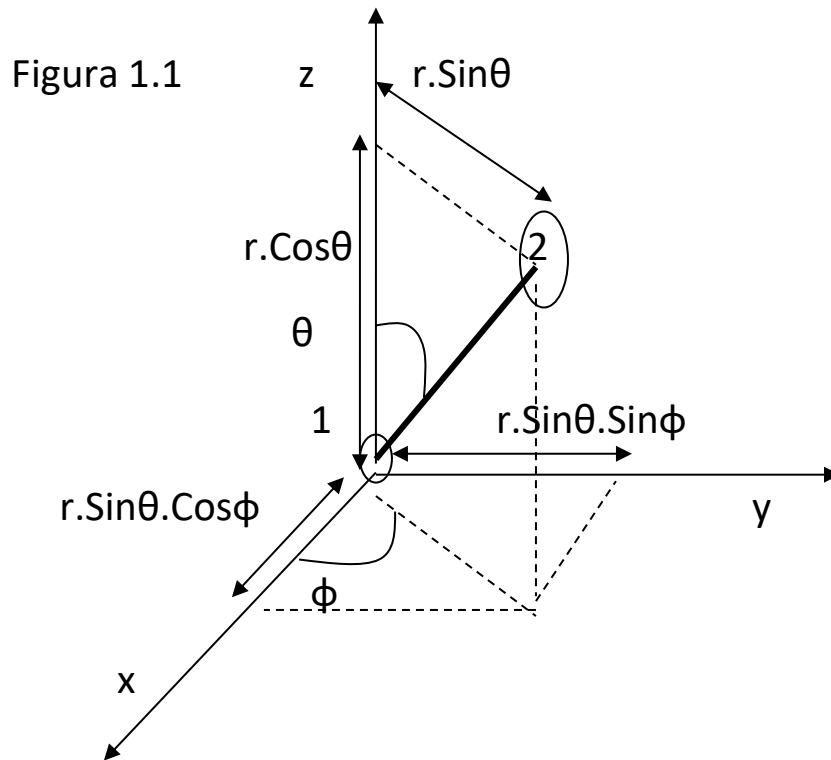


MASSA REDUÏDA EN L'EXPRESSIÓ DE L'ENERGIA D'UN ROTOR RÍGID:



Veiem que al transcriure en coordenades polars trobem

$\partial r / \partial t, \partial \theta / \partial t, \partial \phi / \partial t$ enlloc de $\partial x / \partial t, \partial y / \partial t, \partial z / \partial t$ o el que és el mateix:
 $\dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\phi}$

$\hat{H} = -(\hbar^2 / 2m) \nabla^2 + V(r)$ 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: $X_{cm} = m_1 \cdot x_1 / (m_1 + m_2) + m_2 \cdot x_2 / (m_1 + m_2)$

Igual amb Y_{cm} i Z_{cm} en el cas de 2-D o 3-D.



$$x_2 - x_1 = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi$$

$$y_2 - y_1 = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi$$

$$z_2 - z_1 = r \cdot \cos\theta$$

Trobem a partir de la equació d'Schrödinger que

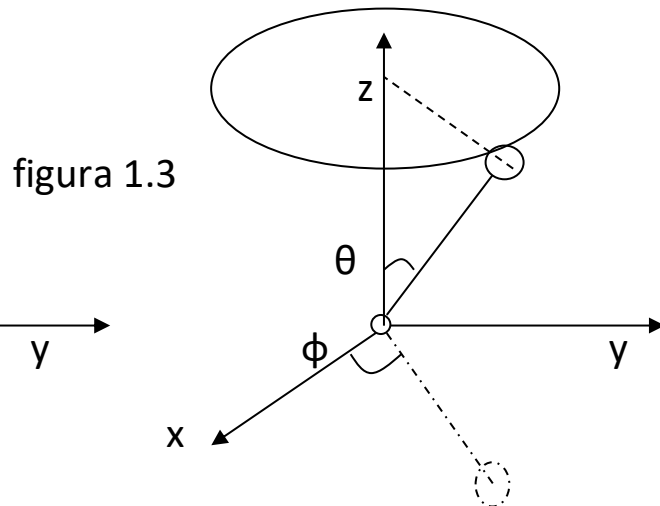
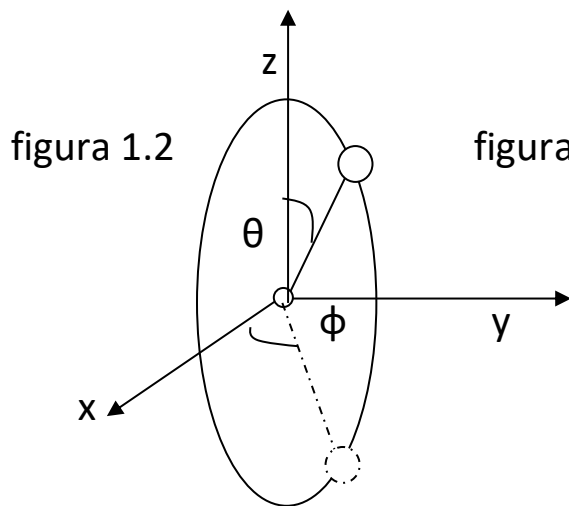
$$\nabla^2 \Psi + V(r) \Psi = E \cdot \Psi$$

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

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

$$r^2 \cdot \dot{\theta}^2 + r^2 (\sin^2 \theta) \dot{\phi}^2] + V(r) \quad (\text{figura 1.1})$$

En el cas del rotor rígida només hi caben 2 rotacions (la 3^{era} és sobre ella mateixa per tant no es considera)



on z varia i, per tant, θ també en aquest altre cas θ es manté constant i ϕ varia (òbviament x i y també).

recordant les següents desigualtats:

$$\|\vec{a}\vec{b}\| \leq \|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\| \quad \text{i} \quad \|\vec{a} + \vec{b}\| \leq \|\vec{a}\| + \|\vec{b}\| \quad \text{podem assimilar-les}$$

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:

$$c_{\text{nt}} = r \cdot \cos\theta + r \cdot \sin\theta$$

Ara derivem on la variable és θ : $r \cdot \cos\theta \cdot \dot{\theta} + r \cdot \sin\theta \cdot \dot{\theta}$

I ara elevem al quadrat ja que ens trobem amb un triangle rectangle: $c_{\text{nt}}^2 = r^2 \cdot \cos^2\theta \cdot \dot{\theta}^2 + r^2 \cdot \sin^2\theta \cdot \dot{\theta}^2$

ja que $\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$ i obtenim: $c_{\text{nt}}^2 = r^2 \cdot \dot{\theta}^2$

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

$$C_{\text{tnt}} = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi + r \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi$$

ara derivem on la variable és ϕ :

$$\dot{C}_{\text{tnt}} = r \cdot \sin\theta \cos\phi \cdot \dot{\phi} - r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi \cdot \dot{\phi}$$

al ser triangle rectangle,

$$\dot{C}_{\text{tnt}}^2 = r^2 \cdot \sin^2\theta \cdot \sin^2\phi \cdot \dot{\phi}^2 + r^2 \cdot \sin^2\theta \cdot \cos^2\phi \cdot \dot{\phi}^2$$

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

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