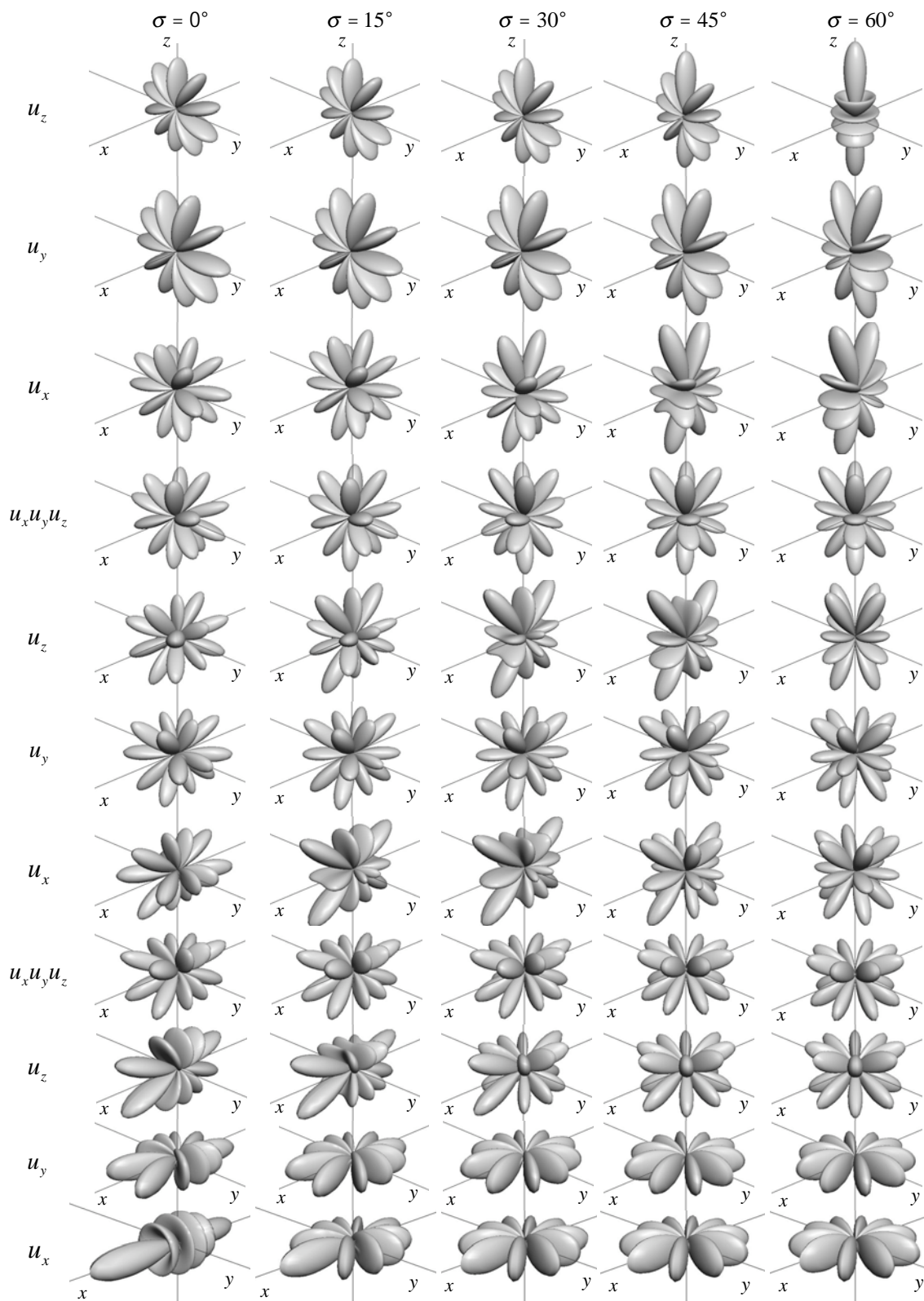


Figura 3.4: Eigenfunciones para $\ell = 5$ como función del parámetro σ .

Capítulo 4

Coordenadas esferoconales

En el presente Capítulo se hace una caracterización de las coordenadas esferoconales a través de funciones elípticas de Jacobi. También se construyen los operadores importantes para el estudio de los armónicos esferoconales en el Capítulo 5.

4.1. Funciones elípticas de Jacobi

Las funciones elípticas de Jacobi están definidas a través de la integral elíptica de primer orden:

$$u = f(\varphi, k) = \int_0^\varphi \frac{d\alpha}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha}} , \quad (4.1)$$

donde $k^2 \in [0, 1]$. Se define la amplitud de u como la función inversa de la ecuación anterior $f^{-1}(u, k) = am(u, k) = \varphi$. Esto permite definir las funciones elípticas de Jacobi de la siguiente forma:

$$\operatorname{sn}(u, k) = \sin \varphi , \quad (4.2)$$

$$\operatorname{cn}(u, k) = \cos \varphi = \sqrt{1 - \operatorname{sn}^2(u, k)} , \quad (4.3)$$

$$\operatorname{dn}(u, k) = \sqrt{1 - k^2 \operatorname{sn}^2(u, k)} = \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi} . \quad (4.4)$$

Estas funciones tienen periodo $4\mathbf{K}$, donde $\mathbf{K} = u(\pi/2, k)$. También, estas funciones se reducen a las funciones trigonométricas o hiperbólicas para valores extremos de k :

$$\begin{aligned} \operatorname{sn}(u, 0) &= \sin u , & \operatorname{sn}(u, 1) &= \tanh u , \\ \operatorname{cn}(u, 0) &= \cos u , & \operatorname{cn}(u, 1) &= \operatorname{sech} u , \\ \operatorname{dn}(u, 0) &= 1 , & \operatorname{dn}(u, 1) &= \operatorname{sech} u . \end{aligned} \quad (4.5)$$

La identificación anterior nos permite darnos una idea mucho mejor de como se comportan estas funciones. En la Figura 4.1 se muestran las funciones $\text{sn}(u, k)$, $\text{cn}(u, k)$ y $\text{dn}(u, k)$ para distintos valores de k .

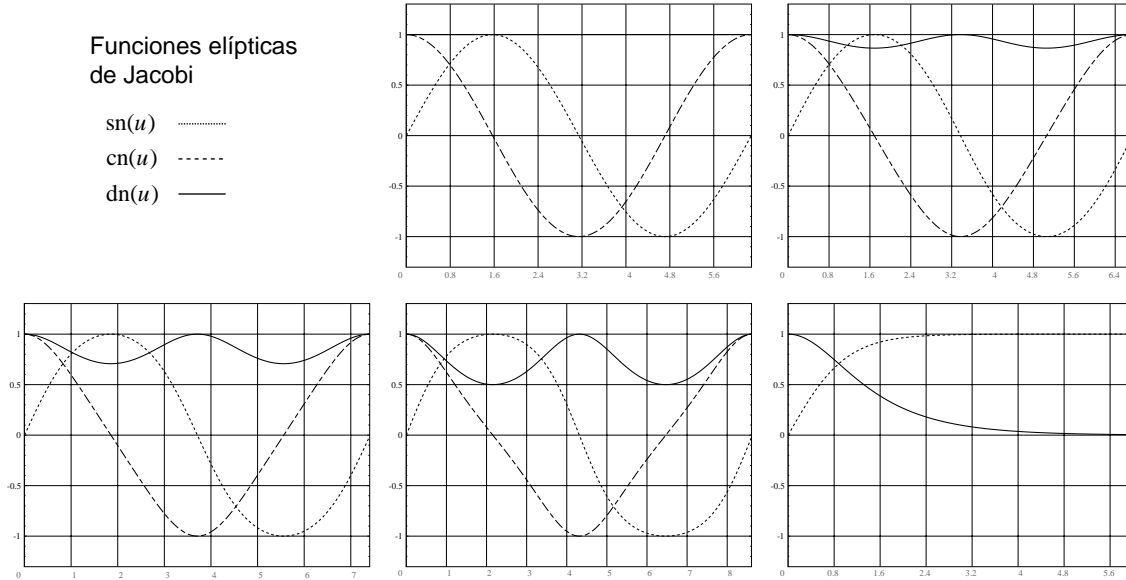


Figura 4.1: Funciones elípticas de Jacobi para diferentes parámetros de k . Arriba de izquierda a derecha funciones con valores de $k^2 = 0$ y $1/4$. Abajo de izquierda a derecha funciones con valores de $k^2 = 1/2, 3/4$ y 1 .

De las ecuaciones (4.3) y (4.4) se reconocen las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} \text{sn}^2(u, k) + \text{cn}^2(u, k) &= 1, \\ \text{dn}^2(u, k) + k^2 \text{sn}^2(u, k) &= 1. \end{aligned} \tag{4.6}$$

Finalmente las derivadas de las funciones elípticas de Jacobi son:

$$\begin{aligned} \frac{d}{du} \text{sn}(u, k) &= \text{cn}(u, k) \text{dn}(u, k), \\ \frac{d}{du} \text{cn}(u, k) &= -\text{sn}(u, k) \text{dn}(u, k), \\ \frac{d}{du} \text{dn}(u, k) &= -k^2 \text{sn}(u, k) \text{cn}(u, k). \end{aligned} \tag{4.7}$$

Un tratamiento más amplio sobre estas funciones se pueden encontrar en los libros *Handbook of Mathematical Functions* de M. Abramowitz [21] y en *A Course of Modern Analysis* de E. T. Whittaker [20]. Para nuestro interés las propiedades anteriores son suficientes para el desarrollo de este trabajo.

4.2. Las coordenadas esferoconales

Las coordenadas esferoconales están definidas por las ecuaciones de transformación a coordenadas cartesianas:

$$\begin{aligned} x &= r \operatorname{dn}(\chi_1, k_1) \operatorname{sn}(\chi_2, k_2) \\ y &= r \operatorname{cn}(\chi_1, k_1) \operatorname{cn}(\chi_2, k_2) \quad , \\ z &= r \operatorname{sn}(\chi_1, k_1) \operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde $\operatorname{sn}(\chi, k)$, $\operatorname{cn}(\chi, k)$ y $\operatorname{dn}(\chi, k)$ son las funciones elípticas de Jacobi. Al igual que en el sistema cartesiano se definen planos cuando alguna de las coordenadas se mantiene fija, las superficies que caracterizan a este sistema de coordenadas se obtienen al sumar los cuadrados de las ecuaciones (4.8) y utilizando las relaciones en (4.6):

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2 \quad , \quad (4.9)$$

con la restricción para k_1 y k_2 :

$$k_1^2 + k_2^2 = 1 \quad . \quad (4.10)$$

La ecuación (4.9) nos define una familia de esferas concéntricas de radio r para este sistema de coordenadas. La eliminación de las coordenadas χ_1 y χ_2 de las ecuaciones (4.8) utilizando las relaciones en (4.6) nos proporciona las siguientes ecuaciones:

$$\frac{x^2}{r^2 \operatorname{dn}^2(\chi_1, k_1)} + \frac{y^2}{r^2 \operatorname{cn}^2(\chi_1, k_1)} = 1 \quad , \quad (4.11)$$

$$\frac{y^2}{r^2 \operatorname{cn}^2(\chi_2, k_2)} + \frac{z^2}{r^2 \operatorname{dn}^2(\chi_2, k_2)} = 1 \quad , \quad (4.12)$$

las cuales describen las intersecciones respectivas de la esfera de radio r y las superficies definidas por χ_1 y χ_2 . Para r fija estas ecuaciones forman curvas sobre la esfera, algunas de las cuales se muestran en la Figura 4.2.

Utilizando la ecuación (4.9) en combinación con las ecuaciones (4.11) y (4.12) obtenemos relaciones que únicamente involucran a las variables χ_1 y χ_2 :

$$\frac{x^2 k_1^2 \operatorname{sn}^2(\chi_1, k_1)}{z^2 \operatorname{dn}^2(\chi_1, k_1)} + \frac{y^2 \operatorname{sn}^2(\chi_1, k_1)}{z^2 \operatorname{cn}^2(\chi_1, k_1)} = 1 \quad , \quad (4.13)$$

$$\frac{y^2 \operatorname{sn}^2(\chi_2, k_2)}{x^2 \operatorname{cn}^2(\chi_2, k_2)} + \frac{z^2 k_2^2 \operatorname{sn}^2(\chi_2, k_2)}{x^2 \operatorname{dn}^2(\chi_2, k_2)} = 1 \quad . \quad (4.14)$$

Estas dos ecuaciones definen conos elípticos con vértice en el origen para valores fijos de χ_1 y χ_2 , la ecuación (4.13) define un cono elíptico que abre lo largo del eje z , con semi eje mayor $z[\text{dn}(\chi_1, k_1)/k_1 \text{sn}(\chi_1, k_1)]$ en la dirección x y semi eje menor $z[\text{cn}(\chi_1, k_1)/\text{sn}(\chi_1, k_1)]$ en la dirección y . La ecuación (4.14) define un cono elíptico que abre a lo largo del eje x con semi eje mayor $x[\text{dn}(\chi_2, k_2)/k_2 \text{sn}(\chi_2, k_2)]$ en la dirección z y semi eje menor $x[\text{cn}(\chi_2, k_2)/\text{sn}(\chi_2, k_2)]$ en la dirección y . Con el desarrollo anterior tenemos caracterizadas las superficies de este sistema de coordenadas que se ilustran en la Figura 4.3.

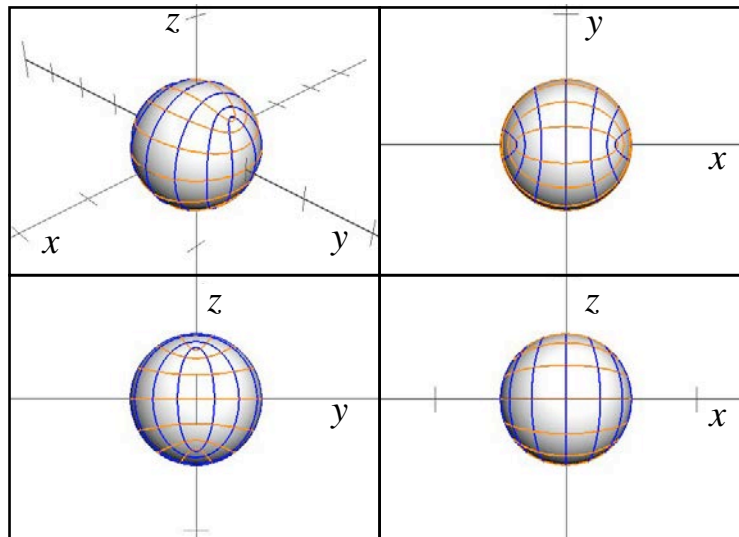


Figura 4.2: Curvas que determinan las variables χ_1 y χ_2 sobre la esfera. En la ilustración arriba se utilizó $k_1^2 = k_2^2 = 1/2$.

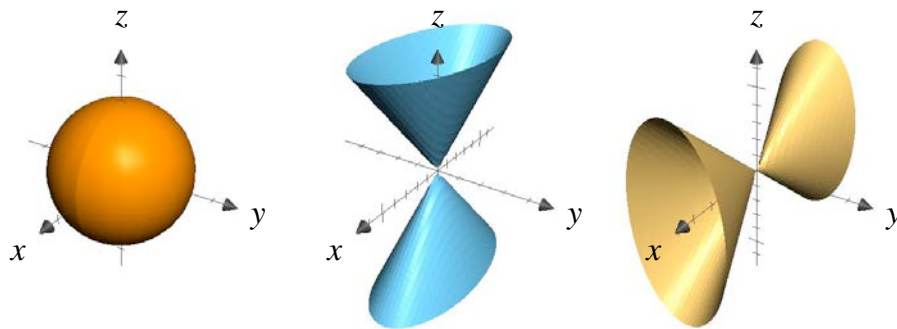


Figura 4.3: Se muestran las superficies que caracterizan a las coordenadas esferoconales. A la izquierda la esfera cuando la variable r se mantiene fija, en medio el cono elíptico orientado en la dirección z cuando χ_1 se mantiene fija y a la derecha el cono elíptico orientado en la dirección x cuando χ_2 se mantiene fija.

Utilizando las ecuaciones (4.7) y (4.8) podemos obtener el elemento diferencial de desplazamiento, para este sistema de coordenadas es:

$$\begin{aligned}
 d\vec{r} &= \hat{i}dx + \hat{j}dy + \hat{k}dz = \\
 &\begin{pmatrix} \operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2) \\ \operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2) \\ \operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \end{pmatrix} dr + \begin{pmatrix} -k_1^2\operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2) \\ -\operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2) \\ \operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \end{pmatrix} rd\chi_1 \\
 &+ \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \\ -\operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \\ -k_2^2\operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2) \end{pmatrix} rd\chi_2 \quad ,
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

de donde se pueden identificar los factores de escala:

$$\begin{aligned}
 h_r &= 1 \quad , \\
 h_{\chi_1} &= h_{\chi_2} = h_\chi = r\sqrt{1 - k_1^2\operatorname{sn}(\chi_1, k_1) - k_2^2\operatorname{sn}(\chi_2, k_2)} \quad .
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

y los vectores unitarios:

$$\begin{aligned}
 \hat{r} &= \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2) \\ \operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2) \\ \operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \end{pmatrix} \quad , \\
 \hat{\chi}_1 &= \frac{r}{h_\chi} \begin{pmatrix} -k_1^2\operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2) \\ -\operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2) \\ \operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \end{pmatrix} \quad , \\
 \hat{\chi}_2 &= \frac{r}{h_\chi} \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \\ -\operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \\ -k_2^2\operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2) \end{pmatrix} \quad .
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Estos vectores apuntan en dirección perpendicular al plano tangente de las superficies que se muestran en la Figura 4.3 y juegan un papel similar a los vectores unitarios \hat{r} , $\hat{\theta}$ y $\hat{\phi}$ que se tienen en coordenadas esféricas. Para encontrar la relación entre las derivadas parciales en coordenadas cartesianas y esferoconales identificamos de la ecuación (4.15) la matriz Jacobiana de la transformación:

$$J = \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2) & \operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2) & \operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \\ -k_1^2 r \operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2) & -r \operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2) & r \operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) \\ r \operatorname{dn}(\chi_1, k_1)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) & -r \operatorname{cn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2)\operatorname{dn}(\chi_2, k_2) & -k_2^2 r \operatorname{sn}(\chi_1, k_1)\operatorname{sn}(\chi_2, k_2)\operatorname{cn}(\chi_2, k_2) \end{pmatrix} \quad , \tag{4.18}$$

y la inversa de esta matriz es:

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} \operatorname{dn}(\chi_1, k_1) \operatorname{sn}(\chi_2, k_2) & \frac{-k_1^2 r \operatorname{sn}(\chi_1, k_1) \operatorname{cn}(\chi_1, k_1) \operatorname{sn}(\chi_2, k_2)}{h_\chi^2} & \frac{r \operatorname{dn}(\chi_1, k_1) \operatorname{cn}(\chi_2, k_2) \operatorname{dn}(\chi_2, k_2)}{h_\chi^2} \\ \operatorname{cn}(\chi_1, k_1) \operatorname{cn}(\chi_2, k_2) & \frac{-r \operatorname{sn}(\chi_1, k_1) \operatorname{dn}(\chi_1, k_1) \operatorname{cn}(\chi_2, k_2)}{h_\chi^2} & \frac{-r \operatorname{cn}(\chi_1, k_1) \operatorname{sn}(\chi_2, k_2) \operatorname{dn}(\chi_2, k_2)}{h_\chi^2} \\ \operatorname{sn}(\chi_1, k_1) \operatorname{dn}(\chi_2, k_2) & \frac{r \operatorname{cn}(\chi_1, k_1) \operatorname{dn}(\chi_1, k_1) \operatorname{dn}(\chi_2, k_2)}{h_\chi^2} & \frac{-k_2^2 r \operatorname{sn}(\chi_1, k_1) \operatorname{sn}(\chi_2, k_2) \operatorname{cn}(\chi_2, k_2)}{h_\chi^2} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

4.3. Operadores importantes en coordenadas esferoconales

El operador que nos interesa estudiar en este sistema de coordenadas es el Laplaciano, el cual con el desarrollo anterior toma la siguiente forma:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 (1 - k_1^2 \operatorname{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \operatorname{sn}^2(\chi_2, k_2))} \left(\frac{\partial^2}{\partial \chi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \chi_2^2} \right). \quad (4.20)$$

Si comparamos con el mismo operador en coordenadas esféricas del Apéndice A, ecuación (A.17), reconocemos el siguiente operador:

$$\hat{L}^2 = - \frac{\hbar^2}{1 - k_1^2 \operatorname{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \operatorname{sn}^2(\chi_2, k_2)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \chi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \chi_2^2} \right), \quad (4.21)$$

que se conoce como el operador de cuadrado de momento angular y sólo involucra las coordenadas angulares del Laplaciano. De aquí en adelante consideramos el coeficiente \hbar debido a que el origen del problema que se aborda en este trabajo tiene sus orígenes en la Mecánica Cuántica. Nótese que a diferencia del mismo operador en coordenadas esféricas, en este caso las segundas derivadas parciales respecto de χ_1 y χ_2 tienen un factor común como resultado de que los factores de escala h_{χ_1} y h_{χ_2} son iguales.

En esta tesis nos interesan las rotaciones infinitesimales, y por ello otros operadores importantes que utilizaremos son las componentes cartesianas del momento angular definidas por:

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} x_j \hat{p}_k, \quad (4.22)$$

donde se utiliza la convención de suma sobre índices repetidos, ε_{ijk} es el tensor antisimétrico de Levi-Civita que es 1 cuando es una permutación par de los índices (1, 2, 3), -1 cuando es una permutación impar y cero cuando algún índice es repetido. x_j son las componentes del vector posición ($x_1 = x$, $x_2 = y$ y $x_3 = z$) y \hat{p}_k son las componentes del operador gradiente multiplicadas por $-i\hbar$:

$$\hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}. \quad (4.23)$$

La forma explícita de los operadores de momento angular en coordenadas cartesianas se encuentra en las ecuaciones (2.2) - (2.4) del Capítulo 1. Estos operadores lineales forman un álgebra de Lie ya que tienen las siguientes reglas de conmutación:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad , \quad (4.24)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0 \quad . \quad (4.25)$$

Utilizando las ecuaciones en (4.8) y (4.19) las componentes cartesianas del momento angular en coordenadas esferoconales toman la siguiente forma:

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(\frac{\text{cn}(\chi_2, k_2) \text{dn}(\chi_1, k_1) \text{dn}(\chi_2, k_2)}{1 - k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2)} \frac{\partial}{\partial \chi_1} + \frac{k_1^2 \text{sn}(\chi_1, k_1) \text{sn}(\chi_2, k_2) \text{cn}(\chi_1, k_1)}{1 - k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2)} \frac{\partial}{\partial \chi_2} \right) , \quad (4.26)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(\frac{\text{sn}(\chi_1, k_1) \text{cn}(\chi_2, k_2) \text{dn}(\chi_1, k_1)}{1 - k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2)} \frac{\partial}{\partial \chi_2} - \frac{\text{cn}(\chi_1, k_1) \text{sn}(\chi_2, k_2) \text{dn}(\chi_2, k_2)}{1 - k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2)} \frac{\partial}{\partial \chi_1} \right) , \quad (4.27)$$

$$\hat{L}_z = i\hbar \left(\frac{k_2^2 \text{sn}(\chi_1, k_1) \text{sn}(\chi_2, k_2) \text{cn}(\chi_2, k_2)}{1 - k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2)} \frac{\partial}{\partial \chi_1} + \frac{\text{cn}(\chi_1, k_1) \text{dn}(\chi_1, k_1) \text{dn}(\chi_2, k_2)}{1 - k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2)} \frac{\partial}{\partial \chi_2} \right) . \quad (4.28)$$

Obsérvese que a diferencia de los mismos operadores en coordenadas esféricas, éstos presentan una mayor simetría respecto al intercambio de las variables $\chi_1 \rightarrow \chi_2$ y $k_1 \rightarrow k_2$. Bajo dicho cambio tenemos que $\hat{L}_x \rightarrow -\hat{L}_z$ y $\hat{L}_y \rightarrow -\hat{L}_y$.

Evidentemente a las eigenfunciones de la ecuación (4.21) se les llama armónicos esferoconales, al igual que en coordenadas esféricas se les llama armónicos esféricos, y el estudio de estas soluciones se detalla en los siguientes capítulos. Estos armónicos esferoconales permiten resolver el trompo asimétrico en su versión cuántica en forma separable.

Rotaciones del trompo cuántico asimétrico con evaluación matricial de funciones de Lamé

En el Capítulo 3 se partió del trompo cuántico asimétrico para el estudio de los armónicos esferoconales, construyendo las soluciones en términos de armónicos esféricos. En este Capítulo se hace ver que las soluciones encontradas son los armónicos esferoconales, y en esta sección los estudiamos en su propia representación como resultado de utilizar directamente el cambio de coordenadas expuesto en el Capítulo 4.

5.1. Separación y solución de la ecuación de Schrödinger $\hat{H}^*\Psi = E^*\Psi$ en coordenadas esferoconales

El operador \hat{H}^* en la ecuación (2.23) representa la parte asimétrica del Hamiltoniano. Utilizando los operadores de momento angular en coordenadas esferoconales que se expresan en las ecuaciones (4.26) - (4.28) obtenemos que \hat{H}^* se escribe de la siguiente forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2(1 - k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2))} \left((e_1 - (e_1 - e_2) \text{sn}^2(\chi_2, k_2)) \frac{\partial^2}{\partial \chi_1^2} + (e_3 + (e_2 - e_3) \text{sn}^2(\chi_1, k_1)) \frac{\partial^2}{\partial \chi_2^2} \right) \Psi = E^* \Psi , \quad (5.1)$$

donde se seleccionan:

$$k_1^2 = \frac{e_2 - e_3}{e_1 - e_3} , \quad k_2^2 = \frac{e_1 - e_2}{e_1 - e_3} , \quad (5.2)$$

para eliminar las derivadas de primer orden respecto de χ_1 y χ_2 . Además esta condición es consistente con la ecuación (4.10), misma que se utilizó para caracterizar las coordenadas esferoconales. La elección anterior de k_1^2 y k_2^2 permite escribir el factor que es común a \hat{H}^* y a \hat{L}^2 de la siguiente manera:

$$1 - k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2) = \frac{1}{e_1 - e_3} \left[-e_3 - (e_2 - e_3) \text{sn}^2(\chi_1, k_1) + e_1 - (e_1 - e_3) \text{sn}^2(\chi_2, k_2) \right] . \quad (5.3)$$

Los binomios sucesivos dentro de los corchetes se identifican con la forma de Weierstrass para las funciones elípticas. La ecuación de eigenvalores del operador de cuadrado de momento angular se obtiene usando la ecuación (4.21):

$$-\frac{\hbar^2}{1 - k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \chi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \chi_2^2} \right) \Psi = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \Psi . \quad (5.4)$$

Las ecuaciones de eigenvalores (5.1) y (5.4) admiten soluciones comunes factorizables:

$$\Psi(\chi_1, \chi_2) = \Lambda_1(\chi_1) \Lambda_2(\chi_2) . \quad (5.5)$$

La sustitución de este tipo de solución en las ecuaciones (5.1) y (5.4) conduce a exhibir la separabilidad de ambas, tomando las formas respectivas:

$$\frac{1}{(e_3 + (e_2 - e_3) \text{sn}^2(\chi_1, k_1))} \left(\frac{1}{\Lambda_1} \frac{d^2 \Lambda_1}{d \chi_1^2} + \frac{2E^*}{\hbar^2 (e_1 - e_3)} \right) + \frac{1}{(e_1 - (e_1 - e_2) \text{sn}^2(\chi_2, k_2))} \left(\frac{1}{\Lambda_2} \frac{d^2 \Lambda_2}{d \chi_2^2} - \frac{2E^*}{\hbar^2 (e_1 - e_3)} \right) = 0 , \quad (5.6)$$

$$\left(\frac{1}{\Lambda_1} \frac{d^2 \Lambda_1}{d \chi_1^2} - \ell(\ell + 1) k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) - \frac{\ell(\ell + 1) e_3}{e_1 - e_3} \right) + \left(\frac{1}{\Lambda_2} \frac{d^2 \Lambda_2}{d \chi_2^2} - \ell(\ell + 1) k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2) + \frac{\ell(\ell + 1) e_1}{e_1 - e_3} \right) = 0 , \quad (5.7)$$

donde se ha usado la ecuación (5.3).

Las ecuaciones (5.6) y (5.7) representan un sistema algebraico de ecuaciones acopladas tomando como incógnitas a las segundas derivadas parciales respecto de χ_1 y χ_2 . Al resolver

el anterior sistema de ecuaciones se obtiene el siguiente par de ecuaciones diferenciales de segundo orden:

$$\frac{d^2 \Lambda_1}{d\chi_1^2} - \left(\ell(\ell + 1)k_1^2 \text{sn}^2(\chi_1, k_1) + \frac{\ell(\ell + 1)e_3}{e_1 - e_3} - \frac{2E^*}{\hbar^2(e_1 - e_3)} \right) \Lambda_1 = 0 , \quad (5.8)$$

$$\frac{d^2 \Lambda_2}{d\chi_2^2} - \left(\ell(\ell + 1)k_2^2 \text{sn}^2(\chi_2, k_2) - \frac{\ell(\ell + 1)e_1}{e_1 - e_3} + \frac{2E^*}{\hbar^2(e_1 - e_3)} \right) \Lambda_2 = 0 . \quad (5.9)$$

Nótese que ambas ecuaciones tienen la forma de la ecuación de Lamé [20]:

$$\frac{d^2 \Lambda_i}{d\chi_i^2} - \left(\ell(\ell + 1)k_i^2 \text{sn}^2(\chi_i, k_i) + h_i \right) \Lambda_i = 0 , \quad (5.10)$$

con sus respectivos eigenvalores:

$$h_1 = \frac{\ell(\ell + 1)e_3}{e_1 - e_3} - \frac{2E^*}{\hbar^2(e_1 - e_3)} , \quad (5.11)$$

$$h_2 = -\frac{\ell(\ell + 1)e_1}{e_1 - e_3} + \frac{2E^*}{\hbar^2(e_1 - e_3)} . \quad (5.12)$$

Las combinaciones de estos dos eigenvalores nos proporcionan los eigenvalores para las ecuaciones (5.1) y (5.4):

$$h_1 + h_2 = -\ell(\ell + 1) , \quad (5.13)$$

$$e_1 h_1 + e_3 h_2 = -\frac{2E^*}{\hbar^2} . \quad (5.14)$$

5.2. Evaluación matricial de funciones de Lamé

En esta sección obtenemos las soluciones de la ecuación de Lamé en (5.10) por medio de un método matricial. Hay que notar que las derivadas de las funciones elípticas de Jacobi son las singularidades removibles de la ecuación de Lamé, es decir que las singularidades son $\text{sn}(\chi, k)$, $\text{cn}(\chi, k)$ y $\text{dn}(\chi, k)$, junto con sus respectivas combinaciones. Debido a que la ecuación de Lamé tiene el cuadrado de $\text{sn}(\chi, k)$ podemos proponer como solución una expansión en series de potencias pares de funciones elípticas de Jacobi tipo $\text{sn}(\chi, k)$ junto con su respectivo factor de singularidad. Este proceso nos arroja una relación de recurrencia de tres términos para los coeficientes de la expansión en serie, mismos que se pueden expresar en términos matriciales.

Ello permite diagonalizar una matriz que nos proporciona los eigenvalores h y los eigenvectores que son los coeficientes de la expansión en serie.¹

Los factores de singularidad que se identifican los denotaremos por el superíndice $A = 1, s, c, d, sd, cd$ y scd , mismo que nos proporciona las ocho especies de funciones de Lamé:

$$\Lambda^1 = \sum_p a_p^1 \text{sn}^{2p}(\chi, k) \quad , \quad (5.15)$$

$$\Lambda^s = \text{sn}(\chi, k) \sum_p a_p^s \text{sn}^{2p}(\chi, k) \quad , \quad (5.16)$$

$$\Lambda^c = \text{cn}(\chi, k) \sum_p a_p^c \text{sn}^{2p}(\chi, k) \quad , \quad (5.17)$$

$$\Lambda^d = \text{dn}(\chi, k) \sum_p a_p^d \text{sn}^{2p}(\chi, k) \quad , \quad (5.18)$$

$$\Lambda^{sc} = \text{cn}(\chi, k) \text{sn}(\chi, k) \sum_p a_p^{sc} \text{sn}^{2p}(\chi, k) \quad , \quad (5.19)$$

$$\Lambda^{sd} = \text{dn}(\chi, k) \text{sn}(\chi, k) \sum_p a_p^{sd} \text{sn}^{2p}(\chi, k) \quad , \quad (5.20)$$

$$\Lambda^{cd} = \text{dn}(\chi, k) \text{cn}(\chi, k) \sum_p a_p^{cd} \text{sn}^{2p}(\chi) \quad , \quad (5.21)$$

$$\Lambda^{scd} = \text{dn}(\chi, k) \text{cn}(\chi, k) \text{sn}(\chi, k) \sum_p a_p^{scd} \text{sn}^{2p}(\chi, k) \quad . \quad (5.22)$$

La sustitución de las anteriores series de potencias en la ecuación (5.10) nos proporciona las relaciones de recurrencia para los coeficientes a_N^A :

$$\begin{aligned} (2N+1)(2N+2)a_{N+1}^1 & - [(1+k^2)(2N)^2 + h] a_N^1 \\ & + k^2 [(2N-2)(2N-1) - \ell(\ell+1)] a_{N-1}^1 = 0 \quad , \end{aligned} \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned} (2N+2)(2N+3)a_{N+1}^s & - [(1+k^2)(2N+1)^2 + h] a_N^s \\ & + k^2 [(2N-1)(2N) - \ell(\ell+1)] a_{N-1}^s = 0 \quad , \end{aligned} \quad (5.24)$$

¹Un tratamiento estándar sobre funciones de Lamé se puede encontrar en el Whittaker y Watson [20].

$$\begin{aligned}
 & (2N+1)(2N+2)a_{N+1}^c \\
 & - [(2N+1)^2 + k^2(2N)^2 + h] a_N^c \\
 & + k^2[(2N-1)(2N) - \ell(\ell+1)] a_{N-1}^c = 0,
 \end{aligned} \tag{5.25}$$

$$\begin{aligned}
 & (2N+1)(2N+2)a_{N+1}^d \\
 & - [(2N)^2 + k^2(2N+1)^2 + h] a_N^d \\
 & + k^2[(2N-1)(2N) - \ell(\ell+1)] a_{N-1}^d = 0,
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

$$\begin{aligned}
 & (2N+2)(2N+3)a_{N+1}^{sc} \\
 & - [k^2(2N+1)^2 + (2N+2)^2 + h] a_N^{sc} \\
 & + k^2[2N(2N+1) - \ell(\ell+1)] a_{N-1}^{sc} = 0,
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

$$\begin{aligned}
 & (2N+2)(2N+3)a_{N+1}^{sd} \\
 & - [k^2(2N+2)^2 + (2N+1)^2 + h] a_N^{sd} \\
 & + k^2[2N(2N+1) - \ell(\ell+1)] a_{N-1}^{sd} = 0,
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

$$\begin{aligned}
 & (2N+1)(2N+2)a_{N+1}^{cd} \\
 & - [(1+k^2)(2N+1)^2 + h] a_N^{cd} \\
 & + k^2[(2N(2N+1) - \ell(\ell+1))] a_{N-1}^{cd} = 0,
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

$$\begin{aligned}
 & (2N+2)(2N+3)a_{N+1}^{scd} \\
 & - [(1+k^2)(2N+2)^2 + h] a_N^{scd} \\
 & + k^2[(2N+1)(2N+2) - \ell(\ell+1)] a_{N-1}^{scd} = 0.
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

Estas relaciones de recurrencia las interpretamos como matrices tridiagonales en donde los coeficientes a_N^A son los vectores propios de la matriz con eigenvalor h . Este método matricial se introdujo en conexión con la evaluación de los estados electrónicos del ión molecular de Hidrógeno [17], y se ha implementado con éxito para la evaluación matricial de las funciones de Mathieu [16] y [26].

Obsérvese que las matrices encontradas son de dimensión finita, ya que cuando el término que depende de N en el elemento de matriz que acompaña a a_{N-1}^A alcanza el valor $\ell(\ell+1)$ la matriz se trunca. Lo anterior nos proporciona los dos tipos de funciones de Lamé, ya que para ℓ par las matrices con $A = 1, sc, sd$ y cd se truncan, mientras que para ℓ non las matrices con $A = s, c, d$ y scd hacen lo propio. En consecuencia las soluciones propuestas en las ecuaciones (5.15) - (5.22) se convierten en los polinomios de Lamé. Lo anterior es similar a lo que sucede con los polinomios de Legendre en el caso de los armónicos esféricos. El último término

en las relaciones de recurrencia también nos proporciona la dimensión de las matrices encontradas ($N_{max} \times N_{max}$). Para ℓ par la ecuación (5.23) y las ecuaciones (5.27) - (5.29) tienen las siguientes dimensiones respectivamente:

$$N_{m\acute{a}x}^1 = \frac{\ell}{2} + 1 \quad \text{y} \quad N_{m\acute{a}x}^{sc} = N_{m\acute{a}x}^{sd} = N_{m\acute{a}x}^{cd} = \frac{\ell}{2} \quad , \quad (5.31)$$

dando como resultado un total de $\frac{\ell}{2} + 1 + \frac{3\ell}{2} = 2\ell + 1$ soluciones linealmente independientes. De la misma manera tenemos que para ℓ non las ecuaciones (5.24) - (5.26) y la ecuación (5.30) determinan las siguientes dimensiones respectivamente:

$$N_{m\acute{a}x}^s = N_{m\acute{a}x}^c = N_{m\acute{a}x}^d = \frac{\ell + 1}{2} \quad \text{y} \quad N_{m\acute{a}x}^{scd} = \frac{\ell - 1}{2} \quad , \quad (5.32)$$

y dando nuevamente $\frac{3(\ell+1)}{2} + \frac{\ell-1}{2} = 2\ell + 1$ soluciones linealmente independientes.

5.2.1. Propiedades de los eigenvalores de funciones de Lamé

Nótese que las matrices en las ecuaciones (5.23) - (5.30) no son simétricas. Para su diagonalización se hizo un programa de cómputo escrito en lenguaje Fortran y utilizando algunas rutinas LAPACK y del Numerical Recipes [24]. El que la dimensión de las matrices a diagonalizar sea finita hace que los cálculos de los eigenvalores h^A y de los eigenvectores a_N^A se puedan hacer de manera eficiente y precisa. En las Tablas 5.1 y 5.2 se muestran los eigenvalores h^A para $\ell = 4$ y 5 como función de k^2 , misma que a su vez está en función de σ a través de la ecuación (5.2). Los valores que se presentan en las Tablas 5.1 y 5.2 son para valores de $k^2 = 0, 0,2679491924311, 0,5, 0,7320508075688$ y 1, que corresponden a valores de $\sigma = 0, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, \text{ y } 60^\circ$ que se presentaron en el Capítulo anterior.

En la Tablas 5.1 y 5.2 aparecen los $2\ell + 1$ eigenvalores h^A ordenados de menor a mayor, y estos valores los enumeramos con el subíndice n ($h^A \rightarrow h_n^A$). La ecuación (5.13) se satisface si se toman los eigenvalores h_n^A tales que los subíndices n cumplan con la siguiente restricción:

$$n_1(k_1) + n_2(k_2) = 2\ell + 1 \quad \text{con la condición:} \quad k_1^2 + k_2^2 = 1 \quad , \quad (5.33)$$

determinando las especies de funciones de Lamé (denotadas por el superíndice A) que se deben tomar para garantizar que se satisfacen las ecuaciones (5.1) y (5.4). En este caso decimos que cuando se cumple con la condición en (5.33) se tienen funciones de Lamé complementarias.

Las funciones de Lamé complementarias las denotamos como $\Lambda^A \rightarrow \Lambda_t^A$, donde t cuenta el número de ceros que tiene la función. Este número viene jugando un papel parecido al número m que tienen los armónicos esféricos.

Con el desarrollo anterior la ecuación (5.14) nos proporciona los mismos valores de E^*/\hbar^2 tabulados en las Tablas (3.1) y (3.2) del Capítulo anterior que fueron calculados con otro método matricial distinto al utilizado en este Capítulo.

k^2	0	0.2679491924311	0.5	0.7320508075688	1
1	-16	-16.5851262965012	-17.2111025121022	-18.0899154478468	-20
sc	-16	-16.5840359204396	-17.1904157236340	-17.9288070427514	-19
sd	-9	-10.6692264277499	-12.6457511848807	-15.3102425028777	-19
cd	-9	-10.6082989483587	-12.1904156698290	-13.9045439338914	-16
1	-4	-6.8637729178446	-10	-13.1362268286893	-16
sc	-4	-6.0954559153276	-7.8095841501821	-9.3917009234711	-11
sd	-1	-4.6897572437845	-7.3542485627514	-9.3307734295673	-11
cd	-1	-2.0711928874085	-2.8095842039871	-3.4159640323311	-4
1	0	-1.9100844571886	-2.7888974102462	-3.4148736559090	-4

Tabla 5.1: Eigenvalores h^A para $\ell = 4$.

k^2	0	0.2679491924311	0.5	0.7320508075688	1
s	-25	-25.7285943365901	-26.4941465914849	-27.5248399518695	-30
c	-25	-25.7284748791048	-26.4891252471910	-27.4510721308369	-29
d	-16	-18.0685573651675	-20.3629303726905	-23.6602538501924	-29
scd	-16	-18.0589446825257	-20.1961522965227	-22.6999607822317	-26
s	-9	-12.3098812782257	-16.3687836315523	-21.1654954654817	-26
c	-9	-12.0815810174275	-15	-17.918418739595	-21
d	-4	-8.8345041215966	-13.6312158705639	-17.6901184271086	-21
scd	-4	-7.3000389890087	-9.8038474511094	-11.9410551502134	-14
s	-1	-6.3397458103695	-9.6370693353190	-11.9314424644276	-14
c	-1	-2.5489277750021	-3.5108746610388	-4.2715250620129	-5
d	0	-2.4751599384210	-3.5058533151019	-4.2714056044777	-5

Tabla 5.2: Eigenvalores h^A para $\ell = 5$.

5.2.2. Propiedades de las eigenfunciones de Lamé

En las Figuras 5.1 y 5.2 se muestran las funciones de Lamé $\Lambda_i^A(\chi, k)$ para $\ell = 4$ y $\ell = 5$ respectivamente. Se presentan las funciones en el intervalo $0 \leq \text{am}(\chi) \leq \pi/2$ para valores de $k^2 = 0, 0,2679491924311, 0,5, 0,7320508075688$ y 1 , mismos que corresponden a los valores de $\sigma = 0, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ y 60° que se utilizaron en el Capítulo anterior. Nótese que todas las funciones que contienen la letra s en el superíndice A tienen en común un nodo en $\chi = 0$ para cualquier valor de k , ya que a éstas se les ha factorizado la singularidad $\text{sn}(\chi, k)$. De igual manera las funciones que contienen la letra c en el superíndice A tienen en común un nodo en $\chi = \pi/2$. Para las funciones que contienen la letra d en el superíndice A terminan con pendiente cero en los extremos siempre y cuando no se trate de un nodo, lo cual se debe a que la función $\text{dn}(\chi, k)$ nunca es cero, excepto cuando $k = 1$. De hecho en el caso es el que $k = 1$ la función $\text{dn}(\chi, k)$ es igual a $\text{cn}(\chi, k)$ como se puede ver en la ecuación (4.5). También se observa el incremento de número de nodos cuando se incrementa el subíndice n del eigenvalor h_n^A .

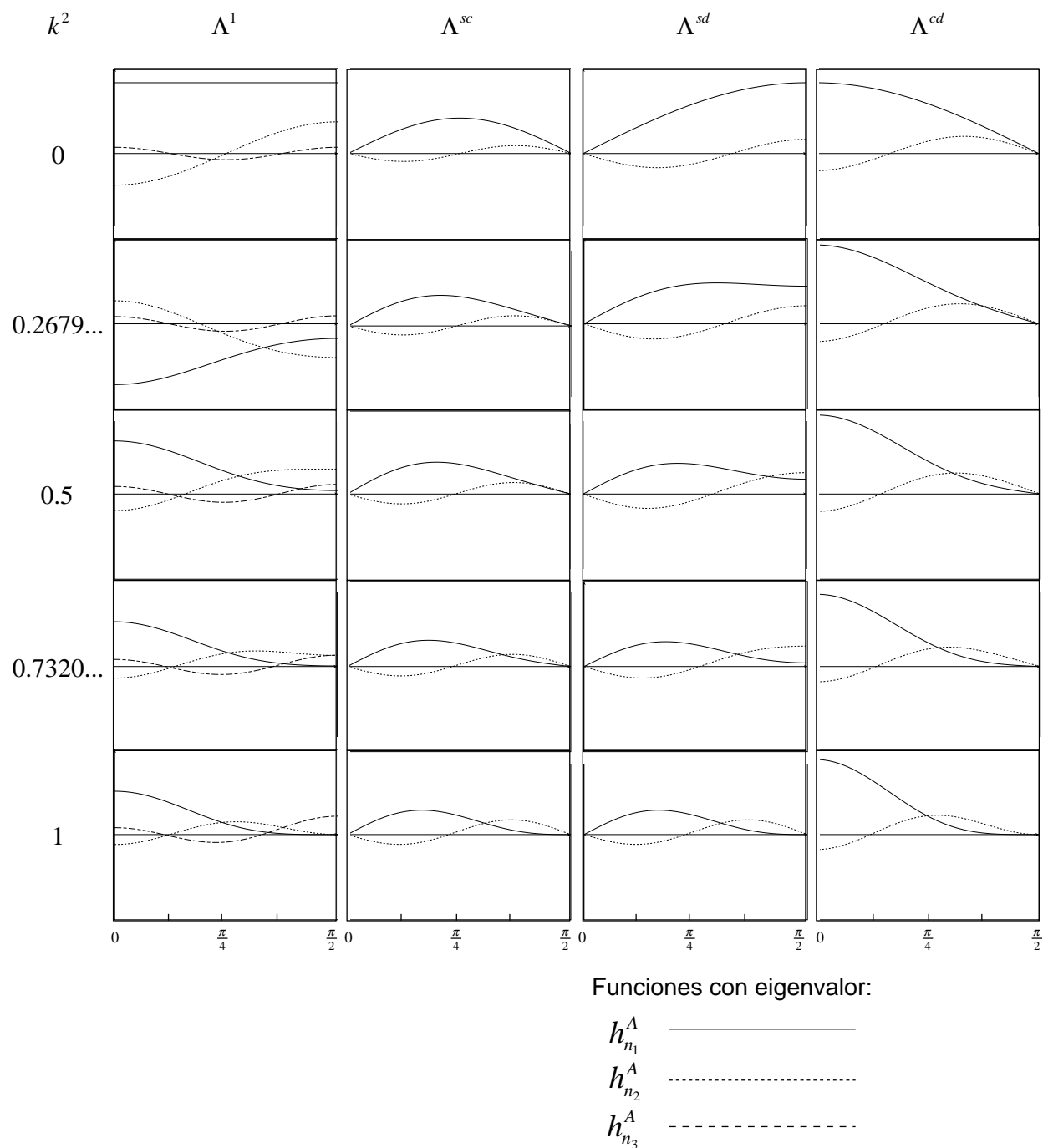
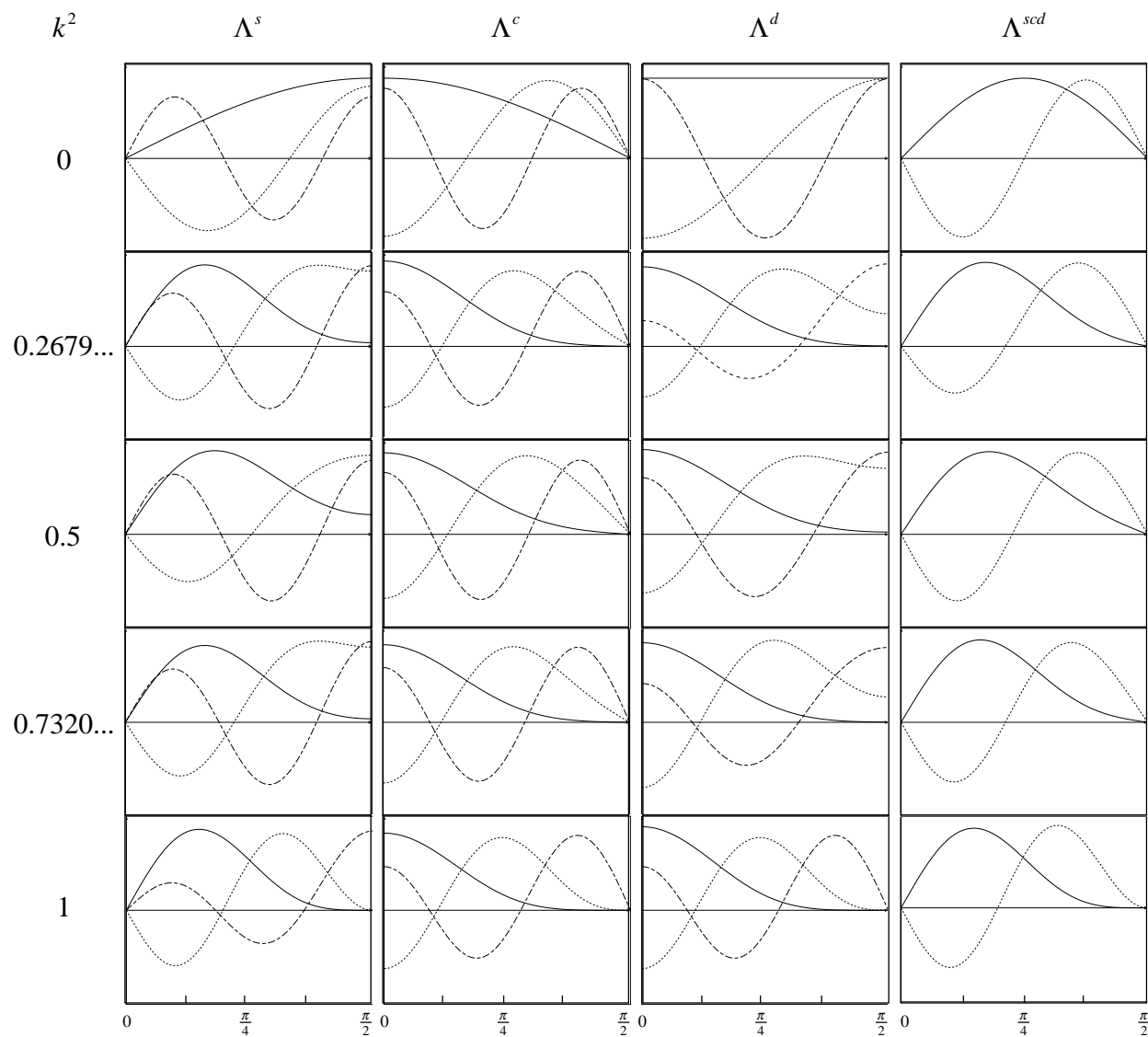


Figura 5.1: Funciones de Lamé para $\ell = 4$ en el que se encuentran las especies de funciones Λ^1 , Λ^{sc} , Λ^{sd} y Λ^{cd} . Se muestran las funciones para distintos valores de k^2 que corresponden a los valores que se presentan en la Tabla 5.1. El comportamiento de las funciones de Lamé para ℓ par es similar al que se tiene con estas funciones.



Funciones con eigenvalor:

$h_{n_1}^A$ —————
 $h_{n_2}^A$
 $h_{n_3}^A$ - - - - -

Figura 5.2: Funciones de Lamé para $\ell = 5$ en el que se encuentran las especies de funciones Λ^s , Λ^c , Λ^d y Λ^{scd} . Se muestran las funciones para distintos valores de k^2 que corresponden a los valores que se presentan en la Tabla 5.2. El comportamiento de las funciones de Lamé para ℓ no es similar al que se tiene con estas funciones.

5.3. Eigenvectores de \hat{H}^* en términos de funciones de Lamé

Las eigenfunciones de las ecuaciones (5.1) y (5.4) se obtienen multiplicando funciones de Lamé complementarias y evaluadas con el método descrito en la sección anterior. Estos productos de funciones al ser eigenfunciones de la ecuación cuadrado de momento angular en coordenadas esferoconales son los denominados armónicos esferoconales. De esta manera las eigenfunciones para ℓ par son:

$$\Psi^1 = \Psi_{t_1 t_2}^{+++}(\chi_1, \chi_2) = \Lambda_{t_1}^1(\chi_1) \Lambda_{t_2}^1(\chi_2) , \quad (5.34)$$

$$\Psi^{yz} = \Psi_{t_1 t_2}^{+--}(\chi_1, \chi_2) = \Lambda_{t_1}^{cs}(\chi_1) \Lambda_{t_2}^{cd}(\chi_2) , \quad (5.35)$$

$$\Psi^{xz} = \Psi_{t_1 t_2}^{-+-}(\chi_1, \chi_2) = \Lambda_{t_1}^{ds}(\chi_1) \Lambda_{t_2}^{sd}(\chi_2) , \quad (5.36)$$

$$\Psi^{xy} = \Psi_{t_1 t_2}^{--+}(\chi_1, \chi_2) = \Lambda_{t_1}^{dc}(\chi_1) \Lambda_{t_2}^{sc}(\chi_2) , \quad (5.37)$$

donde el orden inverso de las letras en el superíndice de Λ indica que se trata de la especie complementaria para garantizar que sea eigenfunción de la ecuación de Lamé para la otra variable, y por consiguiente de los operadores \hat{L}^2 y \hat{H}^* . También se ha indicado la paridad de las funciones que se discutió al final del Capítulo 3. Las eigenfunciones para ℓ non son:

$$\Psi^x = \Psi_{t_1 t_2}^{-++}(\chi_1, \chi_2) = \Lambda_{t_1}^d(\chi_1) \Lambda_{t_2}^s(\chi_2) , \quad (5.38)$$

$$\Psi^y = \Psi_{t_1 t_2}^{+-+}(\chi_1, \chi_2) = \Lambda_{t_1}^c(\chi_1) \Lambda_{t_2}^c(\chi_2) , \quad (5.39)$$

$$\Psi^z = \Psi_{t_1 t_2}^{++-}(\chi_1, \chi_2) = \Lambda_{t_1}^s(\chi_1) \Lambda_{t_2}^d(\chi_2) , \quad (5.40)$$

$$\Psi^{xyz} = \Psi_{t_1 t_2}^{---}(\chi_1, \chi_2) = \Lambda_{t_1}^{dcs}(\chi_1) \Lambda_{t_2}^{scd}(\chi_2) . \quad (5.41)$$

Nótese que las combinaciones que aparecen para las especies de funciones de Lamé en las variables χ_1 y χ_2 aparecen de la siguiente manera:

χ_1	1	cs	ds	dc	d	c	s	dcs
χ_2	1	cd	sd	sc	s	c	d	scd
	1	yz	xz	xy	x	y	z	xyz

donde en la última línea podemos hacer una identificación sencilla con la notación estándar utilizada para las funciones de Lamé [20], y que utilizamos en el lado izquierdo de las ecuaciones (5.34) - (5.41).

Estas funciones son las mismas que se presentaron en las Figuras 3.3 y 3.4 del Capítulo anterior. En esta representación en la que se han utilizado las funciones de Lamé es mucho más sencillo obtener las curvas nodales, mismas que determinan los conos elípticos en el sistema de coordenadas esferoconales como se mostró en las ecuaciones (4.13) y (4.14) del Capítulo 4. Para ello sólo se necesita encontrar los ceros de las funciones de Lamé para cada una de las coordenadas.

En las Figuras 5.3 y 5.4 se muestran las elipses obtenidas para las funciones $\Lambda_4^1(\chi_1)\Lambda_0^1(\chi_2)$ y $\Lambda_5^s(\chi_1)\Lambda_0^d(\chi_2)$ para diferentes valores de σ . En la Figura 5.3 se muestran dos elipses que representan dos conos elípticos que abren en la dirección positiva el eje z , y para la parte negativa del eje z sucede lo mismo. Esto nos da como resultado 4 superficies nodales que son las que corresponden a $\ell = 4$. En la Figura 5.4 se tienen dos superficies nodales para el lado positivo del eje z y dos más para el lado negativo, pero en este caso el plano xy es también una superficie nodal por lo que en la Figura 5.4 se muestra un círculo exterior con línea continua a diferencia de la Figura 5.3 donde este círculo se muestra con una línea punteada. Lo anterior nos da como resultado que se tengan cinco superficies nodales, tal como se espera para funciones con $\ell = 5$. En general se tienen ℓ superficies nodales al igual que en los armónicos esféricos. El lector puede contar los ceros de las funciones de Lamé complementarias en las Figuras 5.1 y 5.2 encontrando que siempre se suman ℓ nodos. Para ello sólo hay que tomar en cuenta que se está graficando $0 \leq \text{am}(\chi) \leq \pi/2$. De esta manera los subíndices t_1 y t_2 cumplen con la siguiente relación:

$$t_1 + t_2 = \ell \quad , \quad (5.42)$$

debido a que se trata de funciones de Lamé complementarias y de esta relación se hace evidente que cada armónico esferoconal tiene ℓ superficies nodales, ya que para la variable χ_1 se tienen t_1 superficies nodales y para la variable χ_2 se tienen t_2 superficies nodales. De esta manera la ecuación (5.42) es equivalente a la ecuación (5.33) ya que determina por medio de las superficies nodales las especies complementarias de funciones de Lamé.

Debido a las simetrías encontradas, los conos elípticos que determina la función que se muestra en la Figura 5.3 son los mismos que determina la función $\Lambda_0^1(\chi_1)\Lambda_4^1(\chi_2)$ en el plano yz vistos desde el eje x y tomando $\sigma' = \pi/3 - \sigma$, tal como puede verse en el último renglón de la Figura 3.3 del Capítulo anterior. Para la función en la Figura 5.4 los conos elípticos que determina esta función son los mismos que la función $\Lambda_0^d(\chi_1)\Lambda_5^s(\chi_2)$ pero en el plano yz visto desde el eje x y tomando $\sigma' = \pi/3 - \sigma$, tal como se puede observar en el último renglón de la Figura 3.4.

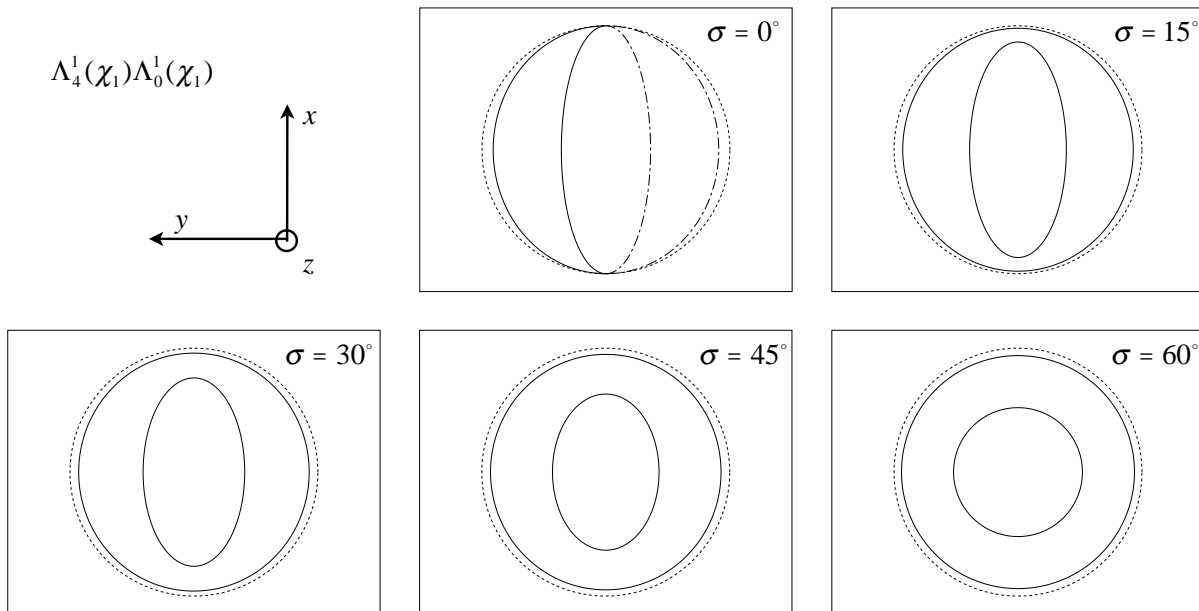


Figura 5.3: Elipses que determina el armónico esferoconal $\Lambda_4^1(\chi_1)\Lambda_0^1(\chi_2)$ correspondiente a $\ell = 4$. En la Figura se muestran las elipses que resultan de la intersección entre la superficie nodal que determina la variable χ_1 (como elíptico que abre en la dirección del eje z) y un plano paralelo al plano xy visto desde el eje z . Esta función está en correspondencia directa con la que se muestra en el primer renglón de la Figura 3.3 del Capítulo 3.

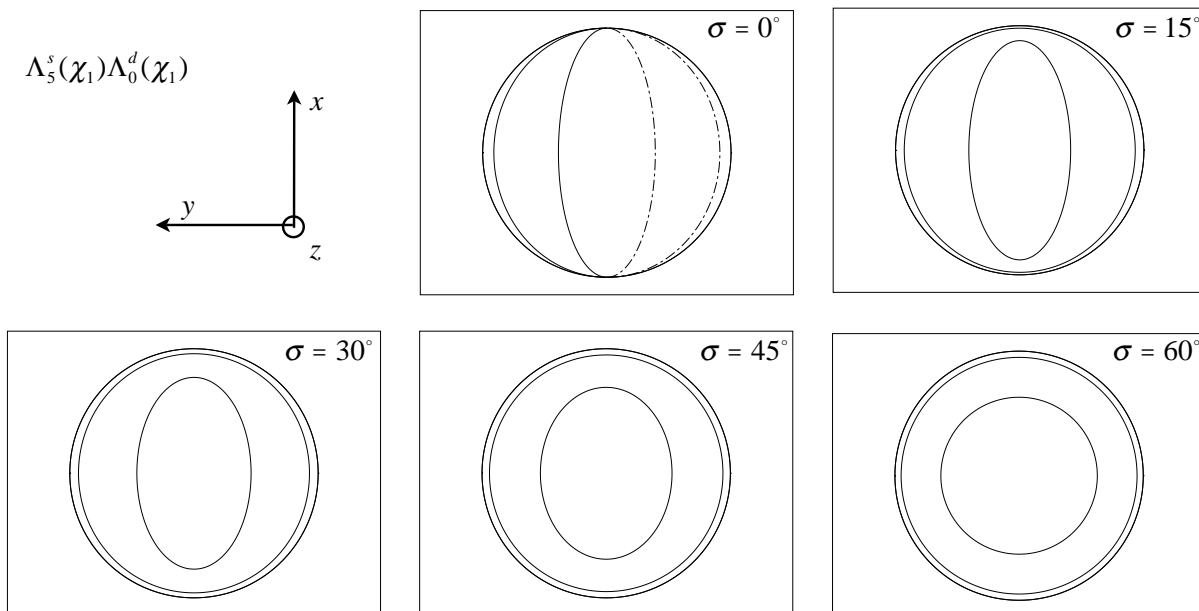


Figura 5.4: Elipses que determina el armónico esferoconal $\Lambda_5^s(\chi_1)\Lambda_0^d(\chi_2)$ correspondiente a $\ell = 5$. En la Figura se muestran las elipses que resultan de la intersección entre la superficie nodal que determina la variable χ_1 (como elíptico que abre en la dirección del eje z) y con un plano paralelo al plano xy visto desde el eje z . Esta función está en correspondencia directa con la que se muestra en el primer renglón de la Figura 3.4 del Capítulo 3.

Capítulo 6

Armónicos esferoconales en términos de funciones de Lamé y función generadora

En este Capítulo abordamos la construcción de una función generadora para armónicos esferoconales utilizando los desarrollos en los Capítulos anteriores. Para ello reconocemos que el potencial de Coulomb y la onda plana son funciones generadoras del desarrollo armónico.

6.1. Potencial de Coulomb como función generadora de las funciones armónicas

Las funciones armónicas son soluciones de la ecuación de Laplace. Al escribir la ecuación de Laplace en coordenadas esféricas y coordenadas esferoconales:

$$\nabla^2\Phi(r, \theta, \phi) = 0 \quad \text{y} \quad \nabla^2\Phi(r, \chi_1, \chi_2) = 0 \quad , \quad (6.1)$$

encontramos que el operador de cuadrado de momento angular corresponde a la parte angular de la ecuación en ambos sistemas de coordenadas, ecuaciones (A.17) y (4.21) respectivamente. Entonces las soluciones encontradas en los Capítulos 3 y 5 nos permiten decir que hemos obtenido los armónicos esferoconales cuando trabajamos los operadores anteriores en coordenadas esferoconales. Sabemos que la función potencial de Coulomb es función generadora del desarrollo armónico:

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{\ell} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} P_{\ell}(\hat{r} \cdot \hat{r}') \quad . \quad (6.2)$$

A continuación mostramos el teorema de la adición para expresar los polinomios de Legendre de orden ℓ en términos de armónicos esferoconales.

6.1.1. Teorema de la adición para armónicos esferoconales

El Teorema de adición de los armónicos esféricos nos proporciona el polinomio de Legendre de orden ℓ evaluado en el ángulo que hacen los vectores \hat{r} y \hat{r}' como la suma de productos de armónicos esféricos de orden ℓ evaluados en los ángulos que corresponden a dichos vectores:

$$P_\ell(\hat{r} \cdot \hat{r}') = P_\ell(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}^*(\theta', \phi') Y_{\ell m}(\theta, \phi) . \quad (6.3)$$

En el Capítulo 3 obtuvimos los armónicos esferoconales en términos de armónicos esféricos como se muestra en la ecuación (3.12). En el Capítulo 5 obtuvimos que los armónicos esferoconales son productos de funciones de Lamé. De esta manera podemos utilizar la transformación inversa de la ecuación (3.12) para escribir los armónicos esféricos en términos de armónicos esferoconales:

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \sum_{t,u} \tilde{c}_{\ell m}^{tu} \Lambda_t^A(\chi_1) \Lambda_u^B(\chi_2) , \quad (6.4)$$

donde $\tilde{c}_{\ell m}^{tu}$ son los coeficientes correspondientes a la transformación inversa. Entonces el teorema de adición se puede escribir de la siguiente forma:

$$P_\ell(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{t,u} \tilde{c}_{\ell m}^{tu} \Lambda_t^A(\chi_1) \Lambda_u^B(\chi_2) \sum_{p,q} \tilde{c}_{\ell m}^{pq} \Lambda_p^A(\chi'_1) \Lambda_q^B(\chi'_2) . \quad (6.5)$$

donde los índices t y u cumplen con la regla expresada en la ecuación (5.42), y como ya habíamos mencionado anteriormente éstos juegan un papel similar a los índices ℓ y m que tienen los armónicos esféricos. Cabe recordar que debido a las simetrías encontradas en el Capítulo 3 esta transformación es ortogonal y unitaria. Ello quiere decir que al hacer la suma sobre el índice m obtenemos:

$$P_\ell(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{t,u} \sum_{p,q} \delta_{t,p} \delta_{u,q} \Lambda_t^A(\chi_1) \Lambda_u^B(\chi_2) \Lambda_p^A(\chi'_1) \Lambda_q^B(\chi'_2) , \quad (6.6)$$

para obtener finalmente:

$$P_\ell(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{A,B} \sum_{t,u} \Lambda_t(\chi_1) \Lambda_u(\chi_2) \Lambda_t(\chi'_1) \Lambda_u(\chi'_2) . \quad (6.7)$$

donde la dependencia en ℓ del lado derecho de la ecuación está escrita de manera implícita en los índices t y u , ya que éstos cumplen con la condición expresada en la ecuación (5.42). Finalmente la expresión que hemos encontrado nos expresa el polinomio de Legendre de orden ℓ como una suma de productos de armónicos esferoconales de orden ℓ en las variables (χ_1, χ_2) y (χ'_1, χ'_2) que determinan los vectores \hat{r} y \hat{r}' respectivamente.

6.2. Función generadora de armónicos esferoconales a partir de \hat{H}^*

Sabemos que la onda plana es solución de la ecuación de Helmholtz, y ésta se puede interpretar como una función generadora de armónicos esféricos cuando se hace el desarrollo de Rayleigh en ondas esféricas. En el Capítulo 5 encontramos las soluciones de \hat{H}^* en coordenadas esferoconales. De esta manera si observamos la forma de la ecuación (2.23) para \hat{H}^* , ésta nos sugiere la siguiente función generadora:

$$F(\chi_1, \chi_2) = e^{i(e_1 u_x + e_2 u_y + e_3 u_z)} \quad , \quad (6.8)$$

donde $u_i = x_i/r$ son los cosenos directores que provienen de la transformación de coordenadas (4.8). Ahora hacemos la expansión en series de potencias para generar las funciones asimétricas dadas por las ecuaciones (5.34) - (5.41):

$$F(\chi_1, \chi_2) = 1 + i(e_1 u_x + e_2 u_y + e_3 u_z) + \frac{i^2}{2} (e_1 u_x + e_2 u_y + e_3 u_z)^2 + \dots \\ + \frac{i^\ell}{\ell!} (e_1 u_x + e_2 u_y + e_3 u_z)^\ell + \dots \quad . \quad (6.9)$$

Analizando el ℓ -ésimo término de esta expansión separamos los casos en el que el trinomio $(e_1 u_x + e_2 u_y + e_3 u_z)$ está elevado a una potencia par o non. Es decir que la ecuación anterior la podemos escribir como:

$$F(\chi_1, \chi_2) = \sum_{\ell} F_{2\ell}(\chi_1, \chi_2) + F_{2\ell+1}(\chi_1, \chi_2) \quad (6.10)$$

donde $F_{2\ell}$ y $F_{2\ell+1}$ son:

$$F_{2\ell}(\chi_1, \chi_2) = \frac{-1^\ell}{(2\ell)!} (e_1 u_x + e_2 u_y + e_3 u_z)^{2\ell} \quad , \quad (6.11)$$

$$F_{2\ell+1}(\chi_1, \chi_2) = \frac{i(-1)^{\ell+1}}{(2\ell+1)!} (e_1 u_x + e_2 u_y + e_3 u_z)^{2\ell+1} \quad . \quad (6.12)$$

Al expandir el trinomio para cada uno de los casos obtenemos:

$$F_{2\ell}(\chi_1, \chi_2) = \frac{-1^\ell}{(2\ell)!} \sum_p \sum_q \binom{2\ell}{2\ell-p-q \quad p \quad q} \\ \times e_1^{2\ell-p-q} e_2^p e_3^q (\text{dn}(\chi_1, k_1) \text{sn}(\chi_2, k_2))^{2\ell-p-q} \\ \times (\text{cn}(\chi_1, k_1) \text{cn}(\chi_2, k_2))^p (\text{sn}(\chi_1, k_1) \text{dn}(\chi_2, k_2))^q \quad , \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned}
 F_{2\ell+1}(\chi_1, \chi_2) = & \frac{i(-1)^{\ell+1}}{(2\ell+1)!} \sum_p \sum_q \begin{pmatrix} 2\ell+1 \\ 2\ell+1-p-q & p & q \end{pmatrix} \\
 & \times e_1^{2\ell+1-p-q} e_2^p e_3^q (\operatorname{dn}(\chi_1, k_1) \operatorname{sn}(\chi_2, k_2))^{2\ell+1-p-q} \\
 & \times (\operatorname{cn}(\chi_1, k_1) \operatorname{cn}(\chi_2, k_2))^p (\operatorname{sn}(\chi_1, k_1) \operatorname{dn}(\chi_2, k_2))^q .
 \end{aligned} \tag{6.14}$$

Para las potencias pares, ecuación (6.13), la distinción entre las diferentes combinaciones de paridad que determinan los exponentes se encuentran en la Tabla 6.1, y nos proporcionan las especies de funciones que están en las ecuaciones (5.34) - (5.37). De manera similar para las potencias nones, ecuación (6.14), las combinaciones de paridad que determinan los exponentes se resumen en la Tabla 6.2. Ello nos proporciona las especies de funciones que están en las ecuaciones (5.38) - (5.41).

$2\ell - p - q$	p	q	especie
par	par	non	1
par	non	par	yz
non	par	non	xz
non	non	par	xy

Tabla 6.1: Identificación de las potencias para las especies con ℓ par.

$2\ell + 1 - p - q$	p	q	especies
non	non	non	xyz
non	par	par	x
par	non	par	y
par	par	non	z

Tabla 6.2: Identificación de las potencias para las especies con ℓ non.

A continuación se expone el desarrollo para la especie 1, y al final ponemos los resultados para otras especies. Tomando como base la ecuación (6.13), y sustituyendo las funciones elípticas de Jacobi en términos de $\operatorname{sn}(\chi, k)$ y utilizando las relaciones en (4.3) y (4.4), obtenemos:

$$\begin{aligned}
 F_{2\ell}^1(\chi_1, \chi_2) = & \frac{(-1)^\ell}{(2\ell)!} \sum_p \sum_q \begin{pmatrix} 2\ell \\ 2(\ell-p-q) & 2p & 2q \end{pmatrix} \\
 & \times e_1^{2(\ell-p-q)} e_2^{2p} e_3^{2q} (1 - k_1^2 \operatorname{sn}^2(\chi_1, k_1))^{\ell-p-q} \\
 & \times \operatorname{sn}^{2(\ell-p-q)}(\chi_2, k_2) (1 - \operatorname{sn}^2(\chi_1, k_1))^p \\
 & \times (1 - \operatorname{sn}^2(\chi_2, k_2))^p \operatorname{sn}^{2q}(\chi_1, k_1) (1 - k_2^2 \operatorname{sn}^2(\chi_2, k_2))^q ,
 \end{aligned} \tag{6.15}$$

donde se ha considerado que tanto p como q son pares de acuerdo con la Tabla 6.1. La sucesiva expansión en términos de potencias pares de cada uno de los binomios del desarrollo anterior es:

$$\begin{aligned}
 F_{2\ell}^1(\chi_1, \chi_2) &= \frac{(-1)^\ell}{(2\ell)!} \sum_p \sum_q \binom{2\ell}{2(\ell-p-q) \quad 2p \quad 2q} \\
 &\times e_1^{2(\ell-p-q)} e_2^{2p} e_3^{2q} \sum_\alpha \sum_\beta \sum_\gamma \sum_\delta \binom{\ell-p-q}{\alpha} \binom{p}{\beta} \binom{p}{\gamma} \binom{q}{\delta} \\
 &(-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\delta} k_1^{2\alpha} k_2^{2\delta} \left(\text{sn}^2(\chi_1, k_1)\right)^{q+\alpha+\beta} \left(\text{sn}^2(\chi_2, k_2)\right)^{\ell-p-q+\gamma+\delta} .
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

En la ecuación (5.15) del Capítulo 5 encontramos que Λ_n^1 se escribe como una serie finita de potencias pares de funciones $\text{sn}(\chi, k)$. La evaluación matricial para funciones de Lamé del Capítulo anterior nos permite escribir $\text{sn}^{2p}(\chi, k)$ por medio de la transformación inversa de la evaluación matricial:

$$\text{sn}^{2p}(\chi, k) = \sum_t \bar{a}_t^{1,p} \Lambda_t^1(\chi, k; h^1) , \tag{6.17}$$

donde $\bar{a}_t^{1,p}$ son los coeficientes de la transformación inversa a la ecuación (5.23) y hemos agregado h^1 para señalar que únicamente se toman los coeficientes que involucran dichos eigenvalores. De esta manera la expansión queda como:

$$F_{2\ell}^1(\chi_1, \chi_2) = \frac{(-1)^\ell}{(2\ell)!} \sum_t \sum_u D_{tu}^{11} \Lambda_t^1(\chi_1, k_1, h_t^1) \Lambda_u^1(\chi_2, k_2, h_u^1) , \tag{6.18}$$

donde los coeficientes de la expansión son:

$$\begin{aligned}
 D_{tu}^{11}(e_1, e_2, e_3; h_t^1, h_u^1) &= \sum_p \sum_q \binom{2\ell}{2(\ell-p-q) \quad 2p \quad 2q} e_1^{2(\ell-p-q)} e_2^{2p} e_3^{2q} \\
 &\times \sum_\alpha \sum_\beta \sum_\gamma \sum_\delta \binom{\ell-p-q-1}{\alpha} \binom{p}{\beta} \binom{p}{\gamma} \binom{q}{\delta} \\
 &(-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\delta} k_1^{2\alpha} k_2^{2\delta} \bar{a}_t^{1,q+\alpha+\beta} \bar{a}_u^{1,\ell-p-q+\delta+\gamma} .
 \end{aligned} \tag{6.19}$$

Como puede verse este coeficiente depende esencialmente de los coeficientes de la transformación inversa de la evaluación matricial. Las otras especies para ℓ par son generadas de manera similar:

$$F_{2\ell}^{AB}(\chi_1, \chi_2) = \frac{(-1)^\ell}{(2\ell)!} \sum_{n_1} \sum_{n_2} D_{n_1 n_2}^{AB} \Lambda_{n_1}^A(\chi_1, k_1, h_{n_1}^A) \Lambda_{n_2}^B(\chi_2, k_2, h_{n_2}^B) , \tag{6.20}$$

donde los coeficientes $D_{n_1 n_2}^{AB}$ para cada una de las especies son:

$$\begin{aligned}
 D_{n_1 n_2}^{yz} &= \sum_p \sum_q \left(\begin{matrix} 2\ell \\ 2(\ell-p-q-1) & 2p+1 & 2q+1 \end{matrix} \right) e_1^{2(\ell-p-q-1)} e_2^{2p+1} e_3^{2q+1} \\
 &\quad \times \sum_\alpha \sum_\beta \sum_\gamma \sum_\delta \left(\begin{matrix} \ell-p-q-1 \\ \alpha \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} p \\ \beta \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} p \\ \gamma \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} q \\ \delta \end{matrix} \right) \\
 &\quad (-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\delta} k_1^{2\alpha} k_2^{2\delta} \tilde{a}_{n_1}^{cs, q+\alpha+\beta} \tilde{a}_{n_2}^{cd, \ell-p-q+\gamma+\delta-1} , \tag{6.21}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_{n_1 n_2}^{xz} &= \sum_p \sum_q \left(\begin{matrix} 2\ell \\ 2(\ell-p-q)-1 & 2p & 2q+1 \end{matrix} \right) e_1^{2(\ell-p-q)-1} e_2^{2p} e_3^{2q+1} \\
 &\quad \times \sum_\alpha \sum_\beta \sum_\gamma \sum_\delta \left(\begin{matrix} \ell-p-q-1 \\ \alpha \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} p \\ \beta \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} p \\ \gamma \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} q \\ \delta \end{matrix} \right) \\
 &\quad (-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\delta} k_1^{2\alpha} k_2^{2\delta} \tilde{a}_{n_1}^{ds, q+\alpha+\beta} \tilde{a}_{n_2}^{sd, \ell-p-q+\gamma+\delta-1} , \tag{6.22}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_{n_1 n_2}^{xy} &= \sum_p \sum_q \left(\begin{matrix} 2\ell \\ 2(\ell-p-q)-1 & 2p+1 & 2q \end{matrix} \right) e_1^{2(\ell-p-q)-1} e_2^{2p+1} e_3^{2q} \\
 &\quad \times \sum_\alpha \sum_\beta \sum_\gamma \sum_\delta \left(\begin{matrix} \ell-p-q-1 \\ \alpha \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} p \\ \beta \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} p \\ \gamma \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} q \\ \delta \end{matrix} \right) \\
 &\quad (-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\delta} k_1^{2\alpha} k_2^{2\delta} \tilde{a}_{n_1}^{dc, q+\alpha+\beta} \tilde{a}_{n_2}^{sc, \ell-p-q+\gamma+\delta-1} . \tag{6.23}
 \end{aligned}$$

De manera análoga para ℓ non, las respectivas especies de funciones en las ecuaciones (5.38) - (5.41) se generan por las siguientes expansiones:

$$F_{2\ell+1}^{AB}(\chi_1, \chi_2) = \frac{i(-1)^\ell}{\ell!} \sum_{n_1} \sum_{n_2} D_{n_1 n_2}^{AB} \Lambda_{n_1}^A(\chi_1, k_1, h_{n_1}^A) \Lambda_{n_2}^B(\chi_2, k_2, h_{n_2}^B) , \tag{6.24}$$

donde los coeficientes $D_{n_1 n_2}^{AB}$ que corresponden a cada expansión son:

$$\begin{aligned}
 D_{n_1 n_2}^{xyz} &= \sum_p \sum_q \left(\begin{matrix} 2\ell+1 \\ 2(\ell-p-q)+1 & 2p+1 & 2q+1 \end{matrix} \right) e_1^{2(\ell-p-q)-1} e_2^{2p+1} e_3^{2q+1} \\
 &\quad \times \sum_\alpha \sum_\beta \sum_\gamma \sum_\delta \left(\begin{matrix} \ell-p-q-1 \\ \alpha \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} p \\ \beta \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} p \\ \gamma \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} q \\ \delta \end{matrix} \right) \\
 &\quad (-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\delta} k_1^{2\alpha} k_2^{2\delta} \tilde{a}_{n_1}^{dcs, q+\alpha+\beta} \tilde{a}_{n_2}^{scd, \ell-p-q+\gamma+\delta-1} , \tag{6.25}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_{n_1 n_2}^x &= \sum_p \sum_q \binom{2\ell+1}{2(\ell-p-q)+1 \quad 2p \quad 2q} e_1^{2(\ell-p-q)+1} e_2^{2p} e_3^{2q} \\
 &\times \sum_\alpha \sum_\beta \sum_\gamma \sum_\delta \binom{\ell-p-q}{\alpha} \binom{p}{\beta} \binom{p}{\gamma} \binom{q}{\delta} \\
 &\quad (-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\delta} k_1^{2\alpha} k_2^{2\delta} \tilde{a}_{n_1}^{d,q+\alpha+\beta} \tilde{a}_{n_2}^{s,\ell-p-q+\gamma+\delta-1} ,
 \end{aligned} \tag{6.26}$$

$$\begin{aligned}
 D_{n_1 n_2}^y &= \sum_p \sum_q \binom{2\ell+1}{2(\ell-p-q) \quad 2p+1 \quad 2q} e_1^{2(\ell-p-q)} e_2^{2p+1} e_3^{2q} \\
 &\times \sum_\alpha \sum_\beta \sum_\gamma \sum_\delta \binom{\ell-p-q}{\alpha} \binom{p}{\beta} \binom{p}{\gamma} \binom{q}{\delta} \\
 &\quad (-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\delta} k_1^{2\alpha} k_2^{2\delta} \tilde{a}_{n_1}^{c,q+\alpha+\beta} \tilde{a}_{n_2}^{c,\ell-p-q+\gamma+\delta} ,
 \end{aligned} \tag{6.27}$$

$$\begin{aligned}
 D_{n_1 n_2}^z &= \sum_p \sum_q \binom{2\ell+1}{2(\ell-p-q) \quad 2p \quad 2q+1} e_1^{2(\ell-p-q)} e_2^{2p} e_3^{2q+1} \\
 &\times \sum_\alpha \sum_\beta \sum_\gamma \sum_\delta \binom{\ell-p-q}{\alpha} \binom{p}{\beta} \binom{p}{\gamma} \binom{q}{\delta} \\
 &\quad (-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\delta} k_1^{2\alpha} k_2^{2\delta} \tilde{a}_{n_1}^{s,q+\alpha+\beta} \tilde{a}_{n_2}^{d,\ell-p-q+\gamma+\delta} .
 \end{aligned} \tag{6.28}$$

Conclusión y discusión

En esta tesis se han estudiado las coordenadas esferoconales para caracterizar y desarrollar los armónicos esferoconales y las funciones de Lamé. También como se mencionó al principio de este trabajo, uno de los objetivos es el proporcionar herramientas útiles que permitan un mejor entendimiento de las coordenadas esferoconales. A continuación se presentan diferentes conclusiones y comentarios producto del desarrollo y los resultados obtenidos en la presente tesis.

7.1. Comentarios sobre la evaluación matricial de los armónicos esferoconales

Tomando como motivación para el estudio de los armónicos esferoconales utilizamos un trompo asimétrico en su versión cuántica. Para resolver el problema se utilizaron transformaciones lineales relacionadas con rotaciones alrededor de cada uno de los ejes coordenados desde el sistema de referencia en el que el trompo está fijo. La ecuación (2.5) del Capítulo 3 muestra de manera explícita el problema a resolver. Esta ecuación la reparametrizamos para separar únicamente la parte asimétrica del problema. Utilizamos la bases de los armónicos esféricos para obtener la representación matricial de esta ecuación. Ello produce matrices con simetrías que identificamos y nos permitieron decir algunas características de las soluciones. Utilizamos herramientas de álgebra lineal para resolver el problema de eigenvalores asociado, y de esta manera obtener las eigenfunciones de las matrices que modelan las rotaciones de moléculas asimétricas. Esta evaluación matricial que se expresa en las ecuaciones (3.9) a (3.11) permite calcular de manera exacta, precisa y eficiente los eigenvalores y eigenfunciones para cualquier asimetría, a diferencia de la mayoría de los trabajos que se encuentran en la literatura en los que se propone utilizar teoría de perturbaciones y sólo se calculan eigenvalores para asimetrías muy específicas. Además con este método se pueden calcular eigenvalores y eigenfunciones para cualquier valor de ℓ sin ningún problema, ya que los métodos tradicionales que se encuentran en la literatura actual no permiten hacer cálculos para valores de ℓ grandes. Ejemplo de esto último

se puede observar en las gráficas de las Figuras 3.1 y 3.2 donde se llega a calcular sin ningún problema eigenvalores E^* para funciones con $\ell = 30$.

En el Capítulo 3 se muestran Tablas de eigenvalores calculados con el método matricial que proponemos y en las Figuras 3.1 y 3.2 se muestra la variación de éstos para cualquier asimetría. Finalmente en las Figuras 3.3 y 3.4 se muestra de manera explícita los armónicos esferoconales, y se identifican sus paridades para clasificarlos de la misma manera que lo hacen Whittaker y Watson [20].

7.2. Observaciones sobre la evaluación matricial de las funciones de Lamé

Al escribir los operadores de rotación y el Hamiltoniano (\hat{H}^*) asociados al trompo cuántico asimétrico en coordenadas esferoconales observamos que bajo esta transformación dichos operadores permiten separación de variables. Esto nos llevó a la ecuación diferencial de Lamé, cuyas soluciones las encontramos utilizando otro método matricial. Naturalmente las soluciones encontradas las identificamos como los polinomios de Lamé. Este método matricial permite una evaluación rápida y precisa de las funciones de Lamé ya que comúnmente esta evaluación se hace resolviendo numéricamente la ecuación diferencial, o se utilizan fracciones continuas para generar las funciones de Lamé. El método matricial utilizado en este trabajo permite el cálculo de todos los eigenvalores y eigenvectores al mismo tiempo, a diferencia del método de fracciones continuas en el que primero se tienen que calcular cada uno de los eigenvectores uno por uno y una vez que se tienen éstos se calculan los eigenvectores por separado. Es por esto que la forma de hacer los cálculos en este trabajo representa un gran ahorro en tiempo de cálculo, además de proporcionar una precisión mayor ya que no es un método que utiliza iteraciones. También se identificaron los dos tipos de funciones de Lamé cada uno con cuatro especies de funciones distintas.

Otro punto a destacar del método matricial aquí utilizado es que al identificarse las ocho diferentes especies de funciones de Lamé se obtienen matrices con un menor tamaño a cuando se utiliza la base de los armónicos esféricos para encontrar las soluciones de \hat{H}^* y \hat{L}^2 . Ello hace que se simplifiquen los cálculos de manera sustancial.

Con el método que se describe en el Capítulo 5 los armónicos esferoconales quedan en términos de productos de funciones de Lamé, que son la base natural para representarlos. Bajo este esquema se pueden encontrar de manera fácil las superficies nodales que caracterizan a estas funciones armónicas.

7.3. Conexión entre armónicos esféricos y armónicos esferoconales

Las soluciones encontradas para el trompo cuántico asimétrico son solución de la parte angular de la ecuación de Laplace. Es por ello que a lo largo de los Capítulos 3 y 5 lo que se ha hecho realmente es una caracterización sobre los armónicos esferoconales utilizando dos bases de funciones distintas, armónicos esféricos y funciones de Lamé. La ventaja de los métodos matriciales utilizados a lo largo de esta tesis es que obtienen las transformaciones entre las bases de armónicos esféricos y funciones de Lamé. Utilizando estas bases y las transformaciones entre ellas se identifica una función generadora para armónicos esferoconales. Para ello se utiliza la transformación inversa entre funciones elípticas de Jacobi y los polinomios de Lamé. También al obtener los armónicos esferoconales en términos de armónicos esféricos utilizamos el teorema de adición para expresar los polinomios de Legendre de orden ℓ como suma de productos de armónicos esferoconales.

Estos resultados permiten dar como interpretación de los armónicos esferoconales como una extensión alternativa de los armónicos esféricos, tal como sucede con las funciones elípticas de Jacobi, ya que éstas son las funciones trigonométricas e hiperbólicas para ciertos parámetros de k como se muestra en las relaciones 4.5 del Capítulo 4.

7.4. Sobre los resultados numéricos obtenidos y sus aplicaciones

La motivación inicial con el que empezó este trabajo es un trompo asimétrico en su versión cuántica. Este problema es muy importante en el terreno de la Física principalmente en mecánica cuántica y la espectroscopía ya que constituye la base para el cálculo de las energías rotacionales de moléculas asimétricas que en tiempos recientes ha tomado mucha importancia para caracterizar sustancias, [14], [22] y [31].

Los programas de cómputo que se realizaron para este trabajo permitieron implementar de manera eficiente y precisa la evaluación de los armónicos esferoconales, ya que estos cálculos se hacían utilizando el método de perturbaciones y de fracciones continuas.

Finalmente los métodos matriciales que se exponen en este trabajo son mucho más rápidos que los métodos tradicionales de fracciones continuas que se utilizan para calcular algunas funciones especiales, como por ejemplo las funciones de Lamé.

Apéndice A

Coordenadas esféricas

En el presente Apéndice se presentan algunas características básicas de las coordenadas esféricas que sirven para tener un mejor entendimiento de los desarrollos que se abordan en los Capítulos centrales de esta tesis. Las coordenadas esféricas se obtienen mediante la siguiente transformación de coordenadas:

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \phi \\y &= r \sin \theta \sin \phi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}\tag{A.1}$$

donde $r \in (0, \infty)$, $\theta \in (0, \pi)$ y $\phi \in (0, 2\pi)$ como se observa en la Figura A.1. Este sistema de coordenadas determina esferas concéntricas con centro en el origen cuando r se mantiene fija, conos circulares con vértice en el origen y eje a lo largo z cuando θ se mantiene fija, y planos con vectores normales contenidos en el plano xy cuando ϕ se mantiene fija. Las anteriores superficies se muestran en la Figura A.2.

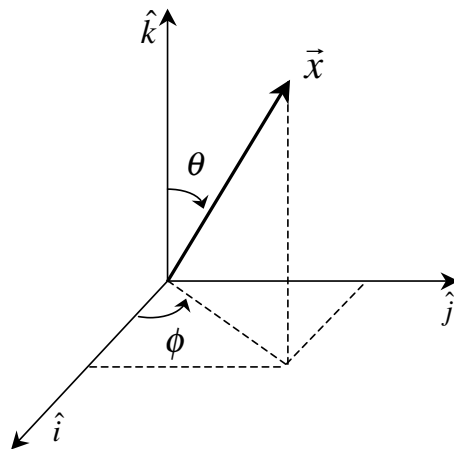


Figura A.1: En el esquema se muestra la relación entre las coordenadas cartesianas y las coordenadas esféricas.

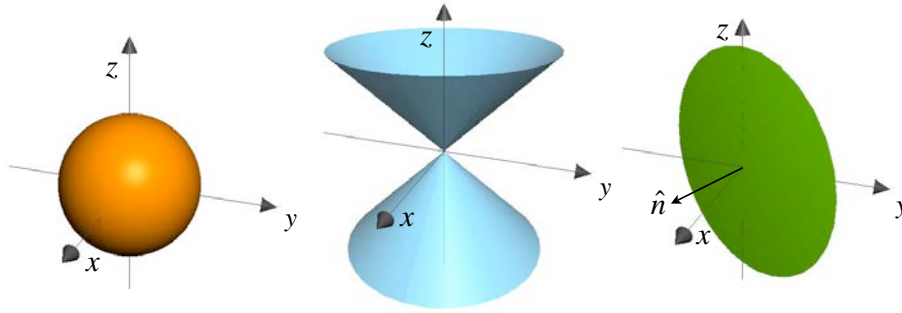


Figura A.2: Se muestran las superficies que define este sistema de coordenadas cuando alguna de las tres variables se mantiene fija. A la izquierda se muestra la esfera cuando la coordenada r está fija, al centro cuando la coordenada θ está fija y a la derecha cuando la coordenada ϕ está fija.

Cuando r se mantiene fija se obtiene una parametrización de la esfera. Las curvas que determinan esta parametrización son paralelos y meridianos como se muestra en la Figura A.3.

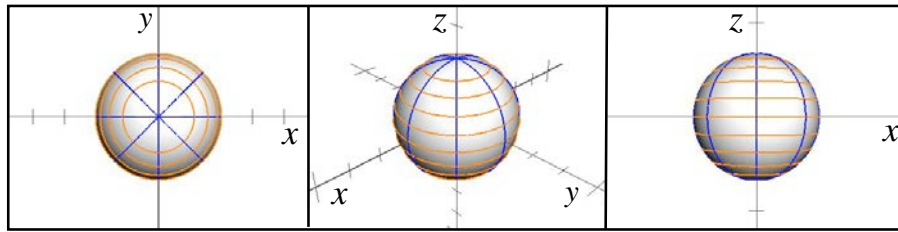


Figura A.3: Curvas sobre las esfera cuando la coordenadas (r, θ) ó (r, ϕ) se mantienen fijas.

Bajo este sistema de coordenadas la ecuación Laplace toma la siguiente forma:

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Esta ecuación admite separación de variables que se expresa de la siguiente forma:

$$\Psi = \frac{R(r)}{r} \Theta(\theta) \Phi(\phi). \quad (\text{A.3})$$

Al sustituir Ψ en (A.2) y multiplicar por $r^3 \sin^2 \theta / R\Theta\Phi$ se obtiene:

$$r^2 \sin^2 \theta \left[\frac{1}{R} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r^2 \Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = 0. \quad (\text{A.4})$$

El último término únicamente tiene dependencia en ϕ por lo que debe ser igual a una constante que llamaremos $-m^2$. Ello nos proporciona la siguiente ecuación diferencial para ϕ :

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2, \quad (\text{A.5})$$

que tiene como soluciones:

$$\Phi = e^{\pm im\phi} . \quad (\text{A.6})$$

donde $m \in \mathbb{Z}$. De manera similar podemos separar las ecuaciones para $R(r)$ y $\Theta(\theta)$:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[\ell(\ell + 1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0 , \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} R = 0 , \quad (\text{A.8})$$

donde se ha introducido la constante de separación $\ell(\ell + 1)$. Las soluciones para la ecuación (A.8) son potencias de la variable r :

$$R(r) = Ar^{\ell+1} + Br^{-\ell} , \quad (\text{A.9})$$

donde ℓ está determinado por la ecuación (A.7). Con ello la dependencia en la variable r queda de la siguiente forma:

$$U(r) = \frac{R(r)}{r} = Ar^{\ell} + Br^{-(\ell+1)} . \quad (\text{A.10})$$

Podemos reconocer que las ecuaciones (A.5) y (A.7) son ecuaciones de eigenvalores con valores propios $\ell(\ell + 1)$ y m^2 respectivamente. El operador que corresponde a la ecuación (A.5) es más usual escribirlo como la siguiente ecuación de eigenvalores:¹

$$\hat{\underline{L}}_z \Phi(\phi) = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi(\phi) = m \Phi(\phi) , \quad (\text{A.11})$$

de donde se observa que al aplicar este operador en dos ocasiones se recupera la ecuación (A.5), con la ventaja de que se reconoce que este operador es la componente z del operador de momento angular en coordenadas esféricas con eigenfunciones $e^{im\phi}$, y eigenvalores $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$.

¹La barra debajo de $\hat{\underline{L}}_z$ denota que se trata de un operador adimensional, ya que en Física los operadores de momento angular tienen unidades que proporciona la constante física \hbar . La relación entre los operadores de momento angular adimensionales y los que se utilizan en Física es: $\hat{\underline{L}}_z = \hat{L}_z / \hbar$ y $\hat{\underline{L}}^2 = \hat{L}^2 / \hbar^2$.

A.1. Polinomios de Legendre

Para determinar ℓ en la ecuación (A.7), misma que bajo el cambio de variable $x = \cos \theta$ toma la siguiente forma:

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP}{dx} \right] + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P = 0, \quad (\text{A.12})$$

donde $P = P(\cos \theta)$. Ésta es la llamada ecuación asociada de Legendre, y sus soluciones son los polinomios asociados de Legendre.

Si se considera en la ecuación (A.12) el caso con $m^2 = 0$ se obtiene la ecuación diferencial ordinaria de Legendre, cuyas soluciones son los polinomios de Legendre. Dichos polinomios se obtienen con el método de Frobenius y se encuentra que para que la serie converja se exige que ℓ sea cero o un entero positivo. Ello determina polinomios finitos con paridad bien definida. La mayor potencia de estos polinomios está determinada por ℓ y por ello se les representa por $P_\ell(\cos \theta)$. Los polinomios de Legendre se pueden obtener por medio de la fórmula de Rodrigues:

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell. \quad (\text{A.13})$$

Los polinomios asociados de Legendre tienen dependencia en el número m y se pueden obtener a través de los polinomios ordinarios por medio de la siguiente fórmula:

$$P_\ell^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x), \quad (\text{A.14})$$

ello hace que m sólo pueda tomar los valores $-\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell$. Utilizando la fórmula de Rodrigues se obtiene la siguiente fórmula para generar los polinomios asociados de Legendre:

$$P_\ell^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{m+\ell}}{dx^{m+\ell}} (x^2 - 1)^\ell. \quad (\text{A.15})$$

Finalmente los polinomios asociados de Legendre satisfacen la siguiente relación de ortogonalidad:

$$\int_{-1}^1 P_{\ell'}^m(x) P_\ell^m(x) dx = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{\ell', \ell}. \quad (\text{A.16})$$

A.2. Armónicos esféricos

De la ecuación (A.2) podemos identificar el siguiente operador que concentra únicamente la dependencia angular del Laplaciano:

$$\hat{L}^2 = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2}, \quad (\text{A.17})$$

y con base en la ecuación (A.16) y las soluciones para la variable ϕ definimos la siguiente función:

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) \equiv \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (\text{A.18})$$

que por construcción está normalizada y cumple con la siguiente relación de ortogonalidad:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \bar{Y}_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) Y_\ell^m(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{m',m} \delta_{\ell',\ell}. \quad (\text{A.19})$$

Estas funciones son conocidas como los armónicos esféricos ya que son la solución a la parte angular de la ecuación de Laplace en coordenadas esféricas (A.17). Los armónicos esféricos forman un conjunto completo de funciones cumpliendo la siguiente relación de completitud:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \bar{Y}_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) Y_\ell^m(\theta, \phi) = \delta(\phi - \phi') \delta(\cos \theta - \cos \theta'), \quad (\text{A.20})$$

donde δ es la función delta de Dirac. Ello permite escribir cualquier función $f(\theta, \phi)$ en términos de armónicos esféricos:

$$f(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} A_\ell^m Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad (\text{A.21})$$

donde los coeficientes A_ℓ^m están dados por:

$$A_\ell^m = \int g(\theta, \phi) \bar{Y}_\ell^m(\theta, \phi) d\Omega, \quad (\text{A.22})$$

donde $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$.

Una relación importante que cumplen los armónicos esféricos es el llamado *teorema de adición* para armónicos esféricos. Este teorema nos dice que si tenemos dos vectores \vec{x} y \vec{x}' con coordenadas (r, θ, ϕ) y (r', θ', ϕ') respectivamente, formando un ángulo γ entre ellos como se muestra en la Figura A.4, entonces el polinomio de Legendre de orden ℓ para el ángulo γ se expresa en términos de productos de armónicos esféricos en los ángulos θ, ϕ y θ', ϕ' :

$$P_\ell(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \bar{Y}_\ell^m(\theta', \phi') Y_\ell^m(\theta, \phi). \quad (\text{A.23})$$

Los armónicos esféricos se clasifican de acuerdo a los números ℓ y m , por lo que en ocasiones se suele utilizar la notación que proviene de la mecánica cuántica introducida por Dirac, la

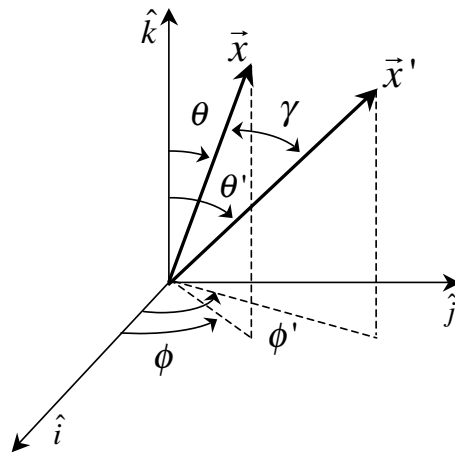


Figura A.4: Los vectores \vec{x} y \vec{x}' están relacionados por medio del teorema de adición de los armónicos esféricos.

cual pone un mayor énfasis en los eigenvalores que caracterizan a los operadores y eigenfunciones correspondientes. De esta manera los operadores \hat{L}^2 y \hat{L}_z toman la siguiente forma como ecuaciones de eigenvalores:

$$\hat{L}^2 |\ell m\rangle = \ell(\ell + 1) |\ell m\rangle \quad (\text{A.24})$$

$$\hat{L}_z |\ell m\rangle = m |\ell m\rangle \quad (\text{A.25})$$

donde $|\ell m\rangle$ denota al armónico esférico $Y_\ell^m(\theta, \phi)$.

Bibliografía

- [1] Kramers, H. A., e Ittmann, G. P. *Zur quantelung das asymmetrischen kreisels*. Zeitschrift für Physik, Vol. 53 (1929). pp. 553 - 565.
- [2] Ray, B. S. *Über die Eigenwerte des asymmetrischen Kreisels*. Zeitschrift für Physik, Vol. 78 (1932). p. 74.
- [3] King, Gilber W., Hainer R. M., y Cross, Paul C. *The asymmetric rotor. I. Calculation and symmetry classification of energy levels*. Journal of Chemical Physics, Vol. 11 (1943). pp. 27-42.
- [4] King, Gilber W., Hainer R. M., y Cross, Paul C. *The asymmetric rotor. II. Calculation of dipole intensities and line classification*. Journal of Chemical Physics, Vol. 12 (1944). pp. 210 - 243.
- [5] King, Gilber W., Hainer R. M., y Cross, Paul C. *The asymmetric rotor. VI. Calculation of higher energy levels by means of correspondence principle*. Journal of Chemical Physics, Vol. 15 (1947). pp. 820 - 830.
- [6] Van Winter, Clasine. *The asymmetric rotator in quantum mechanics*. Physica XX (1954). 274-292.
- [7] Kneubühl, F., Gäumann T. y Günthard, Hs. H. *Program for automatic digital computation of transition frequencies and analysis of microwave rotational spectra of rigid tops*. Journal of Molecular Spectroscopy. Vol. 3 (1959). pp. 349 - 362.
- [8] Jannuzzi, N. y Porto, Sergio P. S. *Table of energy levels of a slightly asymmetrical top rotor*. Journal of Molecular Spectroscopy. Vol. 4 (1960). pp. 359 - 467.
- [9] Bennett, J. M., Ross, I. G. y Wells, E. J. *Asymmetric rotor energy levels: An improved computational procedure*. Journal of Molecular Spectroscopy. Vol. 4 (1960). pp. 342 - 348.
- [10] Burkhard, Donald G. y Wesley Brittin, E. *The asymmetric top - An analytical treatment*. Journal of Molecular Spectroscopy. Vol. 4 (1960). pp. 342 - 348.
- [11] Louck, James D. *Trace formulas for a rigid asymmetric rotator-type Hamiltonian*. Journal of Molecular Spectroscopy. Vol. 10 (1963). pp. 163 - 277.

-
- [12] Louck, James D. *Eigenvectors of a slightly asymmetric rotator*. Journal of Molecular Spectroscopy. Vol. 15 (1965). pp. 83 - 99.
- [13] Piña, E. A new parametrization of the rotation matrix. American Journal of Physics. Vol. 51 (1983). pp. 375 - 379.
- [14] E. Piña. *Some properties of the spectra of asymmetric molecules*. Journal of Molecular Structure (Theochem), 493 (1999), pp. 159-170.
- [15] Bunge, C. *Fast eigensolver for dense real-symmetric matrices*. Computer Physics Communications. No. 138 (2001). pp. 92-100.
- [16] E. Ley-Koo y L. Chaos-Cador. *Mathieu functions revisited: matrix evaluation and generating functions*. Revista Mexicana Física, 48 (2002). pp. 67-75.
- [17] Mateos-Cortés S, Ley-Koo E, Cruz S. A. *Hydrogen molecular ion inside penetrable prolate spheroidal boxes: electronic and vibrational properties*. International Journal of Quantum Chemistry. Vol. 86, No. 4 (Feb. 5 2002). pp. 376-389.
- [18] M. T. Valdéz y E. Piña. *The rotational spectra of the most asymmetric molecules*. Rev. Mex. Fis. 52 (2006), pp. 220-229.
- [19] Morse, P. M. y Feshbach, H. *Methods of Theoretical Physics*. McGraw Hill, New York, U.S.A. 1953.
- [20] Whittaker, E. T. y Watson, G. N. *A Course of Modern Analysis*. Cambridge University Press, Reino Unido, 1927.
- [21] Abramowitz, M. y Stegun, I. A. *Handbook of Mathematical Functions*. Edit. Dover, New York, 1965.
- [22] Kroto, H. W. . *Molecular Rotation Spectra*. John Wiley & Sons. Great Britain. 1975.
- [23] Arnold, V.I., et . al. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer. E. U. A. 1989.
- [24] Press, William H., et. al. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, 1992. Vol. 1.
- [25] Jackson, John David. *Classical electrodynamics*. Wiley. New York, U.S.A. 1999.
- [26] Méndez Frago, Ricardo. *Modos normales acústicos, electrónicos y electromagnéticos entre fronteras cilíndricas hiperbólicas*. Tesis. Facultad de Ciencias, UNAM, Septiembre 2006.
- [27] E. Ley Koo, R. Méndez Frago y G. Villa Torres. *Trompo cuántico asimétrico: Funciones de Lamé y Funciones de momento angular*. XLVIII Congreso Nacional de Física. Sociedad Mexicana de Física. Octubre de 2005.
- [28] R. Méndez Frago y E. Ley Koo. *Evaluación matricial de funciones de Lamé*. XLIX Congreso Nacional de Física. Sociedad Mexicana de Física. Octubre de 2006.
-

-
- [29] E. Ley Koo y R. Méndez Fragoso. *Función generadora común de estados rotacionales de moléculas asimétricas descritos por armónicos esferoconales o armónicos esféricos*. XLIX Congreso Nacional de Física. Sociedad Mexicana de Física. Octubre de 2006.
- [30] E. Ley Koo y R. Méndez Fragoso. *Rotational states of asymmetric molecules revisited: Matrix evaluation and generating function of Lamé functions*. En proceso de publicación.
- [31] E. Ley Koo y R. Méndez Fragoso. *Properties of the spectra of asymmetric molecules: matrix evaluation in bases of spherical harmonics and common generating function*. En proceso de publicación.

“Dios es un matemático de orden muy elevado, y que Él usó matemática muy avanzada al construir el universo.”

Paul Adrien Maurice Dirac

The Evolution of the Physicist's Picture of Nature
Scientific American, Mayo de 1963.
