

NOTAS DE DIVULGACION

**EL METODO DE INTEGRACION DE HAMILTON
JACOBI Y LAS CONDICIONES DE SOMMERFELD**

por

MATEO F. CHICARRO

En un gran número de problemas, el método de integración de Hamilton-Jacobi se ha manifestado de sorprendente utilidad y concretamente, su aplicación a las condiciones cuánticas de Sommerfeld, ha conducido sin ambigüedad, directamente y en forma elegante, a las viejas teorías cuánticas, hoy rebasadas por las modernas Mecánicas Ondulatoria y Cuántica (1). Nos ha parecido útil traer a estas páginas la aplicación del expresado método a unas teorías que, aunque anticuadas, mantienen en vigor muchos de sus resultados fundamentales y cuya terminología e imágenes, pese a su imperfección, continúan siendo empleadas debido a su gran comodidad (2).

LAS CONDICIONES DE SOMMERFELD

El método de Sommerfeld consiste (3) en tratar el átomo como un sistema de puntos materiales sujetos a las leyes ordinarias de la Mecánica clásica, o a las de la Mecánica relativista si se quiere mayor precisión, y añadir a estas leyes algunas condiciones restrictivas que permiten únicamente ciertos movimientos, entre el infinito número de los posibles de la Mecánica clásica o relativista y, por consiguiente, solamente serán permitidos ciertos valores de la energía.

El sistema lo representaremos en coordenadas generalizadas y, por tanto, a cada coordenada q_i le corresponderá la componente generalizada del «momentum» o momento p_i , cuya definición recordaremos más adelante. Supondremos en lo que sigue que tanto p_i como q_i son funcio-

(1) SOMMERFELD: *Mechanics*, Nueva York, 1952 (Academic Press Inc.), pág. 238.

(2) MARCEL ROUAULT: *Physique atomique*, París, 1955 Armand Colin), pág. 58.

(3) PÉRSICO: *Fundamentals of Quantum Mechanics*, pág. 236. Nueva York, 1950 (Prentice-Hall).

nes periódicas del tiempo con período T_i . Por ejemplo: si una de las coordenadas q_i representa un ángulo tal que al aumentar en 2π obtenemos la misma configuración del sistema, entonces el período T_i relativo a dicha coordenada, es el tiempo necesario para que ésta aumente en 2π y diremos entonces que hay un grado de libertad de «rotación». Pero si las coordenadas oscilan periódicamente entre dos límites, entonces se dice que corresponden a grados de «libración» u «oscilación».

Los períodos T_i en general son de distinto valor y cuando esto sucede, el movimiento se llama «periódico múltiple», pero si los períodos T son iguales o comensurables el movimiento es «periódico», porque después de un cierto tiempo, que es el mínimo común múltiplo de los T_i el movimiento se repite periódicamente. Estos movimientos «periódicos» son casos particulares de los «periódicos múltiples».

Entre todos los sistemas periódicos múltiples vamos a limitarnos a aquellos sistemas de coordenadas generalizadas, tales que cada «momentum» p_i es función únicamente de la q_i correspondiente y no de todas las demás. Esta condición se expresa diciendo que las «variables» son «separables» lo que es equivalente a decir que la ecuación de Hamilton-Jacobi, que veremos en el próximo apartado, puede ser satisfecha por una función de la forma

$$W = \sum_i f_i(q_i)$$

en vez de por la expresión más general $W = f(q_1, q_2, \dots, q_f)$

Indudablemente todas estas condiciones son muy restrictivas, pero como se observa en la práctica, la mayoría de los sistemas que surgen en el estudio de la mecánica atómica las satisfacen y, por consiguiente, como vamos a ver, las condiciones de Sommerfeld son aplicables.

Como es bien sabido, un movimiento con f grados de libertad depende de $2f$ constantes α_i, β_i ($i = 1, 2, \dots, f$), las cuales están definidas por las condiciones iniciales. Sommerfeld impuso una restricción a estas constantes forzándolas a satisfacer las siguientes f condiciones: para cada coordenada se calcularán las llamadas «integrales de fase»

$$J_i = \oint p_i dq_i \quad (i = 1, 2, \dots, f)$$

que están extendidas a un ciclo entero de la misma coordenada. Ahora bien, puesto que los p_i dependen por hipótesis únicamente de los q_i y de f constantes α_i arbitrarias, la integral será una cierta función $J_i(\alpha_1, \dots, \alpha_i)$ de las constantes α exclusivamente. Obtendríamos, pues, un sistema de f ecuaciones, cuyos primeros miembros son las constantes J_i , y en los segundos estarían los α_i , sistema que podría ser resuelto en los α como funciones de las f constantes J .

Pues bien, las condiciones de Sommerfeld consisten precisamente en poner cada una de las integrales J iguales a un múltiplo de la constante h de Planck, es decir, escribiendo

$$\oint p_i dq_i = n_i h \quad (i = 1, 2, \dots, f)$$

en donde n_i es un número entero positivo y habrá, por tanto, tantas de estas condiciones como grados de libertad.

Los números n_i , llamados «números cuánticos», con un máximo de f podrán reemplazar a las constantes α . Así, en vez de introducir f constantes capaces de tomar valores continuos, se introduce un número igual de constantes que tomarán valores discretos.

Una de las constantes α_i puede ser identificada con el valor E de la energía total del sistema, y podemos mirar a ésta como una función de las f constantes J_i y, por tanto, de las n_i , lo que significa que la energía total E sólo puede tomar valores discretos dependientes de los números enteros n_i .

Se demuestra que los niveles de energía que normalmente se deducen están en buen acuerdo con los valores experimentales, y algunas veces este acuerdo es perfecto

EL METODO HAMILTON-JACOBI.

En breves líneas recordaremos en qué consiste este método, cuyo estudio corresponde a la Mecánica Analítica (2) y que en nuestro caso tiene por objeto integrar las ecuaciones del movimiento *cuando las fuerzas son conservativas y los enlaces independientes del tiempo*.

Se conoce con el nombre de «función lagrangiana» del sistema a la función

$$L = T - V$$

en donde T es la energía cinética y V la energía potencial y por supuesto L es función de las q_i y \dot{q}_i . Pues bien, se define como «hamiltoniano» o «función hamiltoniana» y se denota normalmente por H a la expresión

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L$$

en donde las p_i son los «momentum» conjugados de las coordenadas generalizadas q_i y están definidos como las derivadas parciales de la energía cinética:

$$p_i = \frac{\delta T}{\delta \dot{q}_i}$$

y, por tanto, puesto que en *nuestro caso* no hay enlaces dependientes del tiempo y las fuerzas son conservativas:

$$\left. \begin{aligned} 2T &= \sum_{i,j} a_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j \\ p_i &= \sum_j a_{ij} \dot{q}_j \end{aligned} \right\} \sum_i p_i \dot{q}_i = \sum_{i,j} a_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j = 2T$$

con lo que la función hamiltoniana será

$$H = 2T - L = 2T - (T - V) = T + V$$

es decir, que aquí H es precisamente la energía total del sistema, expresada en función de las coordenadas y de sus «momentum». A la energía total la designaremos por E .

Si en la expresión de H sustituimos cada p_i por la derivada parcial respecto a la correspondiente q_i de una cierta función desconocida W de las q_i , o sea hacemos $p_i = \frac{\delta w}{\delta q_i}$, tendremos la siguiente ecuación entre derivadas parciales, conocida con el nombre de «ecuación de Hamilton-Jacobi» para los sistemas conservativos

$$H\left(q_1, q_2, \dots, q_f, \frac{\delta w}{\delta q_1}, \dots, \frac{\delta w}{\delta q_f}\right) = E = \alpha_1 \quad (a)$$

Se podrá entonces buscar una integral completa de esta ecuación de la forma

$$W(q_1, q_2, \dots, q_f, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_f)$$

es decir, una solución que contendrá un número de constantes igual al de grados de libertad del problema. Todas estas constantes son las $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_f$. Puesto que W misma no interviene en (a) explícitamente, es determinada a una constante aditiva próxima y, por otra parte, una de las constantes, la α_1 , por ejemplo, está en exceso y puede ser reemplazada por una constante aditiva que permanece sin precisar. Podemos reemplazar α_1 por el parámetro de energía E . En resumen, la integral completa de (a) puede escribirse:

$$W = W(q_1, q_2, \dots, q_f, E, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_f) + \text{const.}$$

Obtenida W , se demuestra (1) que las ecuaciones del movimiento se deducen escribiendo las siguientes $2f$ relaciones entre las q_i, p_i y t , de las cuales las p_i y q_i pueden ser encontradas como funciones explícitas de t :

$$\begin{aligned} \frac{\delta w}{\delta q_i} &= p_i & (i = 1, 2, \dots, f) & \quad ,, & \quad \frac{\delta w}{\delta \alpha_1} &= t + \beta_1 \\ \frac{\delta w}{\delta \alpha_j} &= \beta_j & (j = 2, 3, \dots, f) & \quad ,, & & \end{aligned}$$

en donde las β son otras f constantes arbitrarias.

De estas ecuaciones, las $(f - 1)$ segundas describen «la configuración geométrica» de la trayectoria de cada punto; la tercera ecuación determina la ley, de acuerdo con la cual los puntos se mueven a lo largo de la trayectoria y las ecuaciones primeras determinan los «momentum» y, por tanto, las velocidades como funciones de q_i y α_i . Las constantes β tienen el significado de fases.

A menudo, como hemos dicho anteriormente y veremos en la aplicación práctica, la ecuación (a) puede ser resuelta por el método de separación de variables y éste es el caso en el que las condiciones de Sommerfeld pueden ser aplicadas.

(1) PÉRSICO: *Fundamentals of Quantum Mechanics*, pág. 235. Nueva York, 1950 (Prentice-Hall); SOMMERFELD: *Mechanics*, pág. 233. Nueva York, 1952 (Academic Press Inc).

ORBITAS ELIPTICAS DE UN ATOMO HIDROGENOIDE

El estudio del movimiento de un electrón respecto del núcleo es realmente el problema que se plantea con dos cuerpos que se mueven bajo la influencia de fuerzas centrales mutuas, que, como vamos a ver, es reducible al problema equivalente del movimiento de un punto de masa μ , conocida con el nombre de «masa reducida», sometido a una fuerza central atractiva de magnitud $\frac{Ze^2}{r^2}$.

Sean m y M las masas del electrón y del núcleo, respectivamente. Las fuerzas de acción mutua derivarán de un potencial $V(\bar{r}) = V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$, en donde representamos (. . fig. 1.^a) por \bar{r}_1 y \bar{r}_2 los radios vectores del electrón y del núcleo respecto al origen O de coordenadas. \bar{r} será el vector diferencia $\bar{r}_1 - \bar{r}_2$ de origen p_2 (donde consideramos concentrada la masa del núcleo) y de extremidad p_1 (donde suponemos se encuentra en un determinado instante la masa del electrón). Por \bar{R} designaremos el radio vector del centro de gravedad G del sistema núcleo-electrón.

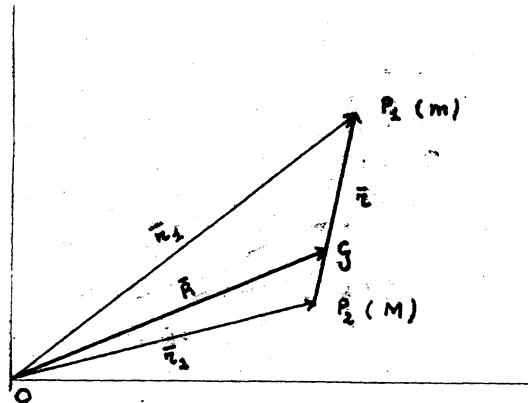


Fig. 1.^a

Este sistema núcleo-electrón tiene seis grados de libertad y estará determinado por seis coordenadas generalizadas independientes. Escogeremos tres como las componentes del radio vector \bar{R} del c.d.g. G del sistema. Las otras tres componentes pueden ser las correspondientes al vector \bar{r} que antes hemos definido.

Con las anteriores notaciones (1), la función lagrangiana tomará la forma

$$L = T \left(\frac{d\bar{r}}{dt}, \frac{d\bar{r}}{dt} \right) - V(\bar{r})$$

Ahora bien, el segundo teorema de Koenig nos dice que la fuerza

(1) HERBERT GOLDSTEIN: *Classical Mechanics*, pág. 58. Addison —Wesley Press— Cambridge, 42 —Mass— 1951.

viva de un sistema material en un movimiento respecto a ejes fijos es igual a la fuerza viva en este movimiento del centro de gravedad, supuesta concentrada toda la masa en él, aumentada de la fuerza viva en el movimiento alrededor del centro de gravedad, por lo que la energía cinética del sistema será

$$T = \frac{1}{2} (m + M) \left(\frac{d\bar{R}}{dt} \right)^2 + T'$$

en donde

$$T' = \frac{1}{2} m \left(\frac{d\bar{G}p_1}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} M \left(\frac{d\bar{G}p_2}{dt} \right)^2$$

pero fácilmente se deduce que

$$\bar{G}p_1 = + \frac{M}{m + M} \bar{p}_2 p_1 = + \frac{M}{m + M} \bar{r}$$

$$\bar{G}p_2 = - \frac{m}{m + M} \bar{p}_2 p_1 = - \frac{m}{m + M} \bar{r}$$

y derivados estos vectores tendremos

$$\frac{d\bar{G}p_1}{dt} = + \frac{M}{m + M} \cdot \frac{d\bar{r}}{dt}$$

$$\frac{d\bar{G}p_2}{dt} = - \frac{m}{m + M} \cdot \frac{d\bar{r}}{dt}$$

con lo que la energía cinética relativa será finalmente

$$T' = \frac{1}{2} \frac{mM}{m + M} \left(\frac{d\bar{r}}{dt} \right)^2$$

y, por lo tanto, el lagrangiano

$$L = \frac{m + M}{2} \left(\frac{d\bar{R}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{mM}{m + M} \left(\frac{d\bar{r}}{dt} \right)^2 - V(\bar{r})$$

Salta a la vista que las tres coordenadas de \bar{R} son cíclicas y, por lo tanto, el c.d.g. del sistema o está en reposo o se mueve uniformemente, y en ninguna de las ecuaciones del movimiento para \bar{r} aparecerán términos que comprendan \bar{R} o su derivada. Aquí parece indicado el proceso de «coordenadas ignoradas» y podremos hacer caso omiso del primer término del lagrangiano y lo que nos queda es exactamente lo que habríamos obtenido considerando un centro de fuerzas fijo a la distancia \bar{r} , del cual se encontrase una partícula de masa reducida $\mu = \frac{mM}{m + M}$,

sometida a la fuerza atractiva que deriva del potencial $V(\bar{r}) = -\frac{Ze^2}{r}$.

Por pasar constantemente la fuerza por el punto p_2 , el momento cinético respecto a este punto es constante, es decir:

$$\sigma r_2 = \bar{r} \times \bar{p} = \text{cte.}$$

El movimiento es siempre plano y \bar{r} se conserva perpendicular a $\bar{\sigma}$, cuya dirección es fija en el espacio. Suponemos $\bar{\sigma}$ distinto de cero, pues de lo contrario el movimiento sería rectilíneo. La posición de la partícula en el espacio depende de tres coordenadas, que pueden ser el acimut θ , la colatitud ψ y la distancia radial \bar{r} ; pero si escogemos el eje polar en la dirección $\bar{\sigma}$, el movimiento tiene lugar, por lo que acabamos de indicar, en el plano perpendicular a dicho eje. La coordenada ψ tiene entonces el valor constante $\frac{\pi}{2}$, con lo que podremos reducir el caso al movimiento plano, y tomando las coordenadas polares θ y r el lagrangiano será

$$L = \frac{\mu}{2} \left(\frac{d\bar{r}}{dt} \right)^2 - V(r) = \frac{\mu}{2} [\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2] + \frac{Ze^2}{r}$$

y los momentos conjugados:

$$p_r = \mu \dot{r}$$

$$p_\theta = \mu r^2 \dot{\theta}$$

que sustituidos en la anterior

$$L = \frac{1}{2\mu} \left[p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right] + \frac{Ze^2}{r} \quad [1]$$

con lo que el hamiltoniano vendrá dado por

$$H = T + V = \frac{1}{2\mu} \left[p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right] - \frac{Ze^2}{r} = E = \alpha_1$$

y la ecuación de Hamilton-Jacobi será

$$\left(\frac{\delta w}{\delta r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\delta w}{\delta \theta} \right)^2 = 2\mu \left[\alpha_1 + \frac{Ze^2}{r} \right] \quad [2]$$

Ahora, como ya se indicó, aplicaremos el método de «separación de variables» y probaremos para resolver [2] una solución de la forma

$$W = R + \Phi \left\{ \begin{array}{l} \frac{\delta w}{\delta r} = \frac{dR}{dr} \\ \frac{\delta w}{\delta \theta} = \frac{d\Phi}{d\theta} \end{array} \right.$$

en la cual R sólo depende de r y Φ únicamente de θ . Sustituyendo tendremos

$$\left(\frac{dR}{dr}\right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{d\Phi}{d\theta}\right)^2 = 2\mu \left[\alpha_1 + \frac{Ze^2}{r}\right]$$

lo que exige necesariamente que $\frac{d\Phi}{d\theta} = \text{constante} = c$, luego

$$\left(\frac{dR}{dr}\right)^2 = 2\mu \left[\alpha_1 + \frac{Ze^2}{r}\right] - \frac{c^2}{r^2}$$

que puede ser resuelta por una cuadratura.

Si a la constante c la designamos por α_2 , la ecuación diferencial [2] queda desdoblada en las siguientes:

$$\frac{\delta w}{\delta r} = \left[2\mu \left(\alpha_1 + \frac{Ze^2}{r} \right) - \frac{\alpha_2^2}{r^2} \right]^{1/2} \quad [3]$$

$$\frac{\delta w}{\delta \theta} = \alpha_2 \quad [4]$$

Integrando este sistema obtendremos:

$$W = \int_{r_0}^r \left[2\mu \left(\alpha_1 + \frac{Ze^2}{r} \right) - \frac{\alpha_2^2}{r^2} \right]^{1/2} dr + \alpha_2 \theta + \text{const.}$$

Pudiéndose elegir el límite más bajo de la integración r_0 arbitrariamente, puesto que afectará únicamente a la magnitud de la constante aditiva.

Ahora ya podemos entrar en contacto con las condiciones de Sommerfeld. Tenemos que igualar las integrales W a un múltiplo de la constante de Planck. Es decir:

$$\oint p_i dq_i = n_i h$$

lo que en nuestro caso dará con ayuda de las [3] y [4] las siguientes integrales de fase:

$$\oint p_\theta d\theta = \oint \frac{\delta w}{\delta \theta} d\theta = \int_0^{2\pi} \alpha_2 d\theta = 2\pi \alpha_2 = n_\theta h \quad [5]$$

$$\oint p_r dr = \oint \frac{\delta w}{\delta r} dr = 2 \int_{r \text{ mínimo}}^{r \text{ máximo}} \left[2\mu \left(\alpha_1 + \frac{Ze^2}{r} \right) - \frac{\alpha_2^2}{r^2} \right]^{1/2} dr = n_r h \quad [6]$$

De la primera deducimos el valor del «número cuántico acimutal n_θ »:

$$n_\theta = \frac{2\pi}{h} \alpha_2 \quad [7]$$

que es idéntica a la condición de Bohr para la órbita circular; lo que demuestra que las condiciones de Sommerfeld son una generalización para un sistema con varios grados de libertad de la condición escrita por Bohr para las órbitas circulares del átomo de hidrógeno.

La integración de la segunda condición de Sommerfeld nos va a permitir deducir el valor del «número cuántico radial n_r » y la forma más rápida y cómoda para llevar a cabo la integración consiste en acudir a las funciones de variable compleja aplicando el método de los residuos.

La integral que figura en [6] podemos ponerla en la forma:

$$I = \int_{r \text{ mín}}^{r \text{ máx}} \left[2\mu\alpha_1 + \frac{2\mu Ze^2}{r} - \frac{\alpha_2^2}{r^2} \right]^{1/2} dr = \int_{r \text{ mín}}^{r \text{ máx}} \frac{1}{r} \sqrt{Ar^2 + 2Br - C} dr$$

en donde

$$\begin{aligned} A &= 2\mu\alpha_1 = 2\mu E \\ B &= \mu Ze^2 \\ C &= \alpha_2^2 \end{aligned}$$

Si ahora llamamos r_1 y r_2 a los valores de r que anulan al trinomio que figura bajo el radical tendremos

$$I = \int_{r_1}^{r_2} \frac{1}{r} \sqrt{A(r - r_1)(r - r_2)} dr$$

Desde luego como el valor de r debe estar comprendido entre r_1 y r_2 el coeficiente A debe ser menor que cero, lo que exige que la energía total E también lo sea.

Ahora bien en el campo complejo la función

$$f(z) = \frac{1}{z} \sqrt{A(z - z_1)(z - z_2)}$$

tiene dos determinaciones y será necesario precisar de cuál partimos para llevar a cabo la integración.

Consideremos el dominio Δ limitado por una parte por la circunferencia C , de centro 0 y radio muy grande R y por otra parte por un «lacio» ζ que une los puntos r_1 y r_2 sobre el eje real. En el interior de Δ la función $f(z)$ es uniforme y no hay otra singularidad que el polo simple $z = 0$. Se tiene, pues, tomando siempre las integrales en el sentido

directo, designando por R_0 el residuo relativo a dicho polo y aplicando el teorema de los residuos (1):

$$\int_{\zeta} = \int_c - 2\pi i R_0$$

Antes de llevar a cabo las integraciones efectuemos la siguiente conocida sustitución:

$$\begin{aligned} z - r_1 &= \rho_1 e^{i\theta_1} \\ z - r_2 &= \rho_2 e^{i\theta_2} \end{aligned}$$

con lo que

$$f(z) = \frac{\sqrt{A\rho_1\rho_2}}{z} e^{i\frac{\theta_1 + \theta_2}{2}}$$

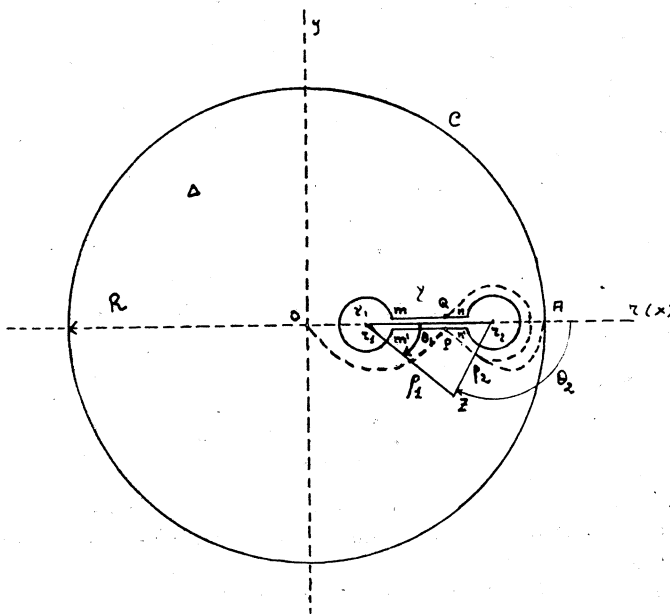


Fig. 2.^a

Veamos ahora las diferentes integraciones:

1.º La integral a lo largo de las pequeñas circunferencias de centros r_1 y r_2 es nula en el límite. En efecto, fijémonos en el círculo de la izquierda que rodea el punto r_1 y llamemos a al radio de dicho círculo, tomándolo lo suficientemente pequeño para que en todo punto de él se tenga (llamando ϵ a un número positivo dado de antemano):

$$\left| (z - r_1) \frac{\sqrt{A(z - r_1)(z - r_2)}}{z} \right| < \epsilon$$

(1) E. LAINÉ: *Précis d'Analyse Mathématique*, pág. 191, tomo I (L. Vuibert), París, 1947

es decir,

$$\left| \frac{\sqrt{A(z-r_1)(z-r_2)}}{z} \right| < \varepsilon/a$$

De aquí se deduce designando por ζ_1 la circunferencia de radio a

$$\left| \int_{\zeta_1} \frac{\sqrt{A(z-r_1)(z-r_2)}}{z} dz \right| < \frac{\varepsilon}{a} \cdot 2\pi a = 2\pi\varepsilon$$

que tiende a cero con $|z-r_1|$. Lo mismo demostraríamos con respecto a la otra circunferencia ζ_2 de centro r_2 y radio a al tender éste a cero. La integral a lo largo de ζ queda, pues, reducida a

$$\int_{\zeta} = \int_{m'n'} + \int_{nm}$$

Aunque por consideraciones cinemáticas se comprende que cuando se sigue el camino $m'n'$ hay que tomar la determinación positiva para el radical y la negativa al seguir el camino nm , utilizaremos un método que nos permite seguir paso a paso la determinación a tomar en las distintas integraciones que aquí se presentan.

Sea un punto P del borde inferior $m'n'$ del «lacito». En este punto podemos tomar $\theta_1 = 0$ y $\theta_2 = -\pi$ (ver figura 2). Ahora bien a lo largo de $m'n'$ se tiene:

$$f(z) = \frac{\sqrt{A(r-r_1)(r_2-r)}}{r} e^{-\frac{\pi}{2}i}$$

$$f(z) = \frac{i\sqrt{A(r-r_1)(r-r_2)}}{r} e^{-\frac{\pi}{2}i} =$$

$$f(z) = \frac{\sqrt{A\rho_1\rho_2}}{z} e^{i\frac{\theta_1+\theta_2}{2}} = -(i)^2 \frac{\sqrt{A(r-r_1)(r-r_2)}}{r} = \frac{\sqrt{A(r-r_1)(r-r_2)}}{r}$$

con lo que

$$\int_{m'n'} f(z) dz = \int_{m'n'} \frac{\sqrt{A(r-r_1)(r-r_2)}}{r} dr = I$$

Análogamente a lo largo del camino mn , se tiene como se ve siguiendo la línea de puntos que une P con Q:

$$f(z) = i \frac{\sqrt{A(r-r_1)(r-r_2)}}{r} e^{\pi i/2} =$$

$$= -\frac{\sqrt{A(r-r_1)(r-r_2)}}{r}$$

$$\int_{nm} f(z) dz = - \int_{nm} \frac{\sqrt{A(r-r_1)(r-r_2)}}{r} dr =$$

$$\int_{mn} \frac{\sqrt{A(r-r_1)(r-r_2)}}{r} dr = I$$

Resumiendo

$$\int \zeta = \int_{m'n'} + \int_{nm} = 2I$$

2.º Sea M el punto en el que la circunferencia de radio R encuentra el semieje real positivo. Vamos a ir desde el punto P al M siguiendo también el camino punteado de la figura 2. En el punto M tendremos:

$$\left. \begin{aligned} \rho_1 &= R - r_1, \theta_1 = 0 \\ \rho_2 &= R - r_2, \theta_2 = 0 \end{aligned} \right\} f(z) = \frac{\sqrt{A(R-r_1)(R-r_2)}}{R}$$

pero aquí

$$\left. \begin{aligned} f(z) &\rightarrow \sqrt{A} \\ R &\rightarrow \infty \end{aligned} \right\} |zf(z)| \neq 0 \quad R \rightarrow \infty$$

luego la integral $\int_c f(z) dz$ tiene un valor que vamos a calcular, para lo cual haremos el estudio de la función en las proximidades del infinito.

El residuo R_∞ de $f(z)$ en el infinito, será igual (1) a la integral $\frac{1}{2\pi i} \int_c f(z) dz$ tomada a lo largo de C en un sentido tal que deje a la izquierda la parte del plano en que se encuentra el punto del infinito, es decir, en el sentido retrógrado, luego

$$R_\infty = - \frac{1}{2\pi i} \int_c f(z) dz$$

Si hacemos $z = \frac{1}{u}$, $dz = -\frac{1}{u^2} du$, cuando z describa (C) en el sentido directo, u describirá una pequeña circunferencia (δ) alrededor del origen en el sentido retrógrado; se tendrá, por tanto, *estando calculadas siempre las integrales en el sentido directo:*

$$\int_c f(z) dz = - \int_\delta \varphi(u) \left(-\frac{du}{u^2} \right) = \int_\delta \frac{\varphi(u)}{u^2} du$$

(1) E. LAINÉ: *Précis d'Analyse Mathématique*, tomo I, pág. 203.

y, finalmente,

$$R_{\infty} = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\delta} \frac{\varphi(u)}{u^2} du$$

Si llamamos a_1 al coeficiente del término en u del desarrollo de $\varphi(u)$ éste será el residuo de $\frac{\varphi(u)}{u^2}$ en el origen, y se tendrá

$$R_{\infty} = -a_1$$

Calculémoslo en nuestro caso concreto:

$$\varphi(u) = \sqrt{A + 2Bu - Cu^2} = A^{1/2} + A^{-1/2} Bu + \dots$$

$$a_1 = A^{-1/2} B$$

$$R_{\infty} = -\frac{B}{\sqrt{A}}$$

y, por consiguiente, la integral valdrá:

$$\int_c f(z) dz = \int_c \frac{\sqrt{A(z-r_1)(z-r_2)}}{z} dz = -2\pi i R_{\infty} = \frac{2\pi i B}{\sqrt{A}}$$

3.º Nos queda aún por determinar el residuo R_0 de la función $f(z)$ en el polo de primer orden $z = 0$.

La fórmula general (1) que debemos aplicar y que da su valor en un punto polo de orden m es:

$$\frac{1}{(m-1)!} \left\{ \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}} [(z-a)^m f(z)] \right\}_{z=a}$$

Aquí $a = 0$ y $m = 1$ luego

$$R_0 = [zf(z)]_{z=0} = [\sqrt{A(z-r_1)(z-r_2)}]_{z=0}$$

Para calcularlo veamos la determinación que le corresponde, para lo cual seguiremos el camino que va desde P al origen.

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} \rho_1 = r_1, \theta_1 = -\pi \\ \rho_2 = r_2, \theta_2 = -\pi \end{aligned} \right\} [\sqrt{A(z-r_1)(z-r_2)}]_{z=0} &= \sqrt{A\rho_1\rho_2} e^{i \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}} = \\ &= \sqrt{Ar_1r_2} e^{-\pi i} = -\sqrt{Ar_1r_2} \end{aligned}$$

pero $r_1r_2 = -\frac{C}{A}$ luego

$$R_0 = \sqrt{-C}$$

(1) E. LAINÉ: Obra citada, tomo I, pág. 190.

En fin teniendo en cuenta los resultados de estos tres apartados que preceden tendremos

$$\int_{\zeta} = \int_c - 2\pi i R_0 \left. \right\} \int_{r_1}^{r_2} \frac{\sqrt{Ar_2 + 2Br - C}}{r} dr = \pi i \left[\frac{B}{\sqrt{A}} + \sqrt{-C} \right]$$

$$2I = 2\pi i \frac{B}{\sqrt{A}} + 2\pi i \sqrt{-C}$$

y de aquí

$$\oint p_r dr = 2 \int_{r_1}^{r_2} \left[2\mu \left(\alpha_1 + \frac{Ze_2}{r} \right) - \frac{\alpha_2^2}{r^2} \right]^{1/2} dr = 2\pi i \left[\frac{B}{\sqrt{A}} + \sqrt{-C} \right]$$

Sustituyendo A, B y C por sus valores y teniendo en cuenta que esta integral es igual a $n_r h$ obtendremos:

$$n_r h = 2\pi i \left[\frac{\mu Ze_2}{\sqrt{2\mu\alpha_1}} + \sqrt{-\alpha_2^2} \right]$$

pero $\alpha_1 = E$ y $\alpha_2 = \frac{n_\theta h}{2\pi}$; luego sucesivamente

$$n_r h = 2\pi i \frac{\mu Ze^2}{\sqrt{2\mu E}} - n_\theta h$$

$$(n_r + n_\theta)h = nh = \frac{2\pi i \mu Ze^2}{\sqrt{2\mu E}}$$

Al número $n = n_r + n_\theta$ se le llama «número cuántico total», y en función de él la energía total del electrón sobre una órbita elíptica tendrá por expresión

$$E = - \frac{2\pi^2 \mu Z^2 e^4}{n^2 h^2}$$

que nos dice que todas las órbitas correspondientes a un mismo valor del número cuántico total n tienen la misma energía.

Con lo expuesto anteriormente queda justificada la utilidad del método de integración de las ecuaciones de Hamilton-Jacobi que nos ha conducido, como dijimos al principio, de un modo natural a la primitiva teoría cuántica.