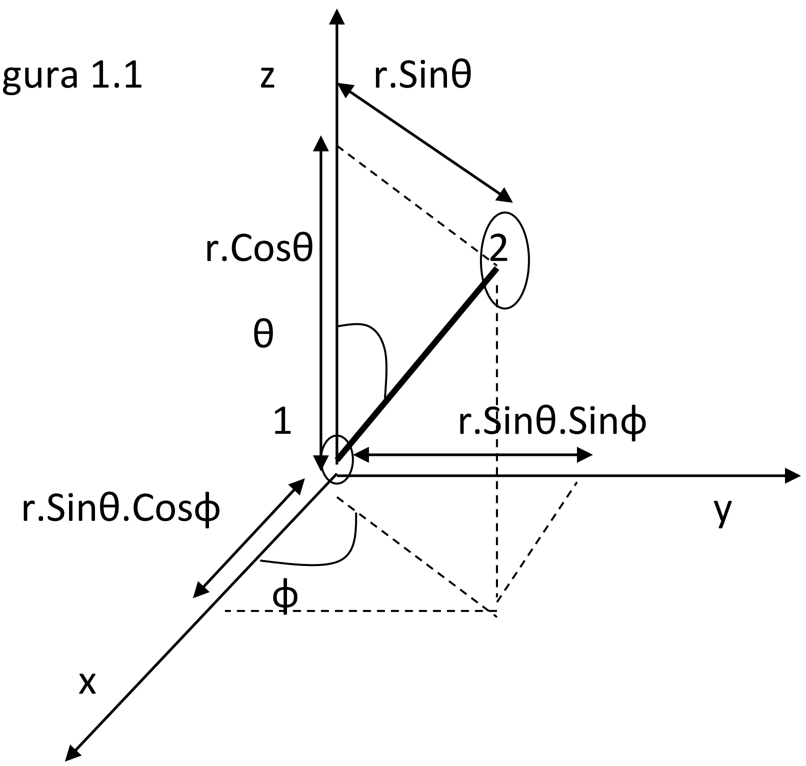
MASSA REDUÏDA EN L'EXPRESSIÓ DE L'ENERGIA D'UN ROTOR RÍGID:

Figura 1.1



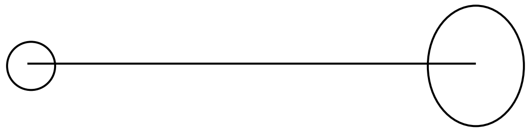
Veiem que al transcriure en coordenades polars trobem $\partial r/\partial t, \partial\theta/\partial t, \partial\varphi/\partial t$ enlloc de $\partial x/\partial t, \partial y/\partial t, \partial z/\partial t$ o el que és el mateix: $\dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\varphi}$

$\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)$ el signe negatiu és perquè la E_t sigui negativa

(-i= $-\sqrt{-1}$, i^2= -1).

Quan al centre de gravetat del rotor rígid diré que el seu centre de masses és: $X_{cm} = m_1.x_1/(m_1 + m_2) + m_2.x_2/(m_1 + m_2)$

Igual amb Ycm i Zcm en el cas de 2-D o 3-D.



1 2

x_2-x_1=r.Sinθ.Cosϕ

y_2-y_1= r.Sinθ.Sinϕ

z_2-z_1=r.Cosθ

Trobem a partir de la equació d'Schrödinger que

$\nabla^2\Psi + V(r)\Psi = E.\Psi$

E= part de translació + part de rotació + part de vibració

o sigui: E= ½(m_1+m_2)($\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2$) + 1/2(m_1.m_2/m_1+m_2)[$\dot{r}^2$ +

$r^2.\dot{\theta}^2 + r^2(Sin^2\theta)\dot{\varphi}^2$] + V(r) (figura 1.1)

En el casdel rotor rígid només hi caben 2 rotacions (la 3^{era} és sobre ella mateixa per tant no es considera) figura 1.2

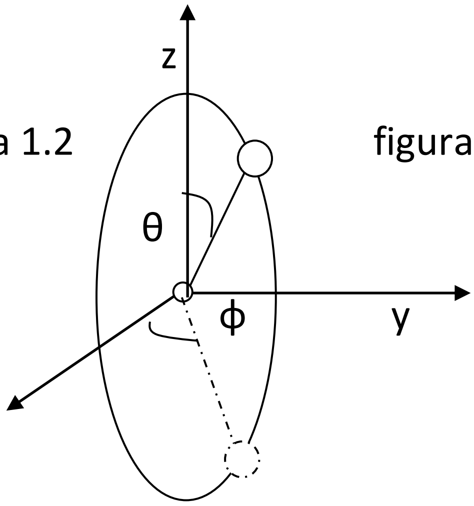
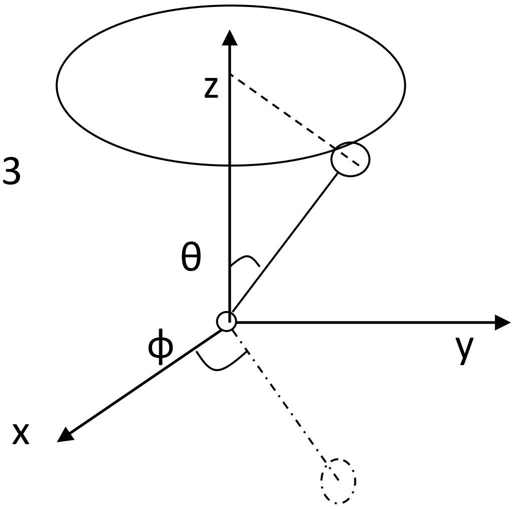


figura 1.3



on z varia i, per tant, θ també mentre que ϕ roman constant

en aquest altre cas θ es manté constant i ϕ varia (òbviament x i y també).

recordant les següents desigualtats:

$\left\|\vec{a}\vec{b}\right\| \leq \|\vec{a}\|.\left\|\vec{b}\right\|$ i $\left\|\overrightarrow{a+b}\right\| \leq \|\vec{a}\| + \left\|\vec{b}\right\|$ podem asimilar-les al teorema de pitàgores ja que a la figura 1 tot són triangles rectangles. Aleshores primer derivem i llavors elevem al quadrat:

$$fig. 1.2:$$

Ctnt= r.Cosθ+ r.Sinθ

Ara derivem on la variable és θ: $r.Cos\theta.\dot{\theta} + \mathrm{r.Sin}\theta.\dot{\theta}$

I ara elevem al quadrat: ctnt^2= $r^2.Cos^2\theta.\dot{\theta}^2 + \mathrm{r}^2.\mathrm{Sin}^2\theta.\dot{\theta}^2$

ja que $Cos^2\theta + \mathrm{Sin}^2\theta = 1$ i obtenim: ctnt^2= r^2.$\dot{\theta}^2$

Igualment quan x i y varien: només derivarem respecte ϕ i usarem també el recurs del teorema de pitàgores anterior, per tant obtindrem:

Ctnt= r.Sinθ.Sin $\phi + \mathrm{r}.$ Sinθ.Cosϕ

ara derivem on la variable és ϕ :

ctnt$=$ r. SinθCosϕ.$\dot{\phi}$ - r.Sinθ.Sinϕ.$\dot{\phi}$

al ser triangle rectangle,

ctnt^2$= \mathrm{r}^2. \mathrm{Sin}^2\theta. \mathrm{Sin}^2\phi. \dot{\phi}^2 + \mathrm{r}^2. \mathrm{Sin}^2\theta. \mathrm{Cos}^2\phi. \dot{\phi}^2$

On $\mathrm{Sin}^2\phi$+$\mathrm{Cos}^2\phi = 1$,és a dir que pel mateix procediment ens queda $r^2. \mathrm{Sin}^2\theta. \dot{\phi}^2$ (figura 1.3)

Com a conseqüència veiem que la figura 1.2 i la 1.3 estàn inscrites a la figura 1.1.

on la derivada parcial al quadrat de r es invariable, i té un valor constant i té a veure amb la part vibracional, que ara descubriré: [1/2μ. $\dot{r}^2$]+ [V(r)].

$\mu = m_1.m_2/m_1+m_2$.

Atenció que d'*Energies* també n'hi ha d'*electròniques*, E_e, que corresponen a l'estudi bàsic de la teoria atòmica de **Rutherford** seguit del perfeccionament de **Bohr**; partim de E= T+ V. E= -$Ze^2/2r$. Pel principi d'incertesa de **Heisenberg** i $p=h/\lambda$, m.v.r= n.ħ combinant l'expressió d'E amb les altres dóna $r= n^2.\hbar^2/(m.Z.e^2)$ segons **Max Planck** $E=h.\nu$, i $E= -(m.Z^2.e^4)/(n^2.\hbar^2.2)$ i

$E_i= -R'.Z^2.(1/n_i^2)$

Llavors, depenent de n o nivell electrònic (que en l'espectre corresponen a Lymann (n=1), Balmer (n=2),

Paschen (n=3), Brackett (n=4) i Pfund (n=5)) gaudirà d'una E o una altra.

$\Delta E = h.(\nu_j - \nu_i)$= $R.Z^2.(1/n_i - 1/n_j)$ on $n_j > n_i$ i R= R'.h.

És un estudi més profund que el del Hamiltonià de l'Equació d'Schrödinger ja que inclou les Energies de rotació, vibració + les conseqüents electròniques i no només les translacionals.

Se té en compte que X, Y, Z, r, θ, ϕ són totes variables del temps. X,Y,Z (els centres de masses) representen la part translacional. Suposem que es troben en el punt (0,0,0) de l'eix de coordenades, llavors, la seva massa és $m_1+ m_2$). La part d'θ i ϕ representen la fracció rotacional i cal usar els vectors $\boxed{x= x_2- x_1}$, $y= y_2- y_1$, i $z= z_2- z_1$.

Ens trobem amb què: $\boxed{m_1.x_1+ m_2.x_2= X (m_1+ m_2)= 0}$ si $x= x_2- x_1$
→ $x_1= -m_2.x_2/m_1$ $x= x_2-(-m_2.x_2/m_1)$ o $x= x_2(1+(m_2/m_1))$ →

$x= x_2 (m_1+ m_2)/m_1$ → $x_2= x.m_1/(m_1+ m_2)$

mentre que en el cas de x_1: $x_2= -m_1.x_1/m_2$ →

$x= (-m_1.x_1/m_2)- x_1$ → $x= x_1((-m_1/m_2)-1)$ → $x= x_1(-m_1-m_2)/m_2$
→ $x_1= -x.m_2/(m_1+m_2)$

i així amb les altres variables: y i z.

Ara continuem: $(m_1.m_2{}^2.\dot{x}^2)/(m_1+m_2)^2+$
$(m_2.m_1{}^2.\dot{x}^2)/(m_1+m_2)^2$

$\dot{x}^2.m_1.m_2(m_1+m_2)/(m_1+m_2)^2= \mu.\dot{x}^2$.

el terme de la part angular és: $(1/2)m_1.\dot{x_1}^2 + (1/2)m_2.\dot{x_2}^2$ i
$(1/2)m_1\dot{y}_1{}^2 + (1/2)m_2.\dot{y}_2{}^2$ a més del terme z.

I substituïnt-hi x_1 i x_2 obtenim $(1/2).\mu.\dot{x}^2$ (i per als altres:
$(1/2).\mu.\dot{y}^2$ i $(1/2).\mu.\dot{z}^2$).

Mentre que el cas de la variable r (el radi) representa l'única part vibracional i es conclou com a $\partial^2r/\partial t^2=0$ i $(\partial r/\partial t)^2=$ ctnt.

Si em permeteu faré una mica de poesia i de reflexió:

Què prefereixo més: fer-me imprescindible o evadir-me?.

Tot té coses favorables i altres d'adverses: és imposible que tot es faci correctament per a tothom! (les opinions i critiques també juguen). Qui fa realitat els somnis són els herois. No funciono a per la meva zona de confort ja que cal tenir present la meva responsabilitat: expandir el missatge que dinc a dins i aconseguir que el meu entorn sigui una bassa d'oli.

Com és que tot conté el seu oposat? tan en termes energètics com en materials i emocionals. El problema crec que rau en perdre la por a mirar fora de la "terra" i esperar resposta en forma de vibracions o missatges enviats a l'univers. Tan pot ser agradable com desagradable.

Quan percebo ambient intel·lectual o proper a l'expansió de coneixement i afí a la cultura i a crear noves tencdències i propostes originals que descriuen el que succeeix…vibro de satisfacció.

Com puc continuar si el meu entorn no ajuda a avançar?. Els somnis són bons però fins que no passes a l'estadi superior de fer-los come true, no serveixen; se'm pot donar el poder de la diferenciació que està àmpliament contrastada.

Per segons què sóc superàpid i em dedico a fer reals les hipótesis.

Dedueixo noves vessants entre allò que he pogut demostrar i entre allò que no. Quan sembla que s'acosta el final i tot se torça, en última instància hi ha la salvació.