



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Trabajo Fin de Grado

Integración impropia. Aplicaciones en la Química y la Física

Alumno/a: Azahara López Muñoz

Junio, 2023



UNIVERSIDAD DE JAÉN



Trabajo Fin de Grado

Integración impropia. Aplicaciones en la Química y la Física

Alumna: Azahara López Muñoz

Jaén, junio, 2023

ÍNDICE

RESUMEN	1
ABSTRACT	1
PREÁMBULO	2
1. INTRODUCCIÓN	3
2. PROBLEMAS DE APLICACIÓN.....	5
2.1. Fuerza electrostática.....	5
<i>Problema 1.....</i>	5
2.2. Energía potencial electrostática	5
<i>Problema 2.....</i>	5
2.3. Rotor lineal	6
<i>Problema 3.....</i>	6
2.4. Distribución de Maxwell-Boltzmann.....	6
<i>Problema 4.....</i>	6
<i>Problema 5.....</i>	6
3. LA INTEGRAL DEFINIDA (RIEMANN).....	7
3.1. Introducción	7
3.2. Definiciones	8
3.2.1. Partición de un intervalo.....	8
3.2.2. Norma o diámetro de una partición.....	8
3.2.3. Suma superior y suma inferior.	8
3.2.4. La integral como límite de sumas de Darboux.....	9
3.2.5. Propiedades de las integrales.....	13
3.3. Cómo calcular integrales. El teorema fundamental del cálculo	13
3.3.1. Integral indefinida.....	14
3.3.2. Teorema fundamental del cálculo	14
3.3.3. Regla de Barrow.....	16
4. INTEGRALES IMPROPIAS	17
4.1. Integrales en intervalos no acotados: Integrales impropias de primera especie	17
4.1.1. Criterios de convergencia para integrales impropias de primera especie	18
4.2. Integrales de funciones no acotadas: Integrales impropias de segunda especie	19
4.2.1. Criterios de convergencia para integrales impropias de segunda especie	21
4.3. Propiedades de las integrales impropias	22
5. RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE APLICACIÓN	23
5.1. Fuerza electrostática.....	23
<i>Problema 1.....</i>	23
5.2. Energía potencial electrostática	25
<i>Problema 2.....</i>	25

5.3. Rotor lineal	26
<i>Problema 3.....</i>	<i>26</i>
5.4. Distribución de Maxwell-Boltzmann.....	29
<i>Problema 4.....</i>	<i>29</i>
<i>Problema 5.....</i>	<i>31</i>
6. CONCLUSIÓN.....	34
7. BIBLIOGRAFÍA	35

RESUMEN

En ocasiones, en ciencias como la Química y la Física, se nos presentan diversos casos en los que se hacen necesarias las llamadas integrales impropias. Lo que se pretende con esta memoria es acercar al lector un método de cálculo matemático para conseguir una resolución más sencilla de este tipo de integrales. Es por ello que, a lo largo de este trabajo, se presentarán ejemplos de problemas de aplicación en los que hay que utilizar este método de cálculo.

Como es de esperar, previamente a la resolución de los mismos, se fundamentarán las integrales impropias dotándolas del corpus teórico correspondiente.

ABSTRACT

Sometimes, in sciences such as Chemistry and Physics, we are presented with various cases in which the so-called improper integrals are necessary. What is intended with this report is to bring the reader a method of mathematical calculation to achieve a simpler resolution of this type of integrals. That is why, throughout this work, will be presented examples of problems in which this calculation method must be used.

As expected, prior to the resolution of the same, the improper integrals will be based by providing them with the corresponding theoretical corpus.

PREÁMBULO

La siguiente memoria tiene como objetivo culminar los estudios del Grado de Química de la Universidad de Jaén. En dicha memoria se incorporarán, desarrollarán y aplicarán los contenidos de formación recibidos durante el grado. Cabe resaltar que lo que se busca es adquirir competencias como la aplicación de métodos matemáticos al estudio de procesos físicos y químicos, capacidad de análisis, razonamiento crítico y saber interpretar los conceptos matemáticos que hay detrás de procesos físicos y químicos.

La memoria consta de seis secciones. La primera se trata de una sección de introducción de la historia del Cálculo y su evolución a lo largo del tiempo. A continuación, se expondrán una serie de problemas de aplicación química y física en los cuales se nos presentan las llamadas integrales impropias. Esta segunda sección nos servirá para motivar al lector y justificar el contenido de la memoria. En la tercera sección, incorporaremos unos conocimientos básicos y generales sobre las integrales y los teoremas que nos permiten hacer uso de las mismas del modo que conocemos. En la cuarta sección, una vez adquiridos unos conocimientos generales, nos adentraremos en la justificación teórica del tipo de integrales llamadas impropias, integrales que nos aparecen en los problemas de aplicación. En la quinta sección, se procederá a resolver numéricamente los problemas expuestos en la segunda sección, incorporando un fundamento químico y un análisis de los resultados. Para finalizar, se recogerán una serie de conclusiones que nos ofrece esta memoria.

A la hora de la redacción de este trabajo de tipo bibliográfico, se ha tomado como referencia el libro *Matemáticas para las ciencias aplicadas*, el cual se puede encontrar en la Biblioteca de la Universidad de Jaén tanto de manera física como en un archivo PDF virtual. Este libro de matemáticas fue escrito por el químico Erich Steiner y nos servirá como base para ver las herramientas matemáticas necesarias para la resolución de algunos ejemplos de problemas químicos y físicos que se expondrán más adelante.

1. INTRODUCCIÓN

La invención del Cálculo en los últimos años del siglo XVII supuso un gran cambio en la historia de las matemáticas; es en este momento cuando aparecen las matemáticas modernas, ya que este suceso permitió el progreso de varias ramas de las mismas. [1]

Antes del Cálculo, las matemáticas únicamente eran capaces de describir lo fijo y estático. Con la aparición del mismo, se pudo avanzar en ámbitos como la descripción del movimiento y de lo dinámico, la resolución y unificación de los problemas de cálculo de áreas y volúmenes, el trazo de tangentes a curvas y la obtención de valores máximos y mínimos. Además, también permitió definir el concepto de continuidad y manejar procesos infinitos. Pronto aparecieron múltiples aplicaciones del Cálculo y sus derivaciones en campos como la física, la química y las ciencias naturales, hasta llegar a las ciencias sociales. [1]

En el siglo XVII, Newton, con la ayuda de su profesor Isaac Barrow, demostró la relación inversa que existía entre el cálculo de áreas y el cálculo de tangentes. Aparece así un motivo para considerar que la derivación y la integración son operaciones con una relación. Ambas se muestran como un proceso analítico que puede aplicarse al estudio de curvas. Sin embargo, fue Leibniz quién ahondó aún más en la diferencial dx y en las reglas básicas del cálculo diferencial $d(x + y) = dx + dy$ y $d(xy) = xdy + ydx$. Un par de años después publicó un artículo donde explicaba el significado del símbolo $\int$ de integración. [1]

Fue en el siglo XVIII cuando los avances en las matemáticas dieron paso a la aplicación de las mismas en las ciencias naturales, particularmente en la Mecánica. Aparecen así diversas aplicaciones como la Teoría de Vibraciones, la Dinámica de Partículas, la Teoría de Cuerpos Rígidos, la Mecánica de Cuerpos Elásticos y Deformables y la Mecánica de Fluidos. Al finalizar el siglo XVIII, los matemáticos ya habían notado ciertas limitaciones e incongruencias en las bases del cálculo diferencial, apareciendo así la necesidad de aclarar las propiedades de continuidad e integrabilidad de las funciones. Fue entonces cuando Cauchy define el concepto de derivada de una función y demuestra sus propiedades, define también la integral

definida de una función continua en un intervalo y formula el Teorema Fundamental del Cálculo, donde establece la relación inversa entre los procesos de derivación e integración de funciones. El siguiente progreso del cálculo lo hizo Bernhard F. Riemann, introduciendo el concepto de funciones discontinuas y aplicando el proceso de integración para este tipo de funciones. [1]

2. PROBLEMAS DE APLICACIÓN

En esta segunda sección, como hemos indicado inicialmente, se mostrarán algunos problemas de situaciones que aparecen en las ciencias químicas y físicas. Estas situaciones tienen una resolución algo compleja si no conocemos el método adecuado para ello. En dicha resolución, es necesaria la utilización de una ampliación de la noción de integral definida. Con esta ampliación nos referimos a las llamadas integrales impropias, principales protagonistas de esta memoria.

Esta parte no es más que una sección que tiene por objetivo justificar la necesidad de introducir una herramienta matemática más avanzada como son las integrales impropias. Es por ello que dejaremos la resolución de estos problemas para más adelante, después de haber justificado este nuevo método teóricamente.

2.1. Fuerza electrostática

Problema 1

Sean dos cargas semejantes (dos núcleos o dos electrones), infinitamente separadas inicialmente. Hallar el trabajo para llevar q_2 a una distancia x de q_1 . El trabajo es la integral de la fuerza, y como están separadas infinitamente es necesario resolver una integral de las llamadas impropias [2]:

$$W = - \int_{\infty}^x F(x) dx \quad (2.1)$$

2.2. Energía potencial electrostática

Problema 2

Sabiendo que el trabajo que debe efectuarse contra la fuerza interna para traer dos cargas desde una separación infinita a una separación x es $W = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0 x}$. Hallar la energía potencial del sistema (V) sabiendo que esta viene dada por la integral impropia [2]:

$$\int_{\infty}^x dV = - \int_{\infty}^x F(x) dx \quad (2.2)$$

2.3. Rotor lineal

Problema 3

Una expresión aproximada para la función de partición rotacional de un rotor lineal es:

$$q_r = \int_0^{\infty} (2J + 1) e^{-J(J+1)\theta_r/T} dJ \quad (2.3)$$

donde $\theta_r = \hbar^2/2Ik$, es la temperatura rotacional, I es el momento de inercia y k es la constante de Boltzmann. Evaluar la integral impropia. [2]

2.4. Distribución de Maxwell-Boltzmann

Problema 4

La probabilidad de que una molécula de masa m en un gas a una temperatura T tenga velocidad v viene dada por la distribución de Maxwell-Boltzmann:

$$f(v) = 4\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 \cdot e^{-mv^2/2kT} \quad (2.4)$$

donde k es la constante de Boltzmann. Halle la velocidad media que viene dada por la integral impropia [2]:

$$\langle v \rangle = \int_0^{\infty} v f(v) dv \quad (2.5)$$

Problema 5

Hallar la raíz de la velocidad cuadrática media $\sqrt{\overline{v^2}}$, sabiendo que $\overline{v^2}$ viene dada por la integral impropia [2]:

$$\overline{v^2} = \int_0^{\infty} v^2 f(v) dv \quad (2.6)$$

Hemos visto que todas las situaciones presentadas hasta ahora requieren de la utilización de integrales impropias para su resolución. Es por ello que, a continuación, se fundamentarán teóricamente este tipo de integrales haciendo un recordatorio de la integral de Riemann, a partir de la cual se extenderá el concepto de integral impropia.

3. LA INTEGRAL DEFINIDA (RIEMANN)

3.1. Introducción

Dada una función f positiva, acotada y definida en un intervalo $[a, b]$, se pretende hallar el área comprendida entre la gráfica de la curva, el eje de abscisas y las rectas $x = a$, $x = b$.

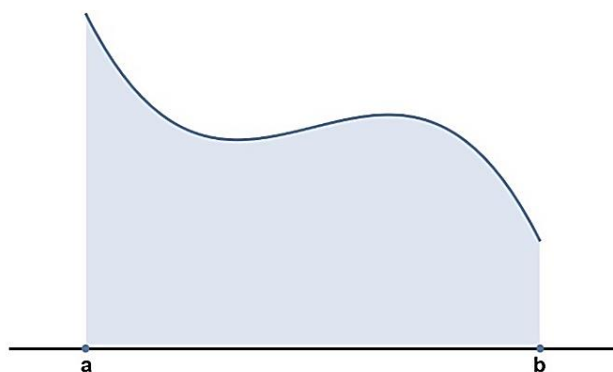


Figura 1. Representación gráfica de f en el intervalo $[a, b]$

A esta región se le llamará *conjunto ordenado de f entre a y b* . [3, p. 385]

Este área se puede aproximar mediante la división de la misma en rectángulos con sus bases alineadas y cubriendo el intervalo $[a, b]$ (un rectángulo empieza donde acaba el anterior).

De esta forma nos quedarán rectángulos con una misma base de la forma

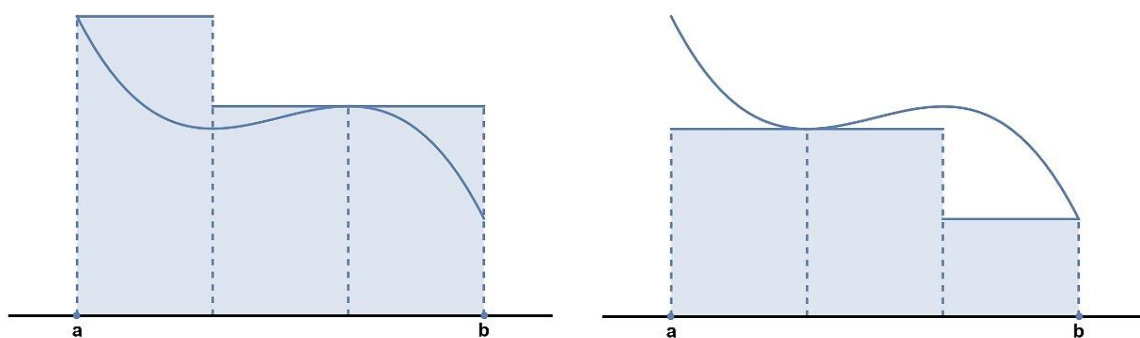


Figura 2. Suma superior y suma inferior de Darboux

Posteriormente lo que se hará es disminuir cada vez más las longitudes de las bases, hasta que finalmente éstas tiendan a cero, tendiendo así el número de rectángulos a infinito. [4, p. 283]

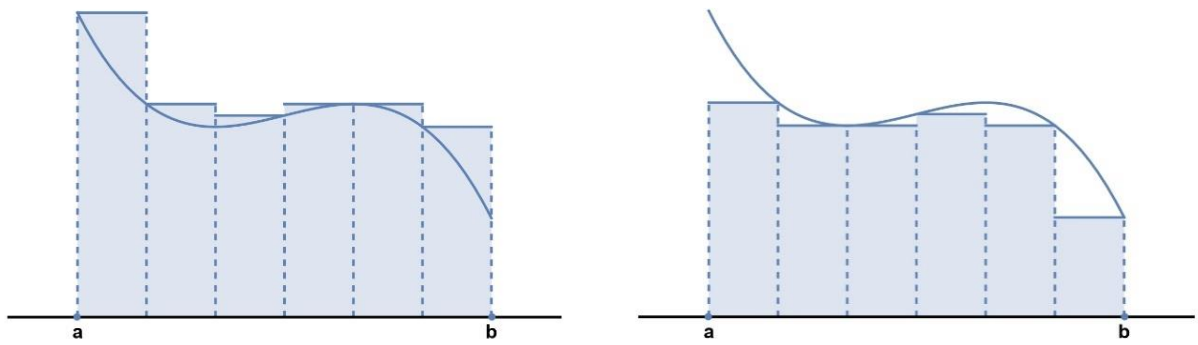


Figura 3. Suma superior y suma inferior de Darboux

3.2. Definiciones

3.2.1. Partición de un intervalo.

Dado un intervalo compacto $[a, b]$ (intervalo cerrado y acotado) de $\mathbb{R}$, se llama *partición* de $[a, b]$ a cualquier conjunto finito de puntos de $[a, b]$ que contiene a los extremos de dicho intervalo. [4, p. 283]

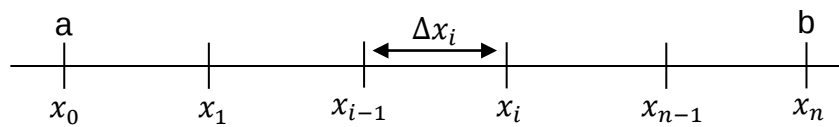


Figura 4. Partición de un intervalo

[1] Una partición, que consiste de $n + 1$ puntos, divide al intervalo $[a, b]$ en n subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, \dots, n$. La amplitud de dicho intervalo se representará por

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1} \quad (3.1)$$

3.2.2. Norma o diámetro de una partición.

A la amplitud máxima de los subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$ se le llama *norma o diámetro de la partición* P , y se denota por $|P|$. [1]

3.2.3. Suma superior y suma inferior.

[4] Sea $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una función acotada en el intervalo compacto $[a, b]$. Para cada partición $P = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ de $[a, b]$, se define m_i y M_i como el ínfimo $(f(x_i^{\min}))$ y el supremo $(f(x_i^{\max}))$ de f en el intervalo $[x_{i-1}, x_i]$, donde $i = 1, 2, \dots, n$.

Se llaman *sumas inferior y superior* (de Darboux) de la función f correspondientes a la partición P a

$$s(P) = \sum_{i=1}^n m_i \Delta x_i \quad (3.2)$$

y

$$S(P) = \sum_{i=1}^n M_i \Delta x_i \quad (3.3)$$

Siempre se ha de cumplir que $s(f, P) \leq S(f, P)$

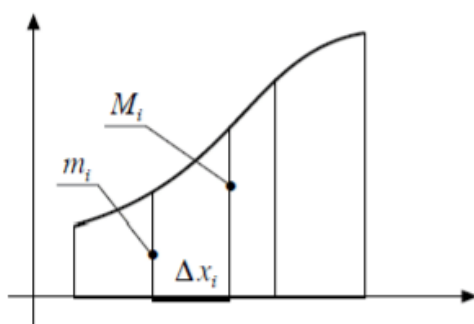


Figura 5. Suma superior e inferior de Darboux [4]

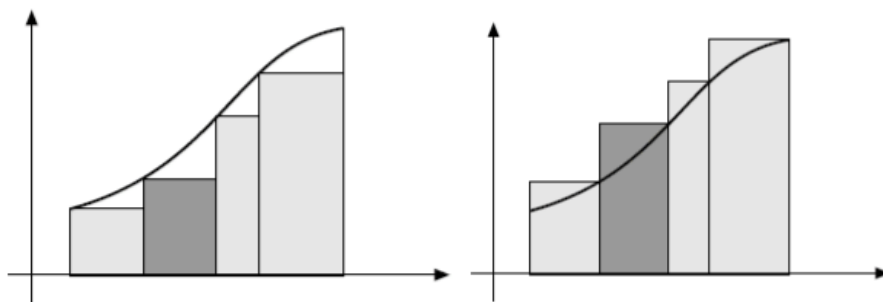


Figura 6. Suma inferior y superior de Darboux, respectivamente [4]

3.2.4. La integral como límite de sumas de Darboux.

Sea $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una función continua y acotada en el intervalo compacto $[a, b]$. La función f es integrable en dicho intervalo solo si existe alguna sucesión $P_1, P_2, \dots, P_n$ de particiones de $[a, b]$ cuyos diámetros tiendan a cero (para $n \rightarrow \infty$), de manera que $\lim |P_n| = 0$. [4]

Así se verifica que:

1º. La función f es integrable en $[a, b]$ si, y sólo si, se cumple la condición:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [S(P_n) - s(P_n)] = 0$$

2º. Si f es integrable en $[a, b]$, entonces su integral vale:

$$\int_a^b f = \lim_{n \rightarrow \infty} s(P_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} S(P_n)$$

donde P_n es una sucesión de particiones de $[a, b]$ cuya norma $|P_n|$ tiende a cero. [4, p. 357]

Las sumas de Darboux son un caso particular de lo que se denominan las sumas de Riemann. El punto clave aquí es que a medida que se toman particiones con norma cada vez más pequeña, las sumas de Riemann convergen todas a un mismo número.

El símbolo $\int$ es una deformación del símbolo Σ . La expresión $f(x)dx$ denota el área de un rectángulo cuya base es un incremento infinitesimal dx de la variable x ; y cuya altura es $f(x)$. El extremo inferior (a) y el extremo superior (b) en el signo $\int_a^b$ denotan el sentido en que se recorre el intervalo $[a, b]$. [1]

[1] Al cambiar la orientación de una partición P , la suma de Riemann cambia de signo al invertirse los extremos inicial y final de cada subintervalo. Para señalar la orientación que se ha dado a las particiones que se han utilizado para calcular la integral, se escribe siempre en la parte inferior del signo $\int f(x)dx$ el extremo inicial del intervalo de integración y en la parte superior el extremo final, definidos éstos de acuerdo a la orientación dada a las particiones. Teniendo en cuenta esto, aparece la relación

$$\int_b^a f(x)dx = - \int_a^b f(x)dx$$

Ejemplo 1

Sea la función $f(x) = 3x$ acotada y definida en el intervalo $[0, 2]$ (para $x \in \mathbb{R}$). Obtener la integral de dicha función planteando límites de sumas de Darboux.

$$f: [0, 2] \rightarrow \mathbb{R}$$

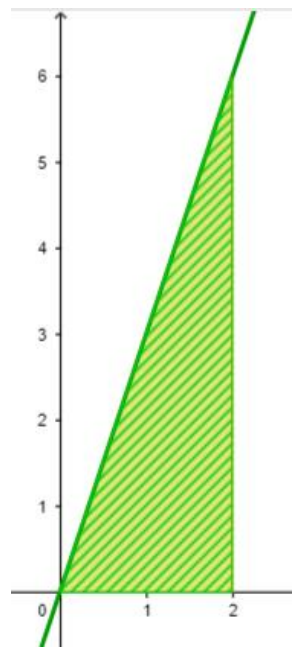


Figura 7. Área $f(x)$ en el intervalo $[0, 2]$

Primera partición ($P_1 = \{x_0, x_1\}$) con amplitud de la misma de $\Delta x = \frac{2}{1}$:



Los puntos de la partición son:

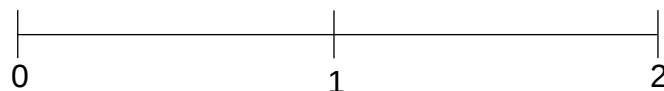
$$x_0 = 0 \cdot \frac{2}{1} ; x_1 = 1 \cdot \frac{2}{1}$$

Como f es creciente, en el punto x_0 se alcanza el mínimo.

La suma inferior tendrá por tanto un solo sumando:

$$s(P_1) = f(x_0) \cdot \Delta x = \left(3 \cdot 0 \cdot \frac{2}{1}\right) \cdot \frac{2}{1}$$

Segunda partición ($P_2 = \{x_0, x_1, x_2\}$) con amplitud de la misma de $\Delta x = \frac{2}{2}$:



Los puntos de la partición son:

$$x_0 = 0 \cdot \frac{2}{2} ; x_1 = 1 \cdot \frac{2}{2} ; x_2 = 2 \cdot \frac{2}{2}$$

Como f es creciente, en el punto x_0 y en el x_1 se alcanza el mínimo.

La suma inferior tendrá por tanto dos sumandos:

$$s(P_2) = f(x_0) \cdot \Delta x + f(x_1) \cdot \Delta x = \left(3 \cdot 0 \cdot \frac{2}{2}\right) \cdot \frac{2}{2} + \left(3 \cdot 1 \cdot \frac{2}{2}\right) \cdot \frac{2}{2} = 3 \cdot \left(\frac{2}{2}\right)^2 \cdot (0 + 1)$$

Tercera partición ($P_3 = \{x_0, x_1, x_2, x_3\}$) con amplitud de la misma de $\Delta x = \frac{2}{3}$:



Los puntos de la partición son:

$$x_0 = 0 \cdot \frac{2}{3} ; x_1 = 1 \cdot \frac{2}{3} ; x_2 = 2 \cdot \frac{2}{3} ; x_3 = 3 \cdot \frac{2}{3}$$

Como f es creciente, en el punto x_0, x_1 y x_2 se alcanza el mínimo.

La suma inferior tendrá por tanto tres sumandos:

$$s(P_3) = \left(3 \cdot 0 \cdot \frac{2}{3}\right) \cdot \frac{2}{3} + \left(3 \cdot 1 \cdot \frac{2}{3}\right) \cdot \frac{2}{3} + \left(3 \cdot 2 \cdot \frac{2}{3}\right) \cdot \frac{2}{3} = 3 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^2 \cdot (0 + 1 + 2)$$

A continuación, se hará una *generalización* de la suma inferior a una partición P_n cuya amplitud será $\Delta x = \frac{2}{n}$

$$s(P_n) = 3 \cdot \left(\frac{2}{n}\right)^2 \cdot \sum_{k=0}^{n-1} k = 3 \cdot \frac{4}{n^2} \cdot \frac{n(n-1)}{2}$$

Mirando la Figura 7, aparece la figura geométrica de un triángulo cuya base es igual a 2 y su altura es igual a $f(2) = 3 \cdot 2 = 6$. Sabiendo esto, la suma inferior $s(P_n)$ debe ser igual a 6, por lo que:

$$s(P_n) = 3 \cdot \frac{4}{n^2} \cdot \frac{n(n-1)}{2} = 6$$

De manera análoga conseguimos la suma superior de la partición P_n cuya amplitud será $\Delta x = \frac{2}{n}$ y cuyo resultado debe ser el área de ese triángulo (6):

$$S(P_n) = 3 \cdot \left(\frac{2}{n}\right)^2 \cdot \sum_{k=1}^n k = 3 \cdot \frac{4}{n^2} \cdot \frac{n \cdot n}{2} = 6$$

Utilizando la suma superior y la suma inferior se llega a la conclusión de que:

$$\int_0^2 3x dx = 6$$

Ejemplo 2

Sea la función $f(x) = x^2$ acotada en el intervalo $[0, 2]$ (para $x \in \mathbb{R}$). Obtener la integral de dicha función planteando límites de sumas de Darboux.

$$f: [0, 2] \rightarrow \mathbb{R}$$

Con esta función aparece la siguiente expresión para la suma inferior de la misma:

$$s(P_n) = \frac{2}{n} \cdot \sum_{k=0}^{n-1} \left(k \cdot \frac{2}{n}\right)^2 = \frac{4}{n^2} \cdot \sum_{k=0}^{n-1} k^2$$

Esta expresión es más compleja, por lo que se necesita buscar un mecanismo más sencillo para calcular la integral de $f(x)$.

3.2.5. Propiedades de las integrales

Es necesario describir dos propiedades importantes que presentan las integrales para su posterior uso.

[4] Aditividad respecto del intervalo. Sea $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una función acotada en el intervalo compacto $[a, b]$ y sea $c \in \mathbb{R}$ un punto de $]a, b[$, es decir, $a < c < b$. Entonces se verifica que la función f es integrable en $[a, b]$ si lo es en $[a, c]$ y en $[c, b]$. Cuando estas integrales existen, se verifica que:

$$\int_a^b f = \int_a^c f + \int_c^b f$$

[4] Teorema de la media. Sea $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una función integrable en el intervalo compacto $[a, b]$.

- I. Si además $m \leq f(x) \leq M$ para $x \in [a, b]$ y para unos ciertos $m, M \in \mathbb{R}$, entonces existe $\mu \in \mathbb{R}$ tal que $\int_a^b f(x)dx = \mu(b - a)$, siendo $m \leq \mu \leq M$. (μ es el valor medio integral de f en $[a, b]$).
- II. Si además f es continua en $[a, b]$, entonces existe algún punto ξ de $[a, b]$ tal que $\int_a^b f(x)dx = f(\xi)(b - a)$, siendo $a \leq \xi \leq b$.

3.3. Cómo calcular integrales. El teorema fundamental del cálculo

Aparentemente, el cálculo de una integral definida como es $f(x) = x^2$ en el intervalo $[0, 2]$ es un proceso difícil de implementar, pues se requiere tomar en cuenta el comportamiento de la función a lo largo de todo el intervalo de integración. Sin embargo, cuando se conoce una primitiva o antiderivada de la función, el cálculo de

la integral en el intervalo se reduce a una evaluación de esa primitiva en sus extremos.

3.3.1. Integral indefinida

Sea una función $g(x)$ definida y continua en un intervalo abierto (o cerrado) I . Nos preguntamos sobre las funciones $f(x)$ definidas en I cuya función derivada es $g(x)$. Es decir, aparece una ecuación diferencial que se expresa como:

$$\frac{df}{dx}(x) = g(x), \quad x \in I, \quad (3.4)$$

donde la incógnita es $f(x)$. En caso de existir, cada función $g(x)$ que satisface la ecuación anterior se llama *antiderivada* o *primitiva de $g(x)$* en el intervalo I . [1]

[1] Si $g(x)$ es una función definida en un intervalo abierto o cerrado I , a la familia de antiderivadas o primitivas en I se le denomina *integral indefinida de $g(x)$ en I* , y se denota por $\int g(x) dx$. En otros términos, la integral indefinida $\int g(x) dx$ de una función $g(x)$ es la familia de funciones

$$\int g(x) dx = \left\{ f: I \rightarrow \mathbb{R} \text{ tales que } \frac{df}{dx}(x) = g(x) \right\}$$

Después de lo descrito anteriormente, se puede decir que si una función, $f(x)$, es primitiva de otra, $g(x)$, también lo son las que se obtienen de la primera sumando una constante cualquiera, $f(x) + K$. Dicho esto, si dos funciones, $f_1(x)$ y $f_2(x)$ son primitivas de una dada, $g(x)$, la diferencia entre las dos primeras ha de ser una constante. Esto justifica que no se debe hablar de la primitiva de una función, sino de una de las primitivas de una función. El término de integral indefinida por tanto se referirá al conjunto de las primitivas de una función dada, $g(x)$. [4]

3.3.2. Teorema fundamental del cálculo

Con todo lo descrito anteriormente, se puede establecer la relación entre derivada e integral como procesos inversos.

[4] Sea $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una función integrable en el intervalo compacto $[a, b]$, se dice que la función $F: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, definida así $x \mapsto F(x) = \int_a^x f$, es la función *integral indefinida* o función integral de f correspondiente al punto a . Se verifica así que:

1. Si f es integrable en $[a, b]$, entonces F es continua en $[a, b]$.
2. Según el teorema fundamental del cálculo, si f es continua en $[a, b]$, entonces F es derivable en $[a, b]$ y su derivada es $F'(x) = f(x)$ para $x \in [a, b]$; esto es, la integral definida F de f es una primitiva (o antiderivada) de f en $[a, b]$.

Demostración [4]

Como f es integrable en $[a, b]$ para cualquiera que sea $x \in [a, b]$, se garantiza la existencia de la función $F: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, $x \mapsto F(x) = \int_a^x f$, a la que hemos llamado integral indefinida de f (correspondiente al punto a). Una vez que se comprueba que F existe, es necesario también estudiarla.

1. Únicamente con la hipótesis de que f es integrable en $[a, b]$, veamos que entonces F es continua en todo punto $c \in [a, b]$, esto es, que $F(c + \Delta x) - F(c)$ tiene límite 0 cuando Δx tiende a 0. Teniendo en cuenta la aditividad respecto del intervalo y el teorema de la media, se tiene:

$$F(c + \Delta x) - F(c) = \int_a^{c+\Delta x} f - \int_a^c f = \int_c^{c+\Delta x} f = \mu \Delta x$$

para cierto $\mu \in [m, M]$, donde m y M son el ínfimo y el supremo de f en $[a, b]$. Cuando $\Delta x \rightarrow 0$, como μ permanece acotada, resulta que el producto $\mu \Delta x$ tiene límite 0, como había que comprobar.

2. Si f es continua en $[a, b]$, sigue siendo válida la igualdad anterior (pues f es integrable), pero además ahora se sabe que es $\mu = f(\xi)$ para algún punto ξ del intervalo de extremos c y $c + \Delta x$, con lo que se puede poner:

$$\frac{F(c + \Delta x) - F(c)}{\Delta x} = f(\xi)$$

estando ξ entre c y $c + \Delta x$.

Al tomar límites para $\Delta x \rightarrow 0$, como entonces $\xi \rightarrow c$ y f es continua en el punto c , resulta que

$$F'(c) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{F(c + \Delta x) - F(c)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} f(\xi) = \lim_{\xi \rightarrow c} f(\xi) = f(c)$$

Como este resultado es válido para todo $c \in [a, b]$, se concluye que existe F' y que es $F' = f$ en $[a, b]$. $\square$

3.3.3. Regla de Barrow

Es una consecuencia inmediata del teorema fundamental y proporciona un método más práctico y sencillo para hallar integrales. En esta regla se supone una primitiva conocida del integrando. [4]

[4] Si $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ es una función continua en el intervalo compacto $[a, b]$ y si $G: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ es una función primitiva (cualquiera) de f en $[a, b]$, entonces se verifica que:

$$\int_a^b f(x)dx = G(b) - G(a) \quad (3.5)$$

Demostración [4]

Según el Teorema Fundamental del Cálculo, la integral indefinida $x \mapsto F(x) = \int_a^x f$ es una primitiva de f en $[a, b]$. Como G también es una primitiva de f en $[a, b]$, se puede asegurar que $G(x) - F(x)$ es constante; siendo C esta constante, de manera que $G(x) = F(x) + C$ para todo $x \in [a, b]$. Resulta evidente entonces que:

$$G(b) - G(a) = [F(b) + C] - [F(a) + C] = \int_a^b f - \int_a^a f = \int_a^b f \quad \square$$

4. INTEGRALES IMPROPIAS

Hasta ahora, todo lo que se ha tratado sobre las integrales ha sido aplicado a una función acotada en el intervalo compacto $[a, b]$. Si el intervalo sobre el que se integra no es compacto o si la función no está acotada, entonces no se podría definir la integral. Es por esto que hay que ampliar el concepto de integral, apareciendo así las integrales impropias o generalizadas. Este nuevo concepto se encarga de integrales en intervalos no acotados (*de primera especie*) o de integrales de funciones no acotadas (*de segunda especie*). En cualquier caso, se procede de un mismo modo: se integra en un subintervalo compacto en el que la función está acotada y luego se haya el límite de dicha integral cuando el subintervalo tiende al intervalo de integración dado. Cuando tal límite existe y es finito, se dice que la integral impropia es convergente. [4]

4.1. Integrales en intervalos no acotados: Integrales impropias de primera especie

Sea una función f integrable en $[a, t]$ para todo $t > a$, siendo a un número fijo. Entonces se define la integral impropia

$$\int_a^{+\infty} f(x)dx = \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_a^t f(x)dx \quad (4.1)$$

en caso de que dicho límite exista. Se dice que la integral impropia es *convergente* si este límite es finito y *divergente* si el límite es infinito. [5]

Análogamente, sea una función f integrable en $[t, b]$ para todo $t < b$, siendo b un número fijo. Entonces se define la integral impropia

$$\int_{-\infty}^b f(x)dx = \lim_{t \rightarrow -\infty} \int_t^b f(x)dx \quad (4.2)$$

en caso de que dicho límite exista. Se dice que la integral impropia es *convergente* si este límite es finito y *divergente* si el límite es infinito. [5]

Si las dos integrales impropias

$$\int_{-\infty}^a f(x)dx \text{ y } \int_a^{+\infty} f(x)dx \quad (4.3)$$

convergen para un mismo valor de a , entonces se define la integral impropia

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = \int_{-\infty}^a f(x)dx + \int_a^{+\infty} f(x)dx \quad (4.4)$$

Por el contrario, si no existe ningún valor de a para el cual las dos integrales (4.3) sean convergentes, se dice que la integral impropia

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx \quad (4.5)$$

es divergente. [5]

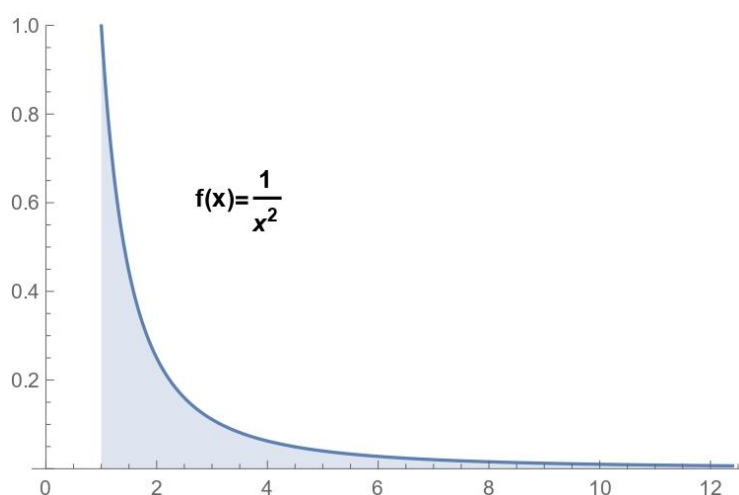


Figura 8. Ejemplo de integral impropia de primera especie

4.1.1. Criterios de convergencia para integrales impropias de primera especie

Consisten en una serie de criterios que permiten conocer si una integral impropia es convergente o divergente, sin la necesidad de deducir la primitiva de la función que se integra. [5]

Los criterios de convergencia vienen descritos para una integral del tipo

$$\int_a^{+\infty} f(x)dx$$

A su vez, también se pueden enunciar dichos criterios para las integrales de tipo

$$\int_{-\infty}^b f(x)dx$$

- **Criterio de comparación.** Supongamos que existe $x_0 > a$ tal que $0 \leq f(x) \leq g(x)$ para $x \geq x_0$. Entonces se cumple que:
 - Si $\int_a^{+\infty} g(x)dx$ es convergente, entonces $\int_a^{+\infty} f(x)dx$ también lo es.
 - Si $\int_a^{+\infty} f(x)dx$ es divergente, entonces $\int_a^{+\infty} g(x)dx$ también lo es.
- **Criterio de comparación en el límite.** Supongamos que existe $x_0 > a$ tal que $f(x) \geq 0$ para $x \geq x_0$ y que $g(x) > 0$ en $[a, +\infty)$. Si existe

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{f(x)}{g(x)} = L$$

Entonces se cumple que

- Si $L \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, las integrales $\int_a^{+\infty} f(x)dx$ y $\int_a^{+\infty} g(x)dx$ tienen el mismo carácter.
- Si $L = 0$ y $\int_a^{+\infty} g(x)dx$ converge, entonces $\int_a^{+\infty} f(x)dx$ también converge.
- Si $L = +\infty$ y $\int_a^{+\infty} g(x)dx$ diverge, entonces $\int_a^{+\infty} f(x)dx$ también diverge.

4.2. Integrales de funciones no acotadas: Integrales impropias de segunda especie

Este tipo de integrales aparecen cuando la función que se integra no está acotada en algún punto del intervalo de integración. Para que una función fuera integrable en un intervalo según Riemann, dicha función debía estar acotada en dicho intervalo. Por lo tanto, para este caso no se puede aplicar la definición la integral de Riemann de la función en el intervalo. No obstante, en determinados casos sí que se puede establecer una definición apropiada. [5]

- 1) Sea $[a, b]$ un intervalo con $a, b \in \mathbb{R}$. Si f es no acotada en a , es decir que $\lim_{x \rightarrow a^+} f(x) = \pm\infty$, pero existe la integral $\int_t^b f(x)dx$ para todo t con $a < t \leq b$, entonces se define

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{t \rightarrow a^+} \int_t^b f(x)dx \quad (4.6)$$

en caso de que dicho límite exista. Se dice entonces que la integral impropia es convergente si este límite es finito y divergente si es infinito. [5]

- 2) Sea $[a, b]$ un intervalo con $a, b \in \mathbb{R}$. Si f es no acotada en b , es decir que $\lim_{x \rightarrow b^-} f(x) = \pm\infty$, pero existe la integral $\int_a^t f(x)dx$ para todo t con $a < t < b$, entonces se define

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{t \rightarrow b^-} \int_a^t f(x)dx \quad (4.7)$$

en caso de que dicho límite exista. Se dice entonces que la integral impropia es convergente si este límite es finito y divergente si es infinito. [5]

- 3) Sea $[a, b]$ un intervalo con $a, b \in \mathbb{R}$. Si f es no acotada en un punto c con $a < c < b$, es decir es decir que $\lim_{x \rightarrow c^-} f(x) = \pm\infty$ ó $\lim_{x \rightarrow c^+} f(x) = \pm\infty$,

$$\int_a^c f(x)dx \quad y \quad \int_c^b f(x)dx \quad (4.8)$$

Si las dos integrales son convergentes, entonces se define

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx \quad (4.9)$$

Por el contrario, si alguna de las dos integrales es divergente, entonces se dice que la integral impropia $\int_a^b f(x)dx$ es divergente. [5]

En este tercer tipo de integral impropia de segunda especie, se puede definir entonces

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{t_1 \rightarrow c^-} \int_a^{t_1} f(x)dx + \lim_{t_2 \rightarrow c^+} \int_{t_2}^b f(x)dx \quad (4.10)$$

donde se utilizan las variables t_1 y t_2 para indicar que cada uno de los límites se calcula de forma independiente.

También se puede escribir dicha expresión de otra manera

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\varepsilon_1 \rightarrow 0^+} \int_a^{c-\varepsilon_1} f(x)dx + \lim_{\varepsilon_2 \rightarrow 0^+} \int_{c+\varepsilon_2}^b f(x)dx \quad (4.11)$$

Si ambos límites existen y son finitos, la integral impropia es convergente, mientras que si alguno de los dos límites no es finito la integral no es convergente. [5]

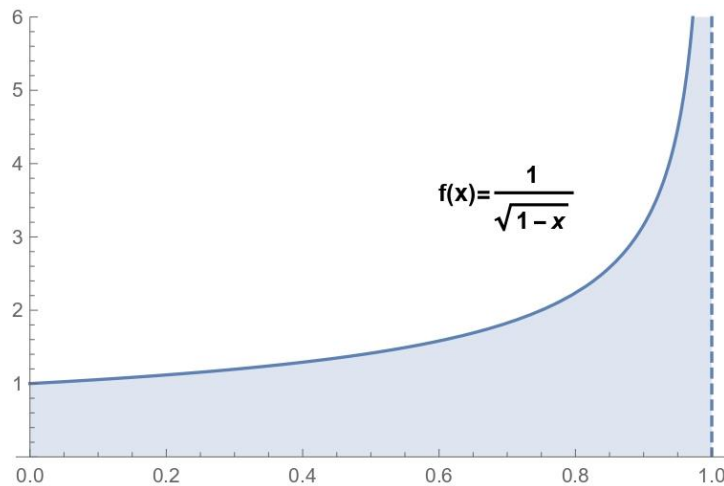


Figura 9. Ejemplo de integral impropia de segunda especie.

4.2.1. Criterios de convergencia para integrales impropias de segunda especie

Consisten en una serie de criterios que permiten conocer si una integral impropia es convergente o divergente, sin la necesidad de deducir la primitiva de la función que se integra. [5]

Los criterios de convergencia vienen descritos para una integral del tipo

$$\int_a^b f(x)dx$$

donde la función que se integra no está acotada en el extremo b . [5]

A su vez, también se pueden enunciar dichos criterios para las integrales de tipo

$$\int_a^b f(x)dx$$

donde la función no está acotada en el extremo a . [5]

- **Criterio de mayoración.** Supongamos que existe $x_0 \in [a, b)$ tal que $0 \leq f(x) \leq g(x)$ para $x_0 \leq x \leq b$. Entonces se cumple que
 - Si $\int_a^b g(x)dx$ es convergente, entonces $\int_a^b f(x)dx$ también lo es.
 - Si $\int_a^b f(x)dx$ es divergente, entonces $\int_a^b g(x)dx$ también lo es.
- **Criterio de comparación en el límite.** Supongamos que existe $x_0 \in [a, b)$ tal que $f(x) \geq 0$ y $g(x) \geq 0$ para $x_0 \leq x < b$ y que

$$\lim_{x \rightarrow b^-} \frac{f(x)}{g(x)} = L$$

Entonces se cumple que

- Si $L \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, las integrales $\int_a^b f(x)dx$ y $\int_a^b g(x)dx$ tienen el mismo carácter.
- Si $A = 0$ y $\int_a^b g(x)dx$ es convergente, entonces $\int_a^b f(x)dx$ también lo es.
- Si $A = +\infty$ y $\int_a^b g(x)dx$ es divergente, entonces $\int_a^b f(x)dx$ también lo es.

En algunas ocasiones pueden aparecer integrales que combinen las dos situaciones analizadas anteriormente (integrales de primera y de segunda especie). En estos casos estaremos ante las integrales de tercera especie, a las cuales se le aplica un tratamiento similar. [5]

4.3. Propiedades de las integrales impropias

Sea $[a, b[$ un intervalo no compacto, donde $-\infty < a < b \leq +\infty$. [4]

- **Linealidad.** Si f y g son dos funciones integrables en $[a, b[$ y si sus integrales (impropias en b) son convergentes, entonces también existe y es convergente la integral en $[a, b[$ de $hf + kg$, para cualesquiera $h, k \in \mathbb{R}$, y, además:

$$\lim_{t \rightarrow b} \int_a^t [hf(x) + kg(x)]dx = h \cdot \lim_{t \rightarrow b} \int_a^t f(x)dx + k \cdot \lim_{t \rightarrow b} \int_a^t g(x)dx \quad (4.12)$$

- **Regla de Barrow.** Si $f: [a, b[\rightarrow \mathbb{R}$ es una función continua en $[a, b[$, si $G: [a, b[\rightarrow \mathbb{R}$ es una función primitiva de f en $[a, b[$ y si existe el límite, entonces:

$$\lim_{t \rightarrow b^-} \int_a^t f(x)dx = \lim_{t \rightarrow b^-} [G(t) - G(a)] = \lim_{t \rightarrow b^-} [G(x)]_a^t \quad (4.13)$$

5. RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE APLICACIÓN

5.1. Fuerza electrostática

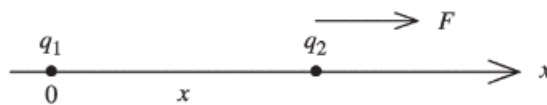
Problema 1

Sea q_1 y q_2 dos cargas eléctricas separadas una distancia x en el vacío. La interacción electromagnética se expresa mediante la ley de Coulomb:

“Dos partículas cargadas interaccionan con una fuerza que es directamente proporcional al producto de sus cargas e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia que las separa.”

Dicha fuerza está dirigida según la recta que une a las cargas y será atractiva, si las cargas son de distinto signo, o repulsiva, si las cargas son de signo opuesto.

De acuerdo con esta ley y con el problema que se plantea, la fuerza de interacción entre dos cargas q_1 y q_2 semejantes (misma carga) separadas en el vacío a una distancia x vendrá dada por:



$$F(x) = k \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{x^2} \quad (5.1)$$

donde k es una constante universal dependiente del medio denominada constante de Coulomb. Con esta constante aparece una influencia del medio en la fuerza electrostática. Para tener en cuenta esta influencia, se describe k como:

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon} \quad (5.2)$$

donde ϵ es la permitividad eléctrica o constante dieléctrica del medio. Esta constante dieléctrica en el vacío se representa con el subíndice cero y se trata de la permitividad del vacío, $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \frac{C^2}{N \cdot m^2}$. Cuanto mayor sea la permitividad eléctrica, menos intensa es la fuerza entre dos cargas en un medio.

Dicho todo esto, la fuerza que actúa sobre q_2 debido a la presencia de q_1 lo hace en la dirección positiva de x , alejándose de q_1 , por lo que estaríamos ante una fuerza negativa. Puesto que las cargas se repelen, para llevar q_2 a una distancia x de q_1

hay que efectuar trabajo sobre el sistema. Hay que aplicar una fuerza $-F$ para vencer la repulsión y el trabajo efectuado será:

$$W = - \int_{\infty}^x F(x) dx \quad (5.3)$$

Sustituyendo la expresión (5.1):

$$W = - \int_{\infty}^x \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{dx}{x^2}$$

En esta integral impropia nos encontramos con varias constantes que pueden salir fuera de ella, quedándonos de la forma:

$$W = - \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\infty}^x \frac{dx}{x^2}$$

Resolviendo esta integral por medio del método de integrales impropias nos quedaría como:

$$W = - \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \int_t^x \frac{dx}{x^2} = - \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \int_t^x x^{-2} dx$$

Para resolver la integral aplicamos la regla de la potencia:

$$\int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} \text{ para } n = -2$$

$$W = - \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{x} \right]_t^x = - \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{x} - \left(-\frac{1}{t} \right) \right)$$

$$W = - \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{t} - \frac{1}{x} \right)$$

Evaluando ese límite tendríamos que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{t} - \frac{1}{x} \right) = \frac{1}{\infty} - \frac{1}{x} = -\frac{1}{x}$$

$$W = - \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \left(-\frac{1}{x} \right)$$

Con esto llegamos a la conclusión de que el trabajo que hay que efectuar para traer una carga q_2 desde una separación infinita hasta una distancia x de q_1 es positivo para cargas semejantes (de igual carga) y negativo para cargas opuestas, y vendrá cuantificado por la expresión:

$$W = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0 x} \quad (5.4)$$

5.2. Energía potencial electrostática

Problema 2

Según el ejemplo anterior, y como bien se explica en el enunciado, el trabajo que debe efectuarse contra la fuerza interna para traer dos cargas desde una separación infinita a una separación x es $W = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0 x}$.

Este trabajo será idéntico al trabajo necesario para separar dos cargas semejantes q_2 y q_1 desde una distancia x hasta una separación infinita.

$$W = \int_x^\infty F(x)dx = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0 x}$$

En una región del espacio (medio) donde tenemos varias cargas (en este caso q_2 y q_1), aparece una perturbación en dicho medio, denominada campo eléctrico. Para que este campo se ponga de manifiesto, es necesario siempre que haya varios cuerpos cargados en el medio.

Como bien se ha explicado anteriormente, cuando un cuerpo (q_2) se mueve de un punto a otro en el seno de un campo electrostático creado por otro cuerpo (q_1), se realiza un trabajo, ya que ese desplazamiento tiene lugar bajo la acción de una fuerza (fuerza electrostática).

El campo electrostático es un campo conservativo porque el trabajo realizado por las fuerzas del campo depende solo del punto inicial y final del desplazamiento, y no de la trayectoria seguida. Como consecuencia de esto, en el sistema aparece una energía.

La energía de un sistema se expresa generalmente como la suma de la energía cinética y la energía potencial de dicho sistema. La energía cinética proviene del movimiento del sistema en el espacio, mientras que la potencial proviene de la posición del sistema en el espacio y de las fuerzas que actúan sobre él en esa posición [2]

En este caso nos centraremos solamente en la energía potencial, ya que hablamos de la posición de las partículas cargadas. La energía potencial V de un cuerpo en un punto, coincide con el trabajo que tienen que realizar las fuerzas del campo para llevarlo desde ese punto hasta fuera del campo (distancia infinita) con una velocidad constante.

Sabemos que $F(x) = -\frac{dV}{dx}$, por lo que separando variables e integrando:

$$\int_{\infty}^x dV = - \int_{\infty}^x F(x) dx$$

$$V(x) - V(\infty) = - \int_{\infty}^x F(x) dx$$

Y con lo descrito en el problema anterior llegamos a que:

$$W = V(x) - V(\infty) = - \int_{\infty}^x F(x) dx$$

La energía potencial de las partículas para una separación infinita es cero ya que no hay interacción entre ellas por la gran distancia que las separa.

Con lo cual, mediante el mismo método anterior y los mismos cálculos se obtiene que la energía potencial electrostática entre dos cargas separadas una distancia x es:

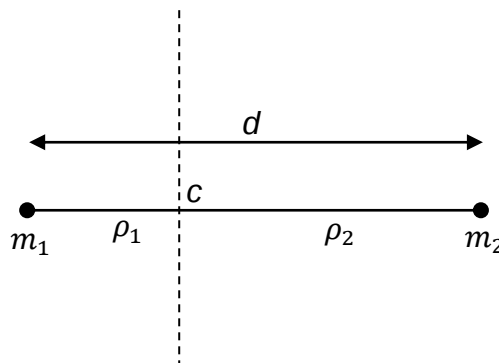
$$V(x) = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0 x} \quad (5.5)$$

5.3. Rotor lineal

Problema 3

Un rotor rígido se trata de un modelo mediante el cual se consigue explicar el movimiento de sistemas que están en constante rotación. Este rotor no es más que un objeto tridimensional. Un tipo específico de rotor es el denominado como rotor lineal, ya que, en lugar de ser un objeto tridimensional, es bidimensional. Un ejemplo cotidiano de este tipo de rotores lineales son las moléculas diatómicas. [6]

El rotor lineal consiste en dos masas (dos átomos en el caso de moléculas diatómicas) situadas a una distancia invariable de su centro de masas (c). Las magnitudes que caracterizan al rotor por tanto serán el valor de las masas (m_1 y m_2) y la distancia que hay entre ellas (d) [6]. El rotor rígido tendría la siguiente forma:



Este modelo se suele utilizar en mecánica cuántica para predecir la energía rotacional de una molécula diatómica. [6]

En el caso de moléculas diatómicas, el nivel más bajo de energía es $E = 0$, de forma que no hay energía rotacional en el punto cero. A partir de este nivel, la energía se va incrementando en $J^2 + J$, es decir, el espaciado entre los niveles rotacionales adyacentes aumenta con el valor de J . [6]

Cada nivel de energía de un rotor rígido lineal, es cuantificado por el número cuántico rotacional J (toma valores de 0, 1, 2, ...). Cada uno de estos niveles de energía vienen dados por la expresión:

$$E_J = J(J + 1) \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 I} \quad (5.6)$$

siendo h la constante de Plank e I el momento de inercia, que es proporcional a la masa reducida μ de la molécula y al cuadrado de la distancia interatómica.

$$I = \mu \cdot d^2 \quad (5.7)$$

Esta ecuación se puede representar de la siguiente forma:

$$E_J = J(J + 1) \cdot h \cdot B \quad (5.8)$$

siendo B una constante denominada constante de rotación. Conforme vamos aumentando el número cuántico rotacional J vemos que la energía que hay entre un nivel y su nivel consecutivo también aumenta.

Cada nivel rotacional además tiene una degeneración que viene determinada por $\omega_J = 2J + 1$. Esto se debe a que un rotor tiene unas funciones de onda en mecánica cuántica que son los llamados armónicos esféricos, representados por Y_{lm} , siendo l el número cuántico rotacional (J) y por tanto para cada valor de J tenemos $2J + 1$ valores de m . Como la energía depende de J pero el número de estados cuánticos va a depender de m , en cada nivel energético tenemos una serie de estados cuánticos degenerados que vienen dados por los valores que puede tomar m .

Finalmente se obtiene así la función de partición rotacional de un rotor lineal:

$$q_r = \sum_{J=0}^{\infty} \omega_J \cdot e^{-E_J/kT} = \sum_{J=0}^{\infty} \omega_J \cdot e^{-J(J+1) \cdot h \cdot B/kT} \quad (5.9)$$

siendo k la constante de Boltzmann. Llamamos temperatura rotacional característica de cada molécula (constante) a $\theta_r = \frac{h \cdot B}{k}$. Esta constante nos da una idea de la temperatura necesaria para que se consigan estados rotacionales distintos del fundamental.

Ese sumatorio se puede expresar como una integral que converge en un determinado valor.

Cuando la temperatura ambiente es mucho mayor que la temperatura rotacional ($T \gg \theta_r$), estamos ante un caso que se denomina aproximación de alta temperatura. Lo que sucede en este caso es que los niveles energéticos están muy cercanos en energía (prácticamente forman un continuo), por lo que tendremos muchos estados accesibles, permitiéndonos expresar la función de partición rotacional de la forma:

$$q_r = \int_0^{\infty} (2J + 1) e^{-J(J+1)\theta_r/T} dJ \quad (5.10)$$

Nos encontramos así con la integral impropia que se expone en el problema.

La función de partición rotacional nos va a permitir determinar propiedades termodinámicas asociadas a la rotación de una molécula diatómica o poliatómica. Las especies monoatómicas (átomo) no presentan energía rotacional y la función de partición rotacional tomaría como valor la unidad.

Para evaluar esta integral procedemos con el mismo método de integrales impropias. Lo primero que hacemos es simplificar la expresión con otras variables:

$$u = -\frac{\theta_r \cdot J \cdot (J + 1)}{T} \Rightarrow du = \left(-\frac{\theta_r \cdot (J + 1)}{T} - \frac{\theta_r \cdot J}{T} \right) dJ$$

Sustituyendo nos quedaría:

$$q_r = -\frac{T}{\theta_r} \cdot \int_0^{\infty} e^u du$$

Esta integral es inmediata:

$$q_r = -\frac{T}{\theta_r} \cdot [e^u]_0^{\infty}$$

Deshaciendo el cambio de variable y aplicando integrales impropias tenemos que:

$$\begin{aligned} q_r &= -\frac{T}{\theta_r} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \left[e^{-\frac{\theta_r \cdot J \cdot (J+1)}{T}} \right]_0^t \\ q_r &= -\frac{T}{\theta_r} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\left(e^{-\frac{\theta_r \cdot t \cdot (t+1)}{T}} \right) - \left(e^{-\frac{\theta_r \cdot 0 \cdot (0+1)}{T}} \right) \right]_0^t \\ q_r &= -\frac{T}{\theta_r} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\left(e^{-\frac{\theta_r \cdot t \cdot (t+1)}{T}} \right) - 1 \right]_0^t \\ q_r &= -\frac{T}{\theta_r} \cdot (e^{-\infty} - 1) = \frac{T}{\theta_r} \end{aligned}$$

Vemos que la función de partición rotacional depende únicamente de la temperatura ambiente y de la temperatura rotacional característica de la molécula.

5.4. Distribución de Maxwell-Boltzmann

Problema 4

La teoría cinética de un gas ideal justifica las propiedades macroscópicas a partir de las propiedades cinéticas de las moléculas con métodos estadísticos. El modelo cinético de un gas ideal, supone que la única contribución a la energía del gas es la energía cinética de traslación de las moléculas, es decir, que se desprecian las energías de rotación y de vibración. En un gas, las velocidades de las moléculas individuales abarcan un amplio intervalo y las colisiones en el gas continuamente redistribuyen las velocidades de las moléculas. Por ello, la variación de las velocidades de las partículas de un gas se describe mediante la función de distribución de velocidad, que describe la probabilidad de que una partícula de gas tenga una velocidad en un rango determinado.

En el espacio de las coordenadas de velocidad (x, y, z) , representa la probabilidad de que el extremo del vector velocidad molecular resida en un casquete esférico de radio comprendido entre v y $v + dv$, y construido como un colectivo de cajas rectangulares minúsculas. La probabilidad de que dicho vértice caiga en el interior de una capa esférica de espesor dv será la suma de infinitos términos de la probabilidad anterior. Aparece así la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann de las velocidades:

$$f(v) = 4\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 \cdot e^{-mv^2/2kT} \quad (5.11)$$

donde k es la constante de Boltzmann.

Para calcular la velocidad media de las moléculas de un gas tenemos la ecuación:

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty v f(v) dv \quad (5.12)$$

Realizamos el mismo procedimiento de siempre. Primero sustituimos la ecuación (5.11):

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty v \cdot 4\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv$$

Podemos sacar de la integral las variables que permanezcan constantes:

$$\langle v \rangle = 4\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \int_0^\infty v \cdot v^2 \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv$$

Simplificamos la expresión cambiando por otras variables:

$$u = v^2 \Rightarrow du = 2v dv$$

Sustituimos:

$$\langle v \rangle = 4\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \int_0^\infty u \cdot e^{-\frac{mu}{2kT}} du$$

Volvemos a cambiar las variables para seguir simplificando la expresión:

$$w = -\frac{u}{2Tk} \Rightarrow dw = -\frac{1}{2Tk} du$$

Y volvemos a sustituir:

$$\langle v \rangle = 2\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} 4T^2 k^2 \cdot \int_0^\infty w \cdot e^{mw} dw$$

Esta integral se puede resolver mediante el método de integración por partes ($\int f \cdot dg = f \cdot g - \int g \cdot df$):

$$f = w ; df = dw$$

$$dg = e^{mw} dw ; g = \frac{e^{mw}}{m}$$

$$\int w \cdot e^{mw} dw = w \cdot \frac{e^{mw}}{m} - \int \frac{e^{mw}}{m} \cdot dw$$

Resolviendo cambiando $x = mw$ y $dx = mdw$ nos quedaría que:

$$\int \frac{e^{mw}}{m} \cdot dw = \frac{1}{m^2} \cdot \int e^x dx = \frac{e^x}{m^2}$$

Deshaciendo la sustitución de x :

$$\int \frac{e^{mw}}{m} \cdot dw = \frac{e^{mw}}{m^2}$$

Reemplazamos las integrales ya resueltas:

$$\int w \cdot e^{mw} dw = w \cdot \frac{e^{mw}}{m} - \frac{e^{mw}}{m^2}$$

Al final tendríamos:

$$\langle v \rangle = 2\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} 4T^2 k^2 \cdot \left[w \cdot \frac{e^{mw}}{m} - \frac{e^{mw}}{m^2} \right]_0^\infty$$

Deshaciendo la sustitución de w :

$$\langle v \rangle = 2\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} 4T^2 k^2 \cdot \left[\left(-\frac{u}{2Tk} \cdot \frac{e^{-\frac{mu}{2Tk}}}{m} \right) - \frac{e^{-\frac{um}{2Tk}}}{m^2} \right]_0^\infty$$

Deshacemos el cambio de u :

$$\langle v \rangle = 2\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} 4T^2 k^2 \cdot \left[\left(-\frac{v^2}{2Tk} \cdot \frac{e^{-\frac{mv^2}{2Tk}}}{m} \right) - \frac{e^{-\frac{mv^2}{2Tk}}}{m^2} \right]_0^\infty$$

Aplicando límites:

$$\langle v \rangle = 2\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4T^2 k^2 \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\left(-\frac{v^2}{2Tk} \cdot \frac{e^{-\frac{mv^2}{2Tk}}}{m} \right) - \frac{e^{-\frac{mv^2}{2Tk}}}{m^2} \right]_0^t$$

$$\langle v \rangle = 2\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4T^2 k^2 \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\left(\left(-\frac{t^2}{2Tk} \cdot \frac{e^{-\frac{mt^2}{2Tk}}}{m} \right) - \frac{e^{-\frac{mt^2}{2Tk}}}{m^2} \right) - \left(\left(-\frac{0^2}{2Tk} \cdot \frac{e^{-\frac{m0^2}{2Tk}}}{m} \right) - \frac{e^{-\frac{m0^2}{2Tk}}}{m^2} \right) \right]_0^t$$

$$\langle v \rangle = 2\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4T^2 k^2 \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\left(\left(-\frac{t^2}{2Tk} \cdot \frac{e^{-\frac{mt^2}{2Tk}}}{m} \right) - \frac{e^{-\frac{mt^2}{2Tk}}}{m^2} \right) + \frac{1}{m^2} \right]_0^t$$

$$\langle v \rangle = 2\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4T^2 k^2 \cdot \left(\left(-\infty \cdot \frac{e^{-\infty}}{m} \right) - \frac{e^{-\infty}}{m^2} \right) + \frac{1}{m^2}$$

$$\langle v \rangle = 2\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4T^2 k^2 \cdot \frac{1}{m^2}$$

$$\langle v \rangle = \frac{8\pi T^2 k^2}{m^2} \cdot \frac{m^{3/2}}{2^{3/2} \cdot \pi^{3/2} \cdot k^{3/2} \cdot T^{3/2}}$$

$$\langle v \rangle = \left(\frac{8kT}{\pi m} \right)^{1/2} \quad (5.13)$$

La velocidad media de una muestra de gas es tanto mayor cuanto mayor es la temperatura y menor sea la masa de las moléculas.

Problema 5

En esta ocasión, la fundamentación es la misma que la del problema anterior. La diferencia es que en lugar de tener que hallar la velocidad media, nos piden la velocidad cuadrática media que viene dada por la expresión:

$$v_{rms} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \left(\int_0^\infty v^2 f(v) dv \right)^{1/2} \quad (5.14)$$

La velocidad cuadrática media proporciona una estimación de la velocidad de las moléculas en un gas y está relacionada con su energía cinética.

Para comenzar con la resolución, primero sustituimos (5.11):

$$v_{rms}^2 = \int_0^\infty v^2 \cdot 4\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv$$

Podemos sacar de la integral las variables que permanezcan constantes:

$$v_{rms}^2 = 4\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^\infty v^2 \cdot v^2 \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv$$

Para resolver esa integral, es necesario volver a usar el método de integración por partes ($\int f \cdot dg = f \cdot g - \int g \cdot df$):

$$f = v^3 \quad ; \quad df = 3v^2 dv$$

$$dg = v \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv \quad ; \quad g = -\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m}$$

$$\int v^2 \cdot v^2 \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv = v^3 \cdot \left(-\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m} \right) - \int -\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m} \cdot 3v^2 dv$$

Sacando de la integral las variables constantes nos quedaría:

$$\int v^2 \cdot v^2 \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv = v^3 \cdot \left(-\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m} \right) + \frac{3Tk}{m} \int v^2 \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv$$

Para resolver la integral que se nos presenta tenemos que volver a utilizar el método de integración por partes ($\int f \cdot dg = f \cdot g - \int g \cdot df$):

$$f = v \quad ; \quad df = dv$$

$$dg = ve^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv \quad ; \quad g = -\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m}$$

$$\int v^2 \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv = v \cdot \left(-\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m} \right) - \int -\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m} \cdot dv$$

Para resolver esa integral vamos a simplificarla:

$$u = \frac{\sqrt{m}v}{\sqrt{2}\sqrt{T}\sqrt{k}} \Rightarrow du = \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2}\sqrt{T}\sqrt{k}} dv$$

Sustituyendo y añadiendo el factor $\frac{\sqrt{2}\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}\sqrt{\pi}}$:

$$\int -\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m} \cdot dv = -\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{Tk}{m}\right)^{3/2} \cdot \int \frac{2e^{-u^2}}{\sqrt{\pi}} du$$

La integral que nos aparece es una integral modelo, denominada función error de Gauss:

$$\int \frac{2 \cdot e^{-z^2}}{\sqrt{\pi}} dz = \text{erf}(z)$$

Si reemplazamos lo que tenemos se nos quedaría de la forma:

$$-\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{Tk}{m}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \text{erf}(u)$$

Deshaciendo la sustitución de u y reemplazando en las demás expresiones:

$$v_{rms}^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \left[4\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \cdot \left(v^3 \cdot \left(-\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m}\right) + \frac{3Tk}{m} \cdot \left(v \cdot \left(-\frac{Tke^{-\frac{mv^2}{2kT}}}{m}\right) + \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{Tk}{m}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \text{erf}\left(\frac{\sqrt{m}v}{\sqrt{2}\sqrt{T}\sqrt{k}}\right) \right) \right) \right]_0^t$$

Resolviendo y evaluando en dicho intervalo:

$$v_{rms}^2 = 4\pi \cdot \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \cdot \left(\frac{3Tk}{m} \cdot \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{Tk}{m}\right)^{\frac{3}{2}}\right) \right)$$

$$v_{rms}^2 = \frac{12\pi \cdot m^{3/2} \cdot T \cdot T^{3/2} \cdot k \cdot k^{3/2} \cdot \sqrt{\pi}}{2^{3/2} \cdot \pi^{3/2} \cdot k^{3/2} \cdot T^{3/2} \cdot m \cdot \sqrt{2} \cdot m^{3/2}}$$

$$v_{rms} = \left(\frac{3Tk}{m}\right)^{1/2} \quad (5.15)$$

Y este problema ya estaría resuelto.

6. CONCLUSIÓN

La manera de afrontar una materia instrumental como es el caso de las Matemáticas en el entorno de una ciencia como la Química o la Física suele ser de manera procedimental. Muchas veces se obvia el fundamento teórico que hay detrás de cada uno de los procedimientos o métodos resolutivos que se utilizan en dichas ciencias. Con esta memoria se ha pretendido cubrir de alguna manera esa cuestión, mínimamente en el campo de las integrales impropias. Podemos sacar por tanto varias conclusiones de esta memoria.

- Las matemáticas proporcionan poderosas e importantes herramientas para interpretar, comprender y fundamentar materias científicas como la Química o la Física.
- Detrás de todo procedimiento matemático existe una fundamentación, a pesar de ser siempre obviada.
- Para poder utilizar las expresiones o mecanismos matemáticos en cada una de las ciencias básicas es necesario que “*nos den permiso*” para ello, es decir, haber establecido previamente una fundamentación teórica que valide los procedimientos utilizados.
- Con la aplicación del método de integrales impropias se ha llegado con éxito a la resolución de problemas que se nos presentaban como complejos mediante un procedimiento mucho más simple.
- Se demuestra que las matemáticas constituyen una base fundamental para el entendimiento y el estudio de cualquier ciencia.

7. BIBLIOGRAFÍA

- [1] R. Flores Espinoza, M. A. Valencia Arvizu, G. Dávila Rascón y M. G. García Alvarado, Fundamentos del Cálculo, Garabatos, 2008.
- [2] E. Steiner, Matemáticas para las ciencias aplicadas, Reverté S. A., 2005.
- [3] F. J. Pérez González, Cálculo diferencial e integral de funciones de una variable, Granada.
- [4] J. de Burgos Roman, Cálculo infinitesimal de una variable, Madrid: McGraw-Hill, 2007.
- [5] J. M. Quesada Teruel, C. Sánchez Gómez, J. Jódar Reyes y J. Martínez Moreno, Análisis Matemático y Métodos Numéricos, Jaén.
- [6] I. N. Levine, Espectroscopía Molecular, Madrid: AC, 1980.