Material auxiliar para el curso de Química Cuántica.
A. Cedillo, *Departamento de Quimica, UAM-I.*
Febrero de 2022.

El movimiento de una partícula bajo el efecto de un potencial central.

Un potencial central depende únicamente de la distancia al origen, $V = V(r)$. La fuerza tiene la dirección radial, $\vec{F}(\vec{r}) = -\nabla V = -(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)\vec{r}_u$, en donde $\vec{r}_u$ es el vector radial unitario.

Ejemplo A1. Los potenciales gravitacional y coulómbico tienen la forma $V(r) = \kappa/r$. Por lo tanto, son potenciales centrales.

Los vectores iniciales de la posición y la velocidad definen un plano. Como la fuerza es paralela al vector de posición, entonces la aceleración también está en el mismo plano. Así, el movimiento permanece el plano de la posición y velocidad iniciales. Por lo tanto, el problema es bidimensional y sólo se necesitan dos coordenadas, (r_1, r_2).

Para este sistema, es más conveniente usar el sistema de coordenadas polares,

$$r_1 = r\cos\theta \ , \quad r_2 = r\sin\theta \ . \tag{1}$$

Así, las derivadas con respecto al tiempo (denotadas con un punto sobre la variable) son

$$\dot{r}_1 = \dot{r}\cos\theta - r\dot{\theta}\sin\theta \ , \quad \dot{r}_2 = \dot{r}\sin\theta + r\dot{\theta}\cos\theta \ . \tag{2}$$

Las ecuaciones de Newton.

Las ecuaciones de Newton son ecuaciones vectoriales, $m\ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i$, que relacionan a la aceleración de un cuerpo, $\ddot{\vec{r}}_i$, con la fuerza neta sobre dicho cuerpo, $\vec{F}_i$. Para el caso de una partícula, bajo el efecto de un potencial central, las componentes cartesianas de los vectores están en coordenadas polares. Entonces, las componentes de la aceleración quedan en la forma

$$\begin{aligned} \ddot{r}_1 &= \ddot{r}\cos\theta - 2\dot{r}\dot{\theta}\sin\theta - r\dot{\theta}^2\cos\theta - r\ddot{\theta}\sin\theta \\ \ddot{r}_2 &= \ddot{r}\sin\theta + 2\dot{r}\dot{\theta}\cos\theta - r\dot{\theta}^2\sin\theta + r\ddot{\theta}\cos\theta \end{aligned} \tag{3}$$

Finalmente, la ecuación de movimiento para cada coordenada cartesiana queda en la forma

$$\begin{aligned} f(r)\cos\theta &= m(\ddot{r}\cos\theta - 2\dot{r}\dot{\theta}\sin\theta - r\dot{\theta}^2\cos\theta - r\ddot{\theta}\sin\theta) \\ f(r)\sin\theta &= m(\ddot{r}\sin\theta + 2\dot{r}\dot{\theta}\cos\theta - r\dot{\theta}^2\sin\theta + r\ddot{\theta}\cos\theta) \end{aligned} \tag{4}$$

Ambas ecuaciones están acopladas, pero se separan haciendo combinaciones entre ellas:

$$\begin{aligned} [f(r)\cos\theta]\cos\theta + [f(r)\sin\theta]\sin\theta &= f(r) = m(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2) \\ [f(r)\sin\theta]\cos\theta - [f(r)\cos\theta]\sin\theta &= 0 = m(2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta}) \end{aligned} \tag{5}$$

Las ecuaciones diferenciales de segundo orden para las coordenadas polares quedan así,

$$\ddot{r} = r\dot{\theta}^2 + \frac{f(r)}{m} \ , \qquad \frac{\ddot{\theta}}{\dot{\theta}} = -2\frac{\dot{r}}{r} \ . \tag{6}$$

La ecuación diferencial para θ se integra directamente,

$$\ln\dot{\theta} = -2\ln r + c \ , \qquad \dot{\theta}r^2 = \text{const} \ . \tag{7}$$

Esta condición es equivalente a la conservación del momento angular,

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m(0, 0, r_1\dot{r}_2 - r_2\dot{r}_1) = (0, 0, mr^2\dot{\theta}) = (0, 0, l) \ .$$

Al sustituir la ecuación (7) en la (6), se obtiene la ecuación diferencial para la coordenada radial,

$$\ddot{r} = \frac{l^2}{mr^3} + \frac{f(r)}{m} \ . \tag{8}$$

Esta es una ecuación diferencial no lineal.

Las ecuaciones de Lagrange.

En esta formulación de la mecánica clásica, se debe construir la función lagrangiana o el lagrangiano del sistema, $\mathbf{L} \equiv T - V$. La energía cinética se obtiene a partir de las componentes de la velocidad, ecuación (2),

$$T = \frac{m}{2}(\dot{r}_1^2 + \dot{r}_2^2) = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) \ . \tag{9}$$

Entonces,

$$\mathbf{L} = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V(r) \ . \tag{10}$$

En la ecuación (10) sólo aparecen las coordenadas polares. Cada coordenada tiene asociado un momento,

$$p_r \equiv \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \ , \qquad p_\theta \equiv \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta} \ . \tag{11}$$

Así, las ecuaciones de movimiento quedan en la forma siguiente,

$$\dot{p}_r = \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial r} = mr\dot{\theta}^2 + f(r) \ , \qquad \dot{p}_\theta = \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \theta} = 0 \ . \tag{12}$$

De la ecuación para el momento conjugado p_θ, se tiene que

$$p_\theta = mr^2\dot{\theta} = l = \text{const} \ . \tag{13}$$

Es decir, el momento angular se conserva. Para la variable radial, la ecuación de movimiento es

$$\dot{p}_r = \frac{l^2}{mr^3} + f(r) \ . \tag{14}$$

Las ecuaciones de Lagrange, ecuaciones (13) y (14), son iguales a las obtenidas a partir de las ecuaciones de Newton, ecuaciones (7) y (8). Sin embargo, en el formalismo de Lagrange, las coordenadas polares son las únicas variables relevantes. Para obtener las ecuaciones de movimiento, no se necesitan las coordenadas cartesianas.

Las ecuaciones de Hamilton.

El hamiltoniano del sistema, $\mathbf{H} = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathbf{L}$, es una función de las coordenadas generalizadas y sus momentos conjugados. Usando las ecuaciones (10) y (11), el hamiltoniano toma la forma siguiente,

$$\mathbf{H} = p_r \frac{p_r}{m} + p_\theta \frac{p_\theta}{mr^2} - \frac{p_r^2}{2m} - \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r)\ . \tag{15}$$

Por lo tanto, las ecuaciones de movimiento quedan como,

$$\begin{aligned} \dot{p}_r &= -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial r} = \frac{p_\theta^2}{mr^3} - \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\ , \quad & \dot{p}_\theta &= -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \theta} = 0\ , \\ \dot{r} &= \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m}\ , & \dot{\theta} &= \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2}\ . \end{aligned} \tag{16}$$

Ahora, hay cuatro ecuaciones diferenciales de primer orden y son equivalentes a las dos de Laplace, ecuación (12). Sin embargo, esta formulación tiene algunas ventajas para la integración de las ecuaciones de movimiento.

La ecuación del momento conjugado p_θ indica que el momento angular es una constante de movimiento,

$$p_\theta = l = \text{const}\ . \tag{17}$$

De aquí, que el momento radial, p_r, se puede obtener directamente del hamiltoniano, ecuación (15), el cual representa a la energía del sistema,

$$p_r = \sqrt{2mE - 2mV - \frac{l^2}{r^2}}\ , \tag{18}$$

Y al sustituir esta ecuación en la ecuación de movimiento para r se obtiene la ecuación diferencial para la coordenada radial,

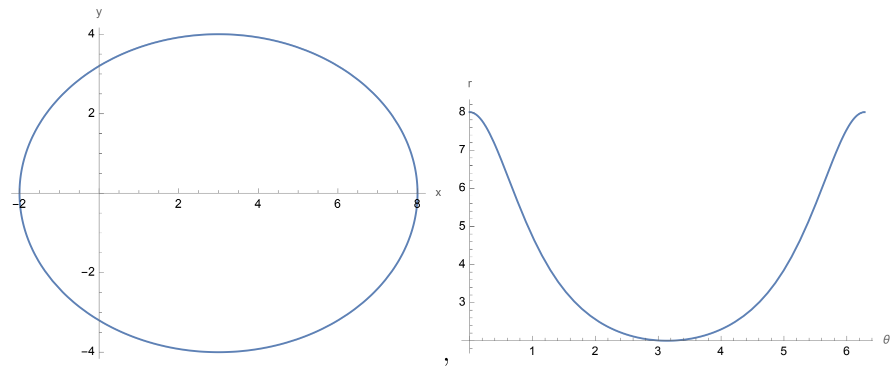
$$m\dot{r} = \sqrt{2mE - 2mV - \frac{l^2}{r^2}} \tag{19}$$

La integración de esta ecuación permite conocer a la función $r(t)$. A partir de ésta, se resuelve para la ecuación diferencial para la coordenada angular, ecuación (16),

$$\dot{\theta} = \frac{l}{mr^2}\ . \tag{20}$$

Ejemplo A2. Un potencial atractivo inverso con la distancia. Un potencial de la forma $V(r) = -\kappa/r$ representa al potencial gravitacional y al potencial coulómbico. Para este potencial, la ecuación (19) toma la forma

$$m\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \sqrt{2mE + 2m\frac{\kappa}{r} - \frac{l^2}{r^2}}\ . \tag{21}$$



,

Figure 1: La órbita de un potencial atractivo inverso con la distancia (panel izquierdo) y la dependencia de la variable radial con el ángulo (panel derecho).

La integración de esta ecuación genera la función $r = r(t)$ y la subsecuente integración de la ecuación (20) lleva a $\theta = \theta(t)$. La ecuación de la trayectoria en el plano se obtiene de forma directa, mediante la regla de la cadena,

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\theta}\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} \ , \qquad \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\theta} = \frac{\dot{r}}{\dot{\theta}} = \frac{r^2}{l}\sqrt{2mE + 2m\frac{\kappa}{r} - \frac{l^2}{r^2}} \ . \tag{22}$$

La integración de esta ecuación separable conduce a

$$\frac{\alpha}{r} = 1 + \beta\cos\theta \ , \tag{23}$$

en donde α y β son las constantes de integración.

En el caso de las energías negativas ($E < 0$), la ecuación (23) representa elipses, como el ejemplo de la Figura 1. La Figura 2 muestra la dependencia de las componentes de la energía con el ángulo polar.

La forma de la trayectoria depende de la energía. Para una energía negativa, la trayectoria es una órbita elíptica; cuando la energía es positiva se obtiene una hipérbola; mientras que para el caso cero, es una parábola.

Ejemplo A3. Las órbitas circulares.
Cuando la órbita es circular, la variable radial está fija, $r = R = \mathrm{const.}$ Por lo tanto, $\dot{r} = 0$, $p_r = 0$, $\dot{p}_r = 0$ y las ecuaciones de movimiento, ecuación (16), quedan en la forma

$$\dot{\theta} = \frac{l}{mR^2} = \mathrm{const} \ , \qquad \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} = \frac{l^2}{mR^3} \ . \tag{24}$$

La condición dada por la segunda relación en la ecuación (24) es necesaria para tener una órbita circular y representa el balance entre la fuerza radial y fuerza centrífuga. La ecuación (24) se integra directamente para la variable angular,

$$\theta(t) = \theta_0 + \frac{l}{mR^2}t \ . \tag{25}$$

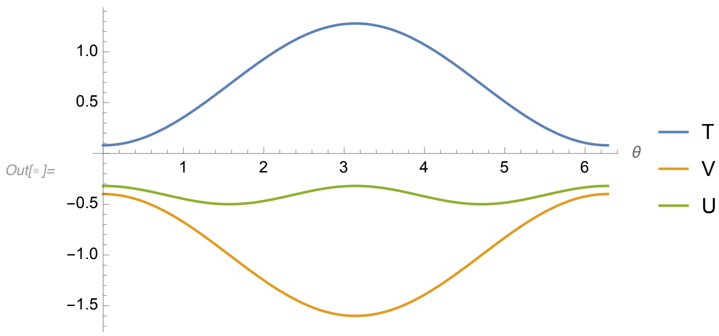


Figure 2: Las componentes de la energía como función del ángulo polar θ: cinética (T), potencial (V) y el potencial efectivo(U).

La magnitud de la velocidad se calcula con sus componentes, ecuación (2),

$$v^2 = \dot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} = \dot{r}_1^2 + \dot{r}_2^2 = \dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 = R^2\dot{\theta}^2 \ . \tag{26}$$

Entonces, la velocidad es constante, al igual que el momento angular $l = mRv$. La dirección de la velocidad se obtiene mediante la expresión

$$\vec{r} \cdot \dot{\vec{r}} = r_1\dot{r}_1 + r_2\dot{r}_2 = r\dot{r} = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}r^2}{\mathrm{d}t} \ . \tag{27}$$

Por lo tanto, en una órbita circular, los vectores de posición y velocidad son siempre perpendiculares, $\vec{r} \cdot \dot{\vec{r}} = 0$. En una órbita elíptica, esto no ocurre. En general, la velocidad no es constante, como lo muestra la energía cinética en la Figura 2, ni es siempre perpendicular al vector de posición,

$$\vec{r} \cdot \dot{\vec{r}} = \frac{\beta}{\alpha} r^3 \sin\theta \ , \tag{28}$$

de acuerdo con la ecuación (23).

Ejercicios.

1. Utilice la ecuación (2) para calcular la energía cinética y verifique que se obtiene la ecuación (9).

2. Construya en hamiltoniano a partir de las ecuaciones (10) y (11).

3. Calcule el producto $\vec{r}\cdot\dot{\vec{r}}$ para el caso de la trayectoria del potencial atractivo inverso con la distancia. Grafique sus resultados.