

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA



TRABAJO DE FIN DE GRADO

Código TFG: FT29

El problema de Thomson: Configuraciones de equilibrio de N cargas del mismo signo sobre una superficie esférica.

The Thomson problem: equilibrium configurations of N mutually repelling charges on the surface of a sphere

Dirigida por: Dr. F. Javier Chinae

Ana Pilar Ysasi Cillero

Doble grado en matemáticas y física

Curso académico 2019/2020

Convocatoria de Julio

"No fact discovered about the atom can be trivial, nor fail to accelerate the progress of physical science, for the greater part of natural philosophy is the outcome of the structure and mechanism of the atom."

—Sir J. J. Thomson

Índice

Resumen	1
Abstract	1
1. Introducción	2
2. Modelo de Thomson: Plum pudding	2
3. Casos particulares	3
3.1. $N=2$. Electrones en puntos antipodales	5
3.2. $N=3$. Electrones en los vértices de triángulo equilátero	6
3.3. $N=4$. Electrones en los vértices de un tetraedro regular	9
3.4. $N=5$. Electrones en los vértices de un bipirámide triangular	11
4. Grupos Puntuales en tres dimensiones	13
4.1. Grupos de simetría para el problema de Thomson	15
5. Caso general	18
6. Conclusiones	19
Referencias	20

Resumen

¿Cómo se organizan N cargas del mismo signo -y por tanto repulsivas entre sí- en equilibrio sobre una esfera? Hace poco más de un centenar de años, Thomson consideró este mismo problema en un intento de explicar la tabla periódica desarrollando el modelo del átomo conocido como "plum pudding" (pudin de ciruelas). Actualmente, cuando se habla del *problema de Thomson*, se entiende por algo mucho más general que este modelo. La generalización de esta tesisura consiste en determinar la energía del estado fundamental y la configuración de muchas partículas que interactúan a través de un potencial arbitrario repulsivo en una esfera.

En este trabajo, calcularemos explícitamente algunas soluciones particulares para las primeras cuatro configuraciones de Thomson y veremos también sus grupos de simetría, pudiendo extrapolar así nuestra solución a un conjunto más grande de soluciones topológicamente equivalentes.

Abstract

How are N charges of the same sign - and therefore repulsive to each other - arranged in equilibrium on a sphere? Just over a hundred years ago, Thomson considered this same problem in an attempt to explain the periodic table by developing the model of the atom known as "plum pudding". Nowadays, the *Thomson's problem* is known as a larger question than this original model. The generalization of this situation consists in determining the energy of the ground state and the configuration of many particles that interact through an arbitrary repulsive potential on a sphere.

In this work, we will explicitly calculate some particular solutions for the first four Thomson configurations and we will also describe their symmetry groups, thus being able to extrapolate our solution to a larger set of topologically equivalent solutions.

1 | Introducción

En la *Sección 2*, comenzaremos con una breve introducción histórica así como una contextualización de las aplicaciones actuales del problema de Thomson. A continuación, trataremos explícitamente el cálculo de las cuatro primeras configuraciones de electrones sobre la esfera, dando una solución particular para cada uno de los casos. En la *Sección 4* introduciremos los distintos grupos de simetría de cada solución, haciendo uso de la notación de Schönflies. De esta forma, podremos generalizar las soluciones particulares encontradas a un conjunto de puntos topológicamente equivalentes, que recogen todas las posibles disposiciones para cada uno de los casos. En la última sección trataremos el caso general para $N \rightarrow \infty$, estudiando cuál es el patrón general para la configuración en equilibrio de N puntos sobre la esfera.

2 | Modelo de Thomson: Plum pudding

J. J. Thomson -quien descubrió el electrón en 1897- propuso el modelo del *plum pudding* en 1904, con el objetivo de incluir en la descripción del átomo a esta partícula subatómica. En este modelo, planteado antes del descubrimiento del núcleo, la repulsión de los electrones se considera equilibrada a través de una sopa de carga positiva que los rodea. Como *ciruelas* cargadas negativamente rodeadas de *pudding* cargado positivamente. Con este modelo, Thomson abandonó su hipótesis anterior de “nebulosa atómica”, en la que este era descrito a partir de vórtices inmateriales. Con esta innovación se contemplaba que, al menos, parte del átomo debía estar compuesto por los corpúsculos negativos que él había descubierto, los electrones. Sin embargo, el resto de las componentes -es decir, la parte positivamente cargada- seguían teniendo una naturaleza algo difusa. Esta propuesta fue refutada por el experimento de la lámina de oro de 1909, realizado por Hans Geiger y Ernest Marsden, que sugerían la existencia de un núcleo muy pequeño donde debía encontrarse la carga positiva, dando lugar al *modelo de Rutherford*.

La generalización de este problema, considerando cualquier partícula y potencial, ha resurgido en muchos campos como la biología, matemáticas, física e informática. Puede aplicarse a la química estructural, el diseño de dispositivos de implosión láser multihaz y la colocación óptima de satélites de comunicación, así como la morfología de un virus, las capas de proteínas, fullerenos, ordenamiento cristalino en superficies esféricas, la teoría de la codificación... Razón por la que a día de hoy se sigue estudiando, siendo todavía un problema abierto para un número N de partículas.

| Observación 2.1. *A pesar de que el problema que vamos a tratar se llame modelo de Thomson, hay que entender que hay una diferencia sustancial muy importante con el problema*

original. El modelo de átomo que el científico propuso en el 1904 se basa en una esfera con materia de carga positiva y con partículas cargadas negativamente dentro de la esfera. Sin embargo, lo que se conoce como problema de Thomson hoy en día es algo distinto. No solo porque se ha generalizado para otras partículas y para la minimización de cualquier potencial repulsivo (no solo el Colombiano), sino también porque conceptualmente es distinto. Actualmente, cuando nos referimos a este problema entendemos que las cargas han de estar en la superficie de la esfera. Mientras que en el modelo atómico se trataba más bien de lo que se conoce como “sphere packing” con un potencial repulsivo, en el que los corpúsculos están dentro de la esfera. Por motivos históricos se mantiene el nombre, pero hay que tener en cuenta que conceptualmente es distinto.

3 | Casos particulares

Tratemos formalmente algunos casos particulares, para entender la complejidad de la que el problema trata. Sea el potencial colombiano de N electrones ($V_{C,N}$) dado por:

$$V_N \equiv \frac{V_{C,N}}{k_e} = \sum_{i=1}^N \sum_{j<i} \frac{1}{\|\bar{r}_i - \bar{r}_j\|_2} \quad (1)$$

donde $k_e \approx 8,987 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2$ es la constante de Coulomb y $\|\bar{r}_i - \bar{r}_j\|_2$ corresponde a la distancia entre cada par de electrones localizados en los puntos de la esfera de radio R , (definida como $S^2 = \{\bar{r} \in \mathbb{R}^3 : \|\bar{r}\| = R\}$) dados por los vectores \bar{r}_i y \bar{r}_j respectivamente. El problema en cuestión trata la minimización de este potencial, encontrando cuáles serán las posiciones en equilibrio de las partículas.

Hay diferentes formas de tratar esta cuestión. Una puede ser la introducción de *multiplicadores de Lagrange* λ_i , con el objetivo de restringir los corpúsculos a la superficie de la esfera, es decir, introducir las funciones:

$$\phi_i = r_i^2 - R^2 \quad \forall i \in \{1, \dots, N\} \quad (2)$$

donde R corresponde al radio de la esfera y r_i a la posición de la partícula i -ésima. De esta manera, habría que introducir un multiplicador por partícula, reduciendo el problema de $3N$ coordenadas independientes a $2N$ coordenadas independientes (al haber N ligaduras holónomas, una por partícula, el problema se reduce a $3N-N$ coordenadas independientes). De esta manera habría que minimizar la función lagrangiana \mathcal{L} dada por:

$$\mathcal{L}(\bar{r}_i, \lambda_i) : V(\bar{r}_i) - \sum_i \lambda_i \phi_i, \quad \lambda_i \in \mathbb{C} \quad (3)$$

Sin embargo, este método es bastante complicado a la hora de aplicarlo a nuestro problema en concreto. Como en este caso, los multiplicadores de Lagrange lo único que pretenden

es restringir las posiciones de los electrones a estar sobre la superficie de la esfera, podemos hacer un tratamiento matemático mucho más sencillo. Para ello escribiremos las coordenadas directamente sobre la superficie de una esfera. Es decir, las posiciones \bar{r}_i de los electrones vendrán dadas por:

$$\bar{r}_i = (R \sin \theta_i \cos \varphi_i, R \sin \theta_i \sin \varphi_i, R \cos \theta_i) =_{R=1} (\sin \theta_i \cos \varphi_i, \sin \theta_i \sin \varphi_i, \cos \theta_i) \quad (4)$$

De esta manera, al introducir los vectores \bar{r}_i tal y como se expresan en (4) en el potencial dado por (1), estaremos limitando las posiciones a estar directamente sobre la superficie de una esfera (consideramos $R=1$ por simplicidad). Así en vez de minimizar la ecuación (3), donde se habían introducido N variables más para minimizar ($\lambda_i, i \in \{1, \dots, N\}$), tendremos ahora que minimizar sencillamente la ecuación dada por:

$$V_N(\theta_1, \dots, \theta_N, \varphi_1, \dots, \varphi_N) = \sum_{i=1}^N \sum_{j < i} \frac{1}{\|\bar{r}_i - \bar{r}_j\|_2} \quad (5)$$

donde por cada partícula i , la función a minimizar dependerá de dos variables (θ_i, φ_i).

Observación 3.1. Debido a que vamos a estar trabajando en coordenadas esféricas, debemos tener lo más claro posible cómo describir los planos y qué significa dejar constante cada una de las variables., es decir:

- Superficies con $r = r_0$ fijo, son esferas de radio r_0 (consideraremos $r_0 = 1$ para todos los casos).
- Superficies con $\theta = \theta_0$ fijo, son conos con ángulo θ_0 con respecto al eje z . (En azul oscuro se representa la circunferencia que surge al cortar el cono con la circunferencia, es decir a r y θ constantes).
- Por último superficies con $\varphi = \varphi_0$ fijo, son medios-planos a un ángulo φ_0 del eje x . (En verde oscuro se representa la media circunferencia que surge al cortar el plano con la circunferencia, es decir a r y φ constantes).

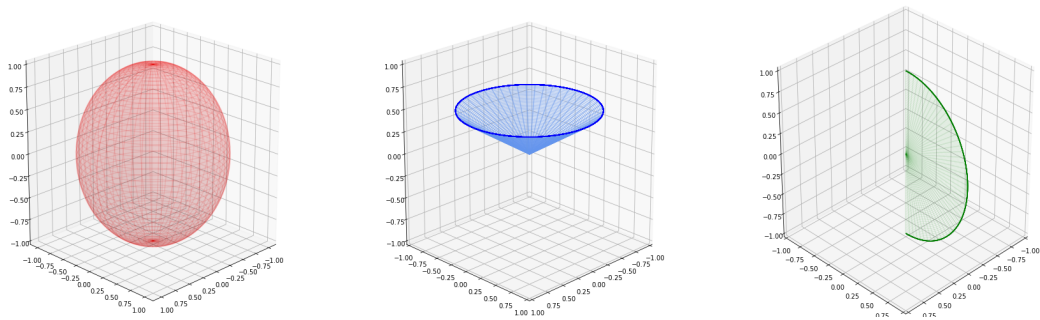


Figura 1: Superficies con r, θ, φ constantes respectivamente.

Será importante tener estos planos constantes lo más claro posibles para poder interpretar luego los resultados obtenidos.

3.1 N=2. Electrones en puntos antipodales

En primer lugar, hay que tener en cuenta que las partículas, -es decir, los electrones- se repelen entre sí. Por lo tanto, estarán en la posición tal que la distancia entre ellos sea lo mayor posible. Al estar restringidos a una esfera, parece intuitivo que los electrones estén en posiciones antipodales. Demostrémoslo formalmente.

Tal y como hemos explicado anteriormente, el problema consiste en minimizar el potencial descrito en (5). En el caso de dos electrones tenemos en particular:

$$V_2 = \frac{1}{\|\bar{r}_1 - \bar{r}_2\|_2} \quad (6)$$

donde las posiciones vienen dadas por: $\bar{r}_1 = (\sin\theta_1 \cos\varphi_1, \sin\theta_1 \sin\varphi_1, \cos\theta_1)$ y $\bar{r}_2 = (\sin\theta_2 \cos\varphi_2, \sin\theta_2 \sin\varphi_2, \cos\theta_2)$. Por tanto podemos reescribir (6) como:

$$V_2 = \frac{1}{\sqrt{(\sin\theta_1 \cos\varphi_1 - \sin\theta_2 \cos\varphi_2)^2 + (\sin\theta_1 \sin\varphi_1 - \sin\theta_2 \sin\varphi_2)^2 + (\cos\theta_1 - \cos\theta_2)^2}}$$

Para buscar la tupla de valores $(\theta_1, \theta_2, \varphi_1, \varphi_2)$ que minimizan el potencial, debemos de derivar con respecto de cada una de las variables y buscar cuáles son los valores que anulan las ecuaciones obtenidas. Estas ecuaciones tienen una expresión bastante compleja¹, por lo que para simplificarlas lo máximo posible multiplicaremos por el denominador. Por lo tanto, tenemos que ser cuidadosos en que este no se anule. Es claro que esto solo sucederá si $\bar{r}_1 = \bar{r}_2$, es decir, si $(\theta_1, \varphi_1) = (\theta_2, \varphi_2)$ o equivalentemente, si los electrones están en la misma posición, que al ser partículas con cargas del mismo signo, parece bastante intuitivo. Una vez que simplificamos las ecuaciones, obtenemos:

$$\frac{\partial V_2}{\partial \theta_1} = 0 \Rightarrow \sin(\theta_1) \cos(\theta_2) - \sin(\theta_2) \cos(\theta_1) \cos(\varphi_1 - \varphi_2) = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial V_2}{\partial \theta_2} = 0 \Rightarrow \sin(\theta_1) \cos(\theta_2) \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - \sin(\theta_2) \cos(\theta_1) = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial V_2}{\partial \varphi_1} = \frac{\partial V_2}{\partial \varphi_2} = 0 \Rightarrow [-\sin(\varphi_1) \cos(\varphi_2) + \sin(\varphi_2) \cos(\varphi_1)] \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) = 0 \quad (9)$$

Dada la expresión trigonométrica

$$\sin(\varphi_1 - \varphi_2) = \sin(\varphi_1) \cos(\varphi_2) - \sin(\varphi_2) \cos(\varphi_1) \quad (10)$$

podemos reescribir (9) como:

$$\sin(\theta_1) \sin(\theta_2) \sin(\varphi_1 - \varphi_2) = 0 \quad (11)$$

¹El proceso de resolución se encuentra detallado en <https://github.com/anapysasi/Calculations-Thomson-Problem>

Las soluciones de esta ecuación son las siguientes (partimos en todos los casos de la ecuación 11):

- $\sin(\varphi_1 - \varphi_2) = 0$ y por tanto $\varphi_i = \pi + \varphi_j + k\pi$ ($\cos(\varphi_1 - \varphi_2) = 1$). Sustituyendo esto en las ecuaciones (7) y (8), tenemos que ambas son de la forma:

$$\sin(\theta_1)\cos(\theta_2) - \sin(\theta_2)\cos(\theta_1) =^{(10)} \sin(\theta_1 - \theta_2) = 0$$

y por tanto $\theta_i = \pi + \theta_j + k\pi$. Y por tanto: los electrones están en posiciones antipodales.

- Si $\sin(\varphi_1 - \varphi_2) \neq 0$ entonces una solución es que $\sin(\theta_1) = 0$. Sustituimos este resultado en las dos primeras ecuaciones y obtenemos:

$$\sin(\theta_2)\cos(\varphi_1 - \varphi_2) = 0 \quad \& \quad \sin(\theta_2) = 0$$

Es decir, para que ambas se anulen, es necesario que $\sin(\theta_2) = 0$ y por tanto $\theta_i = \pi + k\pi$ para cualquier valor de φ_i , obteniendo de nuevo que los puntos son antipodales

- Si $\sin(\varphi_1 - \varphi_2) \neq 0$ entonces la otra posible solución es que $\sin(\theta_2) = 0$. Totalmente simétrico al caso anterior.

Concluimos por tanto que los electrones están en **posiciones antipodales**, representamos la situación a continuación:

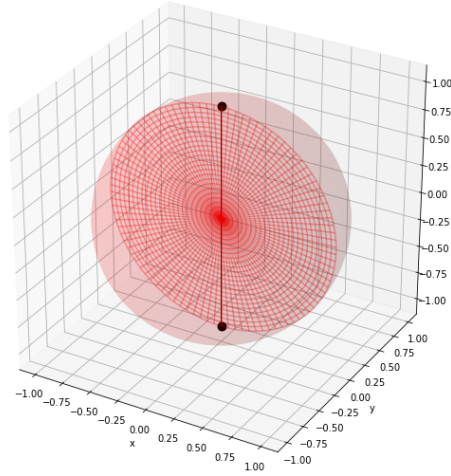


Figura 2: Posición en equilibrio de dos electrones sobre la esfera.

3.2 N=3. Electrones en los vértices de triángulo equilátero

Debido a que tres puntos siempre forman un plano, sabemos que los tres electrones estarán en una circunferencia sobre la esfera. Del mismo modo que en el caso anterior, como

todos los electrones tienen carga negativa, se repelen entre sí dos a dos. Esto implica que estarán lo más alejados que puedan unos de otros, o equivalentemente, en la circunferencia más grande posible dentro de la esfera, es decir, en una circunferencia que pase por el origen. Además, las cargas en el equilibrio estarán dispuestas tal que el potencial se minimice, y por lo tanto, la distancia entre los corpúsculos sea lo máxima posible, o equivalente, tal que el área que las encierra sea lo mayor posible. Sabemos que, entre todos los triángulos inscritos en un círculo dado, el equilátero tiene el área más grande. Por tanto, concluimos que los electrones necesariamente están dispuestos en forma de triángulo equilátero dentro de una circunferencia de la esfera que pase por su centro.

Veamos formalmente que esto es lo que ocurre. En este caso el potencial será:

$$V_3 = \frac{1}{\|\bar{r}_1 - \bar{r}_2\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_1 - \bar{r}_3\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_2 - \bar{r}_3\|_2} \quad (12)$$

donde las posiciones \bar{r}_i vendrán dadas por la ecuación (4). Haciendo las derivadas con respecto de cada una de las variables y simplificando tenemos que las derivadas con respecto φ_i son de la forma:

$$\frac{\partial V_3}{\partial \varphi_i} = 0 \Rightarrow \sum_{l=j,k} \frac{\sqrt{2} \sin(\theta_i) \sin(\theta_l) \sin(\varphi_i - \varphi_l)}{4 (-\sin(\theta_i) \sin(\theta_l) \cos(\varphi_i - \varphi_l) - \cos(\theta_i) \cos(\theta_l) + 1)^{3/2}} = 0 \quad (13)$$

donde $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$ distintos dos a dos. Para que cada una de las ecuaciones $\frac{\partial V_3}{\partial \varphi_i} = 0$, una posible solución es que: $\sin(\varphi_i - \varphi_l) = 0$ o equivalentemente $\varphi_i = \varphi_l + n\pi$, con $n \in \mathbb{Z}$ y $\forall i, l$. Tomemos, por ejemplo: $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi_3 = \varphi$, que nos dará, tal y como vimos en la *Observación (3.1)* un plano de ángulo φ con respecto del eje x , o equivalentemente un plano que pasa por el origen, es decir, una circunferencia de máximo radio de la esfera. Si sustituimos esto en las otras ecuaciones, es decir:

$$0 = \frac{\partial V_3}{\partial \theta_i} (\theta_1, \theta_2, \theta_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) \Big|_{\varphi_i = \varphi} = \frac{\partial V_3}{\partial \theta_i} (\theta_1, \theta_2, \theta_3, \varphi) \equiv \frac{\partial V_3}{\partial \theta_i}$$

Obtenemos el siguiente resultado:

$$\frac{\partial V_3}{\partial \theta_i} = 0 \Rightarrow \sum_{l=j,k} \frac{\sin(\theta_i - \theta_l)}{(2 - 2\cos(\theta_i - \theta_l))^{3/2}} = 0 \quad (14)$$

Esta vez, no podemos utilizar la misma solución que en el caso anterior, puesto que al ser $\varphi_i = \varphi_j$, necesariamente $\theta_i \neq \theta_j$, sino alguno de los denominadores de las derivadas se anularía. Para resolver (14) vamos a suponer, sin pérdida de la generalidad, que una de las partículas está fija, y veamos como se posicionan las otras dos con respecto a esta (teniendo en cuenta la restricción $\varphi_i = \varphi$). Debido a que las electrones son idénticos y las rotaciones invariantes, podemos hacer esta suposición sin problema. Consideremos, s.p.d.g. $\theta_1 = 0$ y

por tanto el primer electrón tendrá coordenadas: $e_1^3 = (0, 0, 1)$. De esta manera, la ecuación (14) será:

$$\left. \frac{\partial V_3}{\partial \theta_i} \right|_{\theta_1=0} = 0 \Rightarrow \frac{\sin(\theta_i - \theta_j)}{(2 - 2\cos(\theta_i - \theta_j))^{3/2}} + \frac{\sin(\theta_i)}{(2 - 2\cos(\theta_i))^{3/2}} = 0 \quad (15)$$

donde $i, j \in \{2, 3\}$. Finalmente obtenemos estas dos ecuaciones no lineales, que son bastante complicadas de resolver. Para encontrar las raíces², representamos las ecuaciones como funciones de dos variables y nos quedamos solo con aquellos puntos que corten con el plano $z = 0$, que corresponderán con la tupla de puntos (θ_2^s, θ_3^s) que anulan $\frac{\partial V_3}{\partial \theta_i}(\theta_2, \theta_3) = 0$.

Si observamos la *Figura 3 (a)*, donde se representan el conjunto de raíces de las ecuaciones dadas por (15), nos damos cuenta de que el conjunto de puntos representado corresponde a la recta $y = 2x$. En términos de nuestro problema, las raíces de las ecuaciones serán aquel conjunto de puntos tales que: $\theta_2 = 2\theta_3$. Pero como los electrones están sobre una circunferencia de la esfera, necesariamente $\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 = 2\pi$ y como arbitrariamente habíamos elegido $\theta_1 = 0$ y acabamos de obtener $\theta_2 = 2\theta_3$ finalmente concluimos: $3\theta_2 = 2\pi$. Por tanto $\theta_2 = \frac{2\pi}{3}$ y $\theta_3 = \frac{4\pi}{3}$. Un conjunto de soluciones dado por el desarrollo anterior pueden ser las coordenadas: $e_1^3 = (0, 0, 1)$, $e_2^3 = \left(0, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$, $e_3^3 = \left(0, -\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$

Concluimos por tanto, que en el caso de haber tres electrones estos residirán en **los vértices de un triángulo equilátero**, de lado $\sqrt{3}$, inscrito en una circunferencia de radio máximo sobre la esfera. Representamos a continuación la disposición calculada:

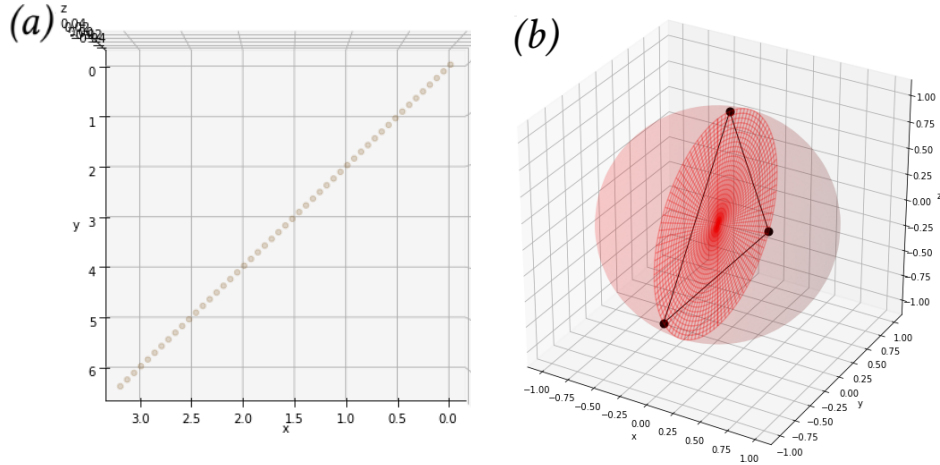


Figura 3: (a) Conjunto de raíces de las ecuaciones dadas por (15). (b) Posición en equilibrio de tres electrones sobre la esfera.

²Los cálculos detallados están <https://github.com/anapysasi/Calculations-Thomson-Problem>.

3.3 N=4. Electrones en los vértices de un tetraedro regular

Si observamos cómo se planteó el problema, nos daremos cuenta de que llegados a este punto, a nivel computacional, nos enfrentamos con un problema. Al tener $N = 4$ electrones, tendremos que el potencial depende de $2N = 8$ variables con respecto a las que hay que minimizar. El potencial en este caso será de la forma:

$$V_4 = \frac{1}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|_2} + \frac{1}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_3\|_2} + \frac{1}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_4\|_2} + \frac{1}{\|\vec{r}_2 - \vec{r}_3\|_2} + \frac{1}{\|\vec{r}_2 - \vec{r}_4\|_2} + \frac{1}{\|\vec{r}_3 - \vec{r}_4\|_2}$$

Como tres electrones siempre formarán un plano, podemos considerar que $\theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = \theta$, que debido a la invarianza de rotaciones y al hecho de que las partículas son idénticas podemos suponerlo sin problema. Aún así, el problema sigue siendo bastante complicado computacionalmente, por lo que comenzaremos resolviendo las coordenadas para la partícula $\theta_1 \neq \theta$ y una vez que tengamos estas, ya el problema quedará reducido a tan solo a 4 variables. Comenzaremos con las derivadas respecto de φ_1 y obtenemos:

$$-\frac{\sqrt{2}}{4} \sum_{i=2}^4 \frac{\sin(\theta) \sin(\theta_1) \sin(\varphi_1 - \varphi_i)}{(-\sin(\theta) \sin(\theta_1) \cos(\varphi_1 - \varphi_i) - \cos(\theta) \cos(\theta_1) + 1)^{3/2}} = 0 \quad (16)$$

Vemos que una posible solución puede ser que alguno de los senos del numerador se anule, como queremos resolver para el primer electrón, consideramos la solución particular $\sin(\theta_1) = 0$, que nos da las coordenadas: $x_1 = 0, y_1 = 0, z_1 = 1$, independientemente del valor de φ_1 .

Aún sustituyendo estos valores en las ecuaciones, la derivada del potencial con respecto a θ sigue siendo excesivamente complicada, por lo que trataremos primero $\frac{\partial V}{\partial \varphi_i} = 0, \forall i$. Al computar estas ecuaciones observamos que:

$$0 = \frac{\partial V_4}{\partial \varphi_{i+1}}(\varphi_2, \varphi_3, \varphi_4) = \frac{\partial V_3}{\partial \theta_i}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \Big|_{(\varphi_2, \varphi_3, \varphi_4)} \cdot \frac{1}{|\sin(\theta)|} \quad \text{con } i \in \{1, 2, 3\} \quad (17)$$

Es decir, salvo un factor $\frac{1}{|\sin(\theta)|}$ las ecuaciones del apartado anterior dadas por (14) son idénticas a las de este, pero sustituyendo las variables $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ por $(\varphi_2, \varphi_3, \varphi_4)$. Lo que implica que mientras $\sin(\theta) \neq 0$, las soluciones que habíamos encontrado para el caso anterior para las variables θ_i ahora también serán raíces para este apartado con variables φ_{i+1} . Por tanto concluimos que $\varphi_2 = 0, \varphi_3 = \frac{2\pi}{3}, \varphi_4 = \frac{4\pi}{3}$

Sustituyendo estos valores en las coordenadas del potencial y derivando con respecto a θ tenemos:

$$\frac{\partial V_4}{\partial \theta} = 3 \frac{-(1 - \cos(\theta))\sin(\theta) - \sin(\theta)\cos(\theta)}{((1 - \cos(\theta))^2 + \sin^2(\theta))^{3/2}} - \frac{\sqrt{3}\cos(\theta)}{\sin^2(\theta)} \quad (18)$$

Como es una ecuación no lineal, es bastante complicada de resolver, por lo que vamos a representar la función en el intervalo $\theta \in (0, \pi)$ para buscar las raíces y luego restringiremos al intervalo donde se encuentra la raíz para ver aproximadamente de qué valor se trata, se presenta este gráfico en la *Figura 4*.

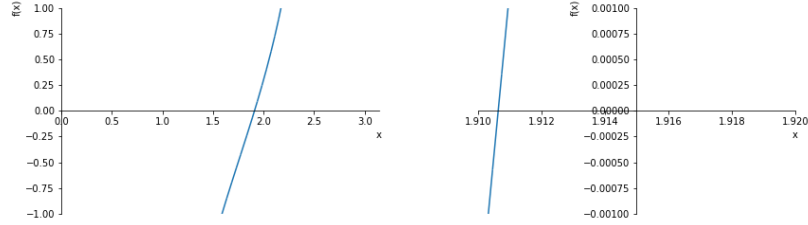


Figura 4: Gráfica de la ecuación (18), primero en el intervalo de definición de θ y luego aumentando la escala a $\theta \in (1,91, 1,92)$.

Podemos resolver que $\theta \approx 1,9105$. Sabemos que el $\cos(\theta)$ corresponde a la coordenada z de los tres electrones, en cuyo caso valdría: $\cos(1,9105) = -0,333208 \approx -\frac{1}{3}$. Sustituyendo $\theta = \arccos(-1/3)$ en la ecuación (18), en efecto obtenemos 0. Finalmente concluimos que $(\varphi_2, \varphi_3, \varphi_4, \theta) = (0, \frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}, \arccos(-\frac{1}{3}))$ y las coordenadas de los electrones serán:

$$e_1^4 = (0, 0, 1) \quad e_2^4 = \left(\sqrt{\frac{8}{9}}, 0, -\frac{1}{3}\right) \quad e_3^4 = \left(-\sqrt{\frac{2}{9}}, \sqrt{\frac{2}{3}}, -\frac{1}{3}\right) \quad e_4^4 = \left(-\sqrt{\frac{2}{9}}, -\sqrt{\frac{2}{3}}, -\frac{1}{3}\right)$$

Por tanto, en el caso de haber cuatro electrones estos estarán en **los vértices de un tetraedro regular** cuyo lado es de medida $\sqrt{\frac{8}{3}}$. Veamos como quedarían posicionados:

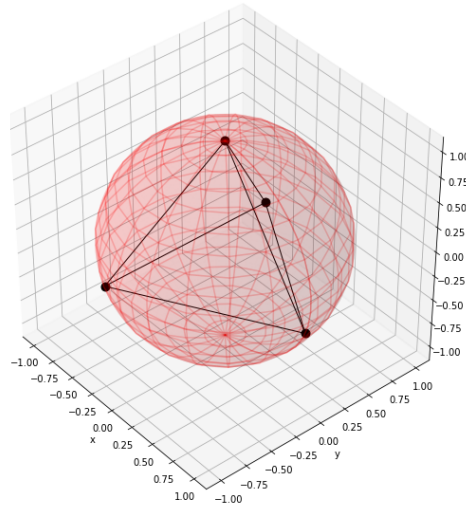


Figura 5: Posición en equilibrio de cuatro electrones sobre la esfera.

Hasta ahora hemos obtenido que las posiciones de los electrones dentro de lo que cabe, son bastante intuitivas. En el sentido de que mediante razonamientos puramente físicos podemos sospechar dónde se van a encontrar los electrones. Quizás, es llamativo que para el caso de cuatro electrones, no obtengamos un cuadrado, que podría parecer la solución a priori, sino que obtenemos una pirámide con base triangular, es decir, un tetraedro. Veamos que ocurre si introducimos un electrón más en la configuración.

3.4 N=5. Electrones en los vértices de un bipirámide triangular

El potencial en el caso de cinco electrones sobre la superficie de la esfera será:

$$V_5 = \sum_{i=1}^N \sum_{i < j} \frac{1}{\|\bar{r}_i - \bar{r}_j\|_2} = \frac{1}{\|\bar{r}_1 - \bar{r}_2\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_1 - \bar{r}_3\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_1 - \bar{r}_4\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_1 - \bar{r}_5\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_2 - \bar{r}_3\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_2 - \bar{r}_4\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_2 - \bar{r}_5\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_3 - \bar{r}_4\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_3 - \bar{r}_5\|_2} + \frac{1}{\|\bar{r}_4 - \bar{r}_5\|_2}$$

donde cada \bar{r}_i vendrá dado por la ecuación (4), es decir, tenemos que minimizar una función dada por 10 sumandos (fracciones en particular) y depende además de 10 variables. La complicación computacional va aumentando considerablemente a medida que N aumenta y ya en este caso, resolver estas ecuaciones "a la fuerza" no es una opción, por lo que tendremos que hacer algunas hipótesis. Como tres partículas siempre formarán un plano, podemos considerar $\theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = \theta$, que ya hemos visto que haciendo una elección de coordenadas adecuada, esta hipótesis es totalmente general. Sin embargo, no es suficiente para resolver el problema directamente, y por lo tanto necesitamos fijar una de las partículas, de forma que nos interesa hacerlo de la manera más coherente posible. Para hacer una simplificación lo más general e intuitiva posible veamos la siguiente observación.

| Definición 3.1 (Envoltura convexa). Es claro que un conjunto de puntos en un espacio euclídeo se define como convexo si contiene todos los segmentos lineales que conectan cada par de sus puntos. Entonces, definimos la envoltura convexa de un conjunto X dado, como la intersección de todos los conjuntos convexos que contienen a X .

| Observación 3.2. Si estuviéramos tratando este problema desde un punto de vista totalmente matemático, podríamos considerar también el poliedro inscrito en la circunferencia formado por la envoltura convexa de los puntos. Los polígonos equivalentes a cada distribución son:

$$N = 2 \Rightarrow \text{dígono}, \quad N = 3 \Rightarrow \text{triángulo equilátero}, \quad N = 4 \Rightarrow \text{tetraedro regular}.$$

Vemos entonces que en los casos tratados hasta ahora todos los polígonos que separan tres electrones cualesquiera han sido triángulos.

De esta forma, vamos a considerar los electrones colocados en los vértices del poliedro convexo formado por la envoltura convexa de cinco puntos, con caras triangulares, i.e.: una bipirámide triangular. Es decir, dos tetraedros unidos por la base. Teniendo esto en cuenta, vamos a fijar el primero de los electrones en las coordenadas $e_1^5 = (0, 0, 1)$, que correspondería con la punta de una de las pirámides triangulares. Con estas hipótesis $[\theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = \theta \quad \& \quad (\theta_1, \varphi_1) = (0, 0)]$ plateamos las ecuaciones necesarias para minimizar el problema. Las derivadas con respecto de θ y θ_5 son excesivamente complicadas, por lo que comenzaremos con $\frac{\partial V_5}{\partial \varphi_i}$:

$$\frac{\partial V_5}{\partial \varphi_i} = -\frac{1}{4} \frac{\sqrt{2} \sin(\theta) \sin(\theta_5) \sin(\varphi_i - \varphi_5)}{(1 - \sin(\theta) \sin(\theta_5) \cos(\varphi_i - \varphi_5) - \cos(\theta) \cos(\theta_5))^{1/2}} + \frac{\partial V_4}{\partial \varphi_i} = 0 \quad i \in \{2, 3, 4\} \quad (19)$$

$$\frac{\partial V_5}{\partial \varphi_5} = \sum_{i=2}^4 \frac{\sqrt{2} \sin(\theta) \sin(\theta_5) \sin(\varphi_i - \varphi_5)}{4(1 - \sin(\theta) \sin(\theta_5) \cos(\varphi_i - \varphi_5) - \cos(\theta) \cos(\theta_5))^{3/2}} = 0 \quad (20)$$

Si $\sin(\theta_5) = 0$, el primer sumando de las ecuaciones se anula y nos queda:

$$\frac{\partial V_5}{\partial \varphi_i} = \frac{\partial V_4}{\partial \varphi_i} = 0 \quad i \in \{2, 3, 4\} \quad \& \quad \frac{\partial V_5}{\partial \varphi_5} = 0 \quad (21)$$

Por lo tanto, las soluciones que habíamos obtenido en las ecuaciones (17) del caso anterior, también serán válidas para este y concluimos: $\varphi_2 = 0, \varphi_3 = \frac{2\pi}{3}, \varphi_4 = \frac{4\pi}{3}$

Imponemos por tanto que $\sin(\theta_5) = 0$ y obtenemos que necesariamente $\theta_5 = \pi$ ya que $\theta_1 = 0$ y sino ambos electrones estarían en la misma posición y esto es físicamente imposible (además anularía uno de los denominadores del potencial). Sustituimos en el potencial y computamos la última de las derivadas. Obtenemos la siguiente ecuación; que resolvemos del mismo modo que resolvimos (18):

$$\frac{\partial V_5}{\partial \theta} = \frac{3\sqrt{2}\sin(\theta)}{4(1 + \cos(\theta))^{3/2}} - \frac{3\sin(\theta)}{(2 - 2\cos(\theta))^{3/2}} - \frac{\sqrt{3}\cos(\theta)}{\sin^2(\theta)} = 0 \quad (22)$$

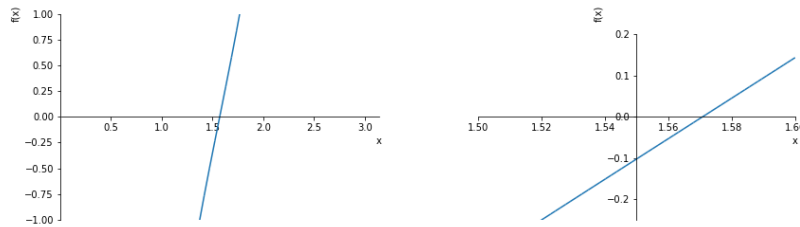


Figura 6: Gráfica de la ecuación (22), primero en el intervalo de definición de θ y luego aumentando la escala a $\theta \in (1,5, 1,6)$.

La solución es aproximadamente $\theta \approx 1,57$. Sabemos que $\frac{\pi}{2} \approx 1,57$, por lo que probamos este resultado como solución exacta y efectivamente obtenemos que $\frac{\partial V_5}{\partial \theta}(\theta = \frac{\pi}{2}) = 0$. Finalmente concluimos que las coordenadas de los electrones serán:

$$e_1^5 = (0, 0, 1), \quad e_2^5 = (1, 0, 0), \quad e_3^5 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \quad e_4^5 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \quad e_5^5 = (0, 0, -1)$$

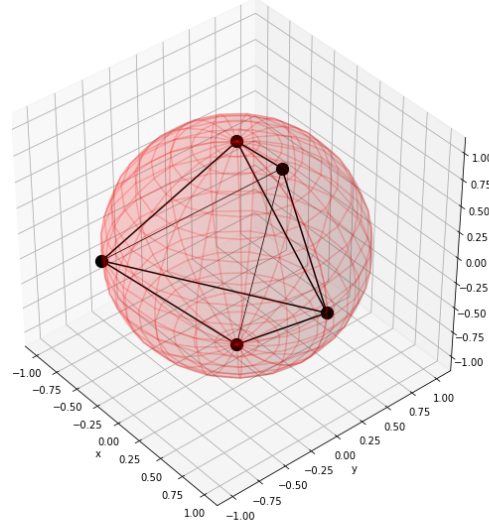


Figura 7: Posición en equilibrio de cinco electrones sobre la esfera.

4 | Grupos Puntuales en tres dimensiones

En el apartado anterior hemos obtenido algunas soluciones particulares para los casos en los que sobre la esfera se disponen dos, tres y cuatro electrones. Sin embargo, es evidente que, por ejemplo, para el caso en el que tenemos 2 electrones, las posiciones válidas no son únicamente: $e_1 = (0, 0, 1)$ y $e_2 = (0, 0, -1)$, sino que para cualquier conjunto de puntos antipodales obtenemos la misma energía mínima que para estas dos coordenadas en particular. Y ocurre de manera análoga para el resto de los casos. En este apartado vamos a tratar algunos de los grupos de simetría que obtenemos para cada una de las configuraciones tales que la energía dada por (5) es mínima. Veamos primero algunas definiciones básicas necesarias para poder hacer este tratamiento.

En primer lugar, es claro que los grupos de objetos simétricos entre sí son grupos de isometría. En consecuencia, el análisis de grupos de isometría es el análisis de posibles simetrías. Todas las isometrías de un objeto 3D acotado tienen uno o más puntos fijos comunes. En este caso en particular elegimos el origen como uno de ellos.

| Definición 4.1 (Grupo Puntual). *Un grupo puntual en tres dimensiones es un grupo de isometría en tres dimensiones que deja fijo el origen, o equivalentemente, el grupo de isometría de una esfera. Es un subgrupo del grupo ortogonal³ $O(3)$.*

Los grupos puntuales están categorizados por los siguientes elementos:

- $\mathbb{1} \equiv$ identidad.
- $C_n \equiv$ rotación del ángulo $\frac{2\pi}{n}$ sobre un determinado eje.
- $S_n \equiv$ rotación impropia, es decir, rotación del ángulo $\frac{2\pi}{n}$ sobre un determinado eje seguido de una reflexión en un plano perpendicular a ese eje. Destacan los siguientes elementos:
 - $i \equiv S_2 \equiv$ inversión respecto al centro
 - $\sigma \equiv S_1 \equiv$ reflexión.

Utilizaremos la notación de Schönflies, que es una notación utilizada para especificar estos grupos, que es además suficiente y comúnmente utilizada para la espectroscopía debido a que un único grupo puntual es completamente adecuado para describir la simetría de una molécula. Describamos a continuación algunos de los grupos puntuales más importantes:

| Definición 4.2 (Grupo diédrico). D_n : se obtiene del grupo cíclico de orden n , C_n , mediante la adición de un eje C_2 que es ortogonal al eje de simetría C_n principal.

| Definición 4.3 (Grupos platónicos). T, O, Y : son los grupos de simetría rotacional del tetraedro, octaedro e icosaedro respectivamente y son grupos finitos de orden 12, 24 y 60. Son grupos de alta simetría.

Los grupos diédricos pueden extenderse mediante la adición de una simetría de reflexión de dos maneras: incluyendo una reflexión en el plano perpendicular al eje C_n principal, que produce el grupo D_{nh} (si el plano de reflexión es vertical se denota por un subíndice v) o, alternativamente, puede imponerse una simetría de reflexión en un plano que contiene el eje principal de simetría y biseca los ejes C_2 , lo que da como resultado el grupo D_{nd} . De la misma manera que para los grupos diédricos, los grupos platónicos, también pueden extenderse mediante simetrías de reflexión, denotadas nuevamente por los subíndices h (o v) y d . Tomando $n \rightarrow \infty$ se producen grupos con rotaciones axiales continuas, denotados D_∞ .

³Recordamos que $O(3)$ es el grupo de matrices ortogonales, es decir, el grupo de todas las isometrías que dejan el origen fijo. Podemos describir $O(3)$ como el producto directo de $SO(3)$ y el grupo generado por la inversión, (representado por su matriz $-\mathbb{1}$), i.e: $O(3) = SO(3) \times \{\mathbb{1}, -\mathbb{1}\}$, donde $SO(3)$ consiste en el grupo de isometrías que preservan la orientación.

4.1 Grupos de simetría para el problema de Thomson

Una vez descrita la notación que vamos a utilizar, intentemos ver cuáles son los grupos de simetría de nuestros casos particulares. En el caso de tener **dos electrones sobre la esfera**, habíamos obtenido que las coordenadas $e_1 = (0, 0, 1)$ y $e_2 = (0, 0, -1)$ hacían mínima la energía. Pero es claro que cualquier conjunto de puntos antipodales, también hará mínima la energía. Para ello veamos el grupo de simetría en particular.

Si nos fijamos en la *Figura 8 (a)*, podemos observar que el grupo de simetría en este caso ha de ser necesariamente $D_{\infty h}$. Esto se debe a que se trata de un grupo diédrico con ejes de rotaciones axiales continuos, tal y como se pretende mostrar en dicha imagen. Además las posiciones son invariantes tras una reflexión respecto del plano horizontal y es claro también que una inversión respecto del centro tampoco cambiará la disposición de los electrones (ya que son idénticos), por lo que los elementos del grupo serán: $\{1, 2C_{\infty}, 2S_{\infty}, \infty C_2, \infty \sigma_h, i\}$, que en efecto corresponde con el grupo puntual $D_{\infty h}$.

En el caso de **tres electrones sobre la superficie de la esfera**, los electrones se encuentran dispuestos en los vértices de un triángulo equilátero de radio $\sqrt{3}$, es decir, un triángulo equilátero inscrito en una circunferencia de radio máximo dentro de la esfera, o equivalentemente, en una circunferencia que pase por el centro de la esfera. Para encontrar el grupo de simetría en este caso, la clave está en darse cuenta de que tiene una simetría central de $\frac{2\pi}{3}$, por lo tanto estará formado por C_3 y $(C_3)^2$. De manera análoga, vemos que no solo a través de una rotación C_3 la disposición es simétrica, sino que también si tras hacer la rotación hacemos una reflexión, volvemos a obtener la misma disposición, por lo que S_3 y $(S_3)^5$ también serán elementos del grupo. Por último, una reflexión con respecto al plano horizontal también es invariante, y hay también tres reflexiones verticales que forman parte del grupo, aquellas que pasan por el centro y por cada uno de los vértices. De esta manera, concluimos que los elementos de nuestro grupo serán $\{1, C_3, (C_3)^2, S_3, (S_3)^5, \sigma_h, 3\sigma_v\}$ que corresponden a los elementos del grupo puntual: D_{3h} . En la *Figura 8 (b)* se han marcado los ejes principales de las rotaciones y el plano de reflexión horizontal.

Encontrar el grupo simétrico para el caso en el que tenemos **cuatro electrones sobre la esfera** es mucho más sencillo, debido a que las coordenadas de las partículas corresponden con las de un tetraedro regular inscrito en una circunferencia. Por tanto, casi por definición el grupo de simetría ha de ser T . Sin embargo, a pesar de que los ejes de rotaciones son los mismos que para un grupo T , observamos que también hay seis reflexiones en planos a través de dos ejes de rotación, C_2 (puesto que las partículas son idénticas), por lo que necesariamente el grupo en este caso será T_d .

Por último, en el caso de **cinco electrones sobre la superficie de la esfera**, la disposición de los electrones es en los vértices de una bipirámide triangular. En general, el grupo de simetría de las bipirámides n-gonales es D_{nh} , por lo que en este caso en particular será: D_{3h} . Además, se ven claramente las rotaciones tanto normales como impropias de

grado $\frac{2\pi}{3}$, que nos indican que los elementos $C_3, (C_3)^2, S_3, (S_3)^5$ pertenecen al grupo. Del mismo modo, como tenemos dos pirámides totalmente simétricas hacia cada lado, es claro que tanto la reflexión respecto al plano de las bases como los planos perpendiculares a este que unen el centro con cada uno de los electrones son invariantes. Concluimos que en efecto los elementos del grupo han de ser: $\{1, C_3, (C_3)^2, S_3, (S_3)^5, \sigma_h, 3\sigma_v\}$ y por tanto en efecto el grupo será D_{3h} .

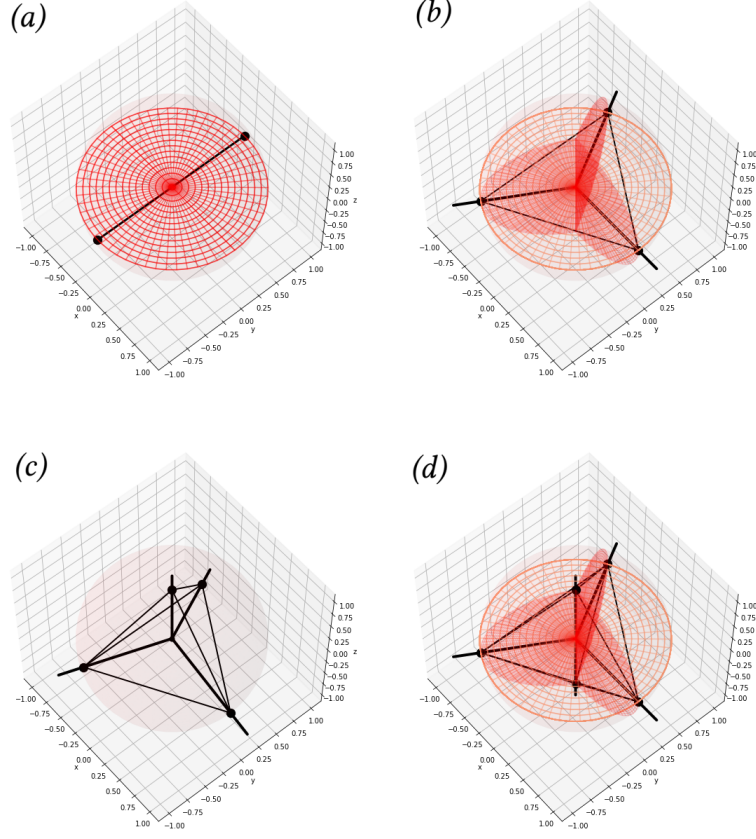


Figura 8: Disposiciones de los electrones para los casos $N = 2, 3, 4, 5$. Se pretenden marcar los ejes de simetría fundamentales y planos de reflexión.

Llegados a este punto, podemos generalizar nuestras soluciones particulares a todo un grupo de soluciones, que serán topológicamente equivalentes. Las representaciones de los grupos, dados en la *Figura 8*, son muy visuales precisamente para esto.

Para cada uno de los casos hemos encontrado una única disposición de puntos, dando sus coordenadas detalladas en la *Sección 3* y en esta última parte hemos visto los grupos de simetría asociados a cada una de estas agrupaciones. Todos ellos son grupos de simetría de la esfera, lo que quiere decir, que mientras dejemos fijos la disposición en la que los planos de simetría están colocados respecto al centro y entre ellos, podemos rotarlos libremente. Por ejemplo, para el caso de 4 electrones habíamos calculado una solución particular para los cuatro corpúsculos, dada por las coordenadas e_1^4, e_2^4, e_3^4 y e_4^4 . Esto nos daría por tanto un

único tetraedro, pero llegados a este punto nos damos cuenta que podemos generalizar la solución a cualquier tetraedro sobre la esfera, siempre y cuando los planos de simetría se roten en conjunto, obteniendo la rotación de cualquier tetraedro regular inscrito en la circunferencia. De manera análoga, obtenemos cualesquiera puntos antipodales en la esfera, cualquier triángulo equilátero en un plano que pase por el origen o bipirámide triangular inscrita en la esfera.

| Observación 4.1. *En todos los casos que hemos tratado hasta ahora, se cumple que*

$$|\sum \bar{r}_i| = 0$$

donde \bar{r}_i son las posiciones de las cargas. Esto implica que el momento dipolar de cada una de estas configuraciones será nulo.

| Observación 4.2. *En todos los polígonos tratados hasta ahora, el centroide o baricentro de la distribución de cargas coincide con el centro de la esfera (el origen de coordenadas). Para estos casos, parece bastante intuitivo, sin embargo esto no es cierto siempre.*

En geometría, el centroide o baricentro \mathbf{C} de un objeto X perteneciente a un espacio tridimensional es la intersección de todos los hiperplanos que dividen a X en dos partes de igual volumen con respecto al hiperplano. La definición matemática de centroide es:

$$\mathbf{C} = \frac{\bar{r}_1 + \bar{r}_2 + \dots + \bar{r}_n}{n} = \frac{1}{n} \sum \bar{r}_i$$

Por lo tanto, como en todos nuestros casos se tiene que $\sum \bar{r}_i = 0$, necesariamente el centroide es el centro. Pero esto no tiene porque ser siempre así. Por ejemplo, para los casos en los que $N = 11, 13, 19, 21 \dots$ esto no se cumple debido a que $\sum \bar{r}_i \neq 0$. Esto está íntimamente relacionado con que la simetría de estas partículas es el grupo C_{2v} . A continuación presentamos una tabla resumen para las primeras 21 configuraciones: (ver referencia [1] y [7]).

N	E_C	\mathbf{p}	G	N	E_C	\mathbf{p}	G	N	E_C	\mathbf{p}	G
2	0.50	0	$D_{\infty h}$	9	25.76	0	D_{3h}	16	92.91	0	T
3	1.73	0	D_{3h}	10	32.72	0	D_{4d}	17	106.05	0	D_{5h}
4	3.67	0	T_d	11	40.60	0.01322	C_{2v}	18	120.08	0	D_{4d}
5	6.47	0	D_{3h}	12	49.17	0	I_h	19	135.09	0.00014	C_{2v}
6	9.99	0	O_h	13	58.85	0.00882	C_{2v}	20	150.88	0	D_{3h}
7	14.45	0	D_{5h}	14	69.31	0	D_{6d}	21	167.64	0.00141	C_{2v}
8	19.68	0	D_{4d}	15	80.67	0	D_3	22	185.29	0	T_d

Cuadro 1: Cuadra resumen para configuraciones con N electrones: Energía de Coulomb [E_c], Momento dipolar [\mathbf{p}] y grupo de simetría [G]

5 | Caso general

Hasta ahora, hemos considerado el problema a través de la minimización del potencial de Coulomb para N pequeños, en esta sección nos centraremos en el caso asintótico ($N \rightarrow \infty$). Como la complicación de cálculo al intentar distribuir uniformemente muchos puntos en la esfera es bastante, esto ha provocado que su estudio tenga importantes aplicaciones en el campo de la computación. Los diversos puntos de vista al abordar este problema conducen claramente a diferentes condiciones extremas impuestas a la distribución de N puntos. Sin embargo el patrón general para configuraciones en equilibrio es el mismo: los puntos (para N grande) parecen organizarse de acuerdo con un patrón hexagonal ligeramente perturbado para encajar en la esfera. Para ser un poco más precisos con este enunciado, introduzcamos un poco de notación.

| Definición 5.1 (Célula de Dirichlet). Sea X un espacio métrico con función distancia d . Sea K un conjunto de índices y sea $(P_k)_{k \in K}$ un conjunto ordenado de subconjuntos no vacíos (llamados semillas o generadores) en el espacio X . Definimos entonces la célula de Dirichlet D_k , asociada a los generadores P_k como: $D_k = \{x \in X \mid d(x, P_k) \leq d(x, P_j), \forall j \neq k\}$

El **diagrama de Voronoi** es simplemente la tupla de células $(D_k)_{k \in K}$. En el caso más simple, estos objetos son un conjunto finito de puntos en el plano tal que para cada semilla hay una región correspondiente que consiste en todos los puntos del plano más cercanos a esa semilla que a cualquier otra.

Sea entonces la esfera unidad en el espacio Euclideo dada por $S^2 = \{\bar{r} \in \mathbb{R}^3 : |\bar{r}| = 1\}$, con medida de Lebesgue (área) asociada $\sigma(S^2) = 4\pi$ y denotemos ω_N a un subconjunto genérico de S^2 con N elementos. Cada configuración $\omega_N = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ tendrá asociada una célula de Dirichlet D_1, \dots, D_N :

$$D_j = \{x \in S^2 : |x - x_j| = \min_{1 \leq k \leq N} |x - x_k|\}, \quad j = 1, \dots, N \quad (23)$$

Que serán subconjuntos cerrados de S^2 que satisfacen $\bigcup_{j=1}^N D_j = S^2$ y $D_j \cap D_k = \emptyset$ si $j \neq k$.

| Proposición 5.1. Para un conjunto grande de puntos, se observa experimentalmente (numéricamente) que todas las células de Dirichlet para una configuración óptima son hexagonales, salvo exactamente 12, que son pentágonos (ver referencia [4]).

| Observación 5.1. Es claro que no podemos enlosar la esfera usando solo hexágonos. Esta es una consecuencia de la fórmula para la característica de Euler, que sabemos que para la esfera $\chi = 2$ y tenemos: $C - A + V = 2$, donde C es el número de caras, A es el número de aristas y V es el número de vértices. Se necesita una modificación del patrón hexagonal, como la adición de algunas caras pentagonales para que la fórmula de Euler se cumpla correctamente.

Si denotamos por H el número de hexágonos y por P el de pentágonos, podemos calcular el número de vértices, aristas y caras. Tenemos entonces:

$$F = \frac{5P + 6H}{3}, \quad A = \frac{5P + 6H}{2}, \quad C = P + H \Rightarrow 2 = C - A + V = \frac{P}{6} \Leftrightarrow P = 12$$

Concluimos entonces que cualquier mosaico de la esfera que consista exclusivamente en hexágonos y pentágonos debe tener exactamente 12 pentágonos (suponiendo que emanan exactamente 3 bordes de cada vértice).

Otra manera de aproximarnos al problema tratado, es maximizar la mínima distancia entre N puntos en la esfera, es decir: $d_N = \max_{x_1, \dots, x_N \in S^2} \left(\min_{1 \leq j < k \leq N} |x_j - x_k| \right)$.

Para una red hexagonal plana normalizada de modo que la distancia mínima entre puntos sea 1, $\{m + ne^{i\pi/3}\}$, las células de Dirichlet de cada punto de la red son un hexágono con área $\sqrt{3}/2$. Consideremos ahora una disposición en equilibrio de N puntos sobre la esfera y sea un punto tal que es el centro de una celda de Dirichlet cuya proyección en un plano tangente forma parte de una red hexagonal correctamente escalada (ha de estar escalada ya que necesitamos proyectar el mosaico hexagonal de la esfera en el plano). El factor de escala requerido δ_N se obtiene igualando las áreas totales (por sencillez, hemos ignoramos las 12 celdas pentagonales): $N \frac{\sqrt{3}}{2} \delta_N^2 = 4\pi \Rightarrow \delta_N = \left(\frac{8\pi}{\sqrt{3}} \right)^{1/2} N^{-1/2}$, donde δ_n será aproximadamente la distancia mínima entre puntos. Estos resultados asintóticos fueron obtenidos por primera vez por W. Habicht y B.L. van der Waerden (ver referencia [5]), que probaron que para cierta constante $C > 0$, la maximización de la mínima distancia entre N puntos de la esfera (d_N), vendrá dada por: $\delta_N - CN^{2/3} \leq d_N \leq \delta_N$. Esta técnica de proyección de hexágonos ha sido ampliamente utilizada en distintos estudios, como en fullereno. El primero en ser descubierto fue el C_{60} (consta de 12 pentágonos y 20 hexágonos) por Harold Kroto, Robert Curl y Richard Smalley en 1985, lo que les valió la concesión del Premio Nobel de Química en 1996.

6 | Conclusiones

Tras el estudio de algunas soluciones particulares del modelo de Thomson, vemos como la complicación computacional para incluso N 's muy bajos es bastante considerable. Además, los grupos de simetría nos ayudan a generalizar estas soluciones a un conjunto más grande, que recoge todas las configuraciones posibles para cierto número de electrones. Por último, hemos tratado el caso general en el que vemos que la configuración óptima para N 's grandes es la de los fullerenos, formando poliedros de caras hexagonales y pentagonales.

Referencias

- [1] MICHAEL ATIYAH y PAUL SUTCLIFFE. *Polyhedra in physics chemistry and geometry*. arXiv:math-ph/0303071v1. Marzo 2003.
- [2] J.J. THOMSON. *On the Structure of the Atom: an Investigation of the Stability and Periods of Oscillation of a number of Corpuscles arranged at equal intervals around the Circumference of a Circle; with Application of the Results to the Theory of Atomic Structure* Philosophical Magazine Series 6, Volume 7, Number 39, pág. 237-265. Marzo 1904.
- [3] M. BOWICK, A. CACCIUTO, D. R. NELSON y A. TRAVESSET. *Crystalline Order on a Sphere and the Generalized Thomson Problem*. Physical Review Letters, Volume 89, Number 18. Octubre 2002.
- [4] E.B. SAFF y A. B.J. KUIJLAARS. *Distributing Many Points on a Sphere*. Math. Intelligencer 19, 5. 1997.
- [5] W. HABICHT y B.L. VAN DER WAERDEN. *Lagerung von Punkten auf der Kugel*, Math. Ann. 123, pág. 223-234. 1951.
- [6] MARK J. BOWICK, Angelo Cacciuto, David R. Nelson y ALEX TRAVESSET. *Crystalline Particle Packings on a Sphere with Long Range Power Law Potentials*. arXiv:cond-mat/0509777v1 [cond-mat.soft]. Septiembre 2005.
- [7] T. ERBER y G. M. HOCKNEY. *Equilibrium configurations of N equal charges on a sphere*. Journal of Physics. A: Math. Gen. 24, pág. L1369-L1377. 1991.
- [8] L. GLASSER y A. G. EVERY. *Energies and spacings of point charges on a sphere*. Journal of Physics. A: Math. Gen. 25, pág. 2473-2482. 1992.
- [9] G.L. FISHER y B. MELLOR. *Three-dimensional finite point groups and the symmetry of beaded beads*. Journal of Mathematics and the Arts, 1 (2): pág. 85–96, 2007.