



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

USO DE LAS COORDENADAS COLECTIVAS DE  
ZICKENDRAHT Y DZUBLIK ET. AL.  
EN PROBLEMAS DE ESTRUCTURA DE SISTEMAS  
DE DOS CUERPOS Y DE TEORIA CINETICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA)

P R E S E N T A:

FIS. JUAN HORACIO PACHECO SANCHEZ

MEXICO, D. F.

1987

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## INDICE

	PAG
INTRODUCCION.	1
CAPITULO 1	
DEFINICION DE LA BASE Y CONEXION ENTRE ELEMENTOS DE MATRIZ DE 1 Y 2 CUERPOS RESPECTO A ESTA BASE.	
a.- Definición de la base en coordenadas de Zickendraht-Dzublik (Z-D).	7
b.- Funciones Radiales.	11
c.- Conexión entre elementos de matriz de 1 y 2 cuerpos.	15
CAPITULO 2	
EL HAMILTONIANO DEL ATOMO DE He Y SUS ELEMENTOS DE MATRIZ RESPECTO A LA BASE HIPERESFERICA.	
a.- El Hamiltoniano del átomo de Helio.	20
b.- Cálculo de $R_{s's}$ .	22
c.- Cálculo de $V_1$ .	23
CAPITULO 3	
CONSIDERACION DEL PRINCIPIO DE PAULI EN EL PROBLEMA DEL HELIO.	
a.- Principio de Exclusión en coordenadas Z-D.	27
b.- Matriz Hamiltoniana para el átomo de Helio.	31
i) Energía Cinética.	31
ii) Energía Potencial electrón-núcleo.	32
iii) Energía Potencial interelectrónica.	33
c.- Principio Variacional en coordenadas Z-D.	36
d.- Cómputo de la energía del estado base del He.	37
i) Caso en que la base se restringe a estados con $s=s'=0$ .	37
ii) Caso en que la base se restringe a estados con $\lambda=\lambda'=\nu=\nu'=0$ .	39

iii) Caso general en el que la base no tiene restricción.	40
iv) Energía del estado base del $H^-$ .	43
e.- Análisis alternativo por medio de las ecs. difs. acopladas.	44

#### CAPITULO 4

CONCLUSIONES	48
--------------	----

#### APENDICE A

#### OPERADOR DE ENERGIA CINETICA EN COORDENADAS DE ZICKENDRAHT-DZUBLIK

a.- Definición de las coordenadas de Zickendraht-Dzublik et al $(x_i^S) \longleftrightarrow (\rho, \gamma, \alpha, \theta_1, \theta_2, \theta_3).$	54
---	----

b.- Expresión Clásica de la Energía Cinética T de dos partículas de masa = 1	54
--	----

$$T = \frac{1}{2} \sum x_i^S \dot{x}_i^S.$$

c.- Expresión Contravariante de la Energía Cinética	55
---	----

$$2T = \sum g^{\mu\nu} P_\mu P_\nu.$$

d.- Operador de Energía Cinética de Laplace Beltrami	57
--	----

$$2\hat{T} = -\frac{1}{\sqrt{g}} \sum \frac{\partial}{\partial q^\mu} \sqrt{g} g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial q^\nu}, \quad \text{con } g^{-1} = \det |g^{\mu\nu}|.$$

e.- Elemento de Volumen asociado al Tensor Métrico $g^{\mu\nu}$ .	59
---	----

f.- Soluciones de $\Delta^2 Y = \lambda(\lambda+4)Y$ para $L=0,1$ .	60
---	----

g.- Caso $L=0$ .	62
------------------	----

h.- Caso $L=1$	64
----------------	----

i) $\lambda$ impar,	64
---------------------	----

ii) $\lambda$ par.	67
--------------------	----

#### APENDICE B

CALCULO DE $R_{S'S}$ { Ec. (2.5a) }	69
-------------------------------------	----

REFERENCIAS.	72
--------------	----

## INTRODUCCION

Existe un conjunto de coordenadas curvilíneas introducido independientemente por Zickendraht y por Dzublik, Ovcharenko, Steshenko y Filippov<sup>36</sup>, aplicable en problemas relacionados con sistemas de  $n$  partículas, y que tiene la característica de que 6 de las coordenadas describen propiedades colectivas del sistema. Para el caso de  $n$  cuerpos en el espacio físico tridimensional, las fórmulas de transformación entre las coordenadas cartesianas de las partículas:

$$x_{is} ; \quad i = 1, 2, 3 ; \quad s = 1, 2, \dots, n,$$

y las nuevas coordenadas de Zickendraht-Dzublik et al. (Z-D) son

$$x_{is} = \sum_{k=1}^3 \rho_k D_{ki}^1(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \rho_{n-3+k, s}^1(\phi_t), \quad (1)$$

donde las  $D_{ki}^1$  y  $\rho_{n-3+k, s}^1$  son elementos de matrices ortogonales asociadas a rotaciones:  $D^1(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$  en espacio 3-dimensional y  $\rho^1(\phi_t)$  en espacio  $n$ -dimensional, respectivamente. Esta última matriz depende, en general, de  $\frac{1}{2}n(n-1)$  parámetros, pero en la ec. (1) solo intervienen los 3 últimos renglones de  $D^1(\phi_t)$  y en estos<sup>36</sup> solo aparecen  $3n-6$  parámetros. Las coordenadas de Z-D son  $\rho_1, \rho_2, \rho_3, \theta_1, \theta_2, \theta_3$  más  $3n-6$  ángulos  $\phi_t$ , y las 6 primeras de ellas son precisamente las que describen propiedades colectivas del sistema, como se deduce del significado físico que tienen esas 6 coordenadas y que se discute a continuación.

Nos interesa un sistema de  $n$  partículas de la misma masa:  $m$ , entonces definimos el tensor cuadrupolar de masa  $q_{ij}$  por la fórmula

$$q_{ij} = m \sum_{s=1}^n x_{is} x_{js} ; \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (2)$$

y vemos que esta relacionado con el tensor de inercia standard  $I_{ij}$  de la mecánica clásica<sup>5</sup> por

$$\begin{aligned} I_{ij} &= m \sum_{s=1}^n (x_s^i x_s^j) \delta_{ij} - q_{ij} \\ &= m(\rho_1^2 + \rho_2^2 + \rho_3^2) \delta_{ij} - q_{ij}, \end{aligned} \quad (3)$$

donde la 2a. línea se deduce de la 1a. usando (1). Introduciendo (1) en (2) y usando la propiedad de ortogonalidad de la matriz  $D^i(\phi_t)$  obtenemos

$$\begin{aligned} q_{ij} &= m \sum_k \sum_l \rho_k \rho_l D_{ki}^i(\theta_l) D_{lj}^i(\theta_l) \sum_{s=1}^n \mathcal{D}_{n-3+k,s}^i(\phi_t) \mathcal{D}_{n-3+l,s}^i(\phi_t) \\ &= \sum D_{ki}^i(\theta_l) (m\rho_k^2) D_{kj}^i(\theta_l). \end{aligned} \quad (4)$$

Usando notación global para las matrices, la ec. (4) se puede escribir como

$$q = \tilde{D}^i(\theta_l) \begin{bmatrix} m\rho_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & m\rho_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & m\rho_3^2 \end{bmatrix} D^i(\theta_l), \quad (5)$$

donde la tilde indica tansposición de una matriz.

De (5) deducimos el significado físico de las 6 coordenadas "colectivas" de Z-D, ya que esta fórmula nos indica que  $D^i(\theta_l)$  es la matriz ortogonal que por una transformación de semejanza lleva a la matriz cuadrupolar  $q$  a forma diagonal y, por (3), es igualmente la matriz que diagonaliza al tensor de inercia del sistema. Los 3 parámetros  $\theta_1, \theta_2, \theta_3$  especifican, por lo tanto, la orientación instantánea del marco de ejes principales del sistema respecto al marco del laboratorio y pueden elegirse, por ejemplo, como los 3 ángulos de Euler de la teoría del movi-

miento de los cuerpos rígidos<sup>5</sup>. Al mismo tiempo la ec. (5) nos proporciona el significado físico de las  $\rho'_i$ 's, ya que nos dice que  $m\rho_i^2$  son los valores principales del tensor cuadrupolar de masa, o según (3),  $\Pi_i \equiv m(\rho_1^2 + \rho_2^2 + \rho_3^2 - \rho_i^2)$ ,  $i=1,2,3$  son los valores instantáneos de los momentos de inercia principales del sistema.

El conjunto de coordenadas Z-D ha sido extensamente utilizado en el estudio de las propiedades colectivas de sistemas de nucleones, las cuales en ciertos casos límite, se pueden describir en términos de las 6 coordenadas "colectivas" de Z-D. Es natural preguntarse si no podrían encontrar aplicación también en el estudio de sistemas de electrones, y más específicamente en el dominio de la estructura atómica. Ante la ausencia de hechos experimentales que indiquen fenómenos de carácter colectivo en la nube electrónica de un átomo, el enfoque en este campo sería distinto al del caso de la dinámica nuclear en donde si existen evidencias de propiedades colectivas. En la investigación de la estructura atómica las coordenadas de Z-D se usarían como cualquier otro sistema de coordenadas, las 6 coordenadas "colectivas" no jugarían ningún papel especial respecto a las restantes, y la utilización de tal sistema de coordenadas estaría motivada únicamente por la esperanza de que determinados aspectos del problema sean más fáciles de analizar en el sistema Z-D que en otros sistemas de coordenadas.

Es claro que en este plan de investigación habría que empezar por analizar el caso mas simple que no sea trivial y tal es el objeto del presente trabajo. En esta tesis se aplica un sistema de coordenadas hipersféricas en 6 dimensiones, que consisten de un hiperradio  $\rho$  y 5 ángulos indicados globalmente con  $\Omega$ , al estudio de la energía del estado base de átomos con 2 electrones. El hamiltoniano atómico se considera

en la aproximación no-relativista, i. e. consta exclusivamente de la energía cinética de los electrones, localizados por los vectores  $x_1, x_2$ , y de las interacciones electrostáticas entre los 3 cuerpos del sistema. El núcleo se supone que tiene masa infinita, y por lo tanto, está fijo.

Las fórmulas de transformación de Z-D dadas en (1), se reducen en el caso  $n=2$  a

$$x_{iS} = \rho_2 D_{2i}(\theta_i) \rho_{1S}(\phi) + \rho_3 D_{3i}(\theta_i) \rho_{2S}(\phi). \quad (6)$$

Sin embargo, resulta más conveniente hacer una ligera modificación en esta fórmula y definir, en lugar de (6),

$$x_{iS} = \rho_1 D_{2i}(\theta_i) \rho_{1S}(\alpha) + \rho_2 D_{2i}(\theta_i) \rho_{2S}(\alpha). \quad (7)$$

De aquí pasamos a las coordenadas hipersféricas, mencionadas arriba, reemplazando  $\rho_1, \rho_2$  por el hiperradio  $\rho$  y un ángulo  $\gamma$  según las definiciones  $\rho_1 = \rho \cos \gamma, \rho_2 = \rho \sin \gamma$ . Así obtenemos

$$x_{Si} = \rho [\cos \gamma D_{1i}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \rho_{1S}(\alpha) + \sin \gamma D_{2i}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \rho_{2S}(\alpha)], \quad (8)$$

$$s=1,2; \quad i=1,2,3.$$

En estas fórmulas  $\rho_{\underline{D}}(\alpha)$  es una matriz de rotación en el plano, i. e.

$$\rho_{\underline{D}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix},$$

y  $\underline{D}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$  es una matriz de rotación en espacio euclideo tridimensional, la cual especifica por medio de los 3 ángulos de Euler  $\theta_1, \theta_2, \theta_3$  la orientación relativa de un marco intrínseco respecto al marco inercial del laboratorio. Las matrices  $\underline{D}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$  son familiares en conexión con el estudio del movimiento clásico de los cuerpos rígidos.

El cálculo de la energía del estado base de átomos con 2 electrones se efectúa en esta tesis por el método variacional, lo cual requiere la determinación de la matriz del hamiltoniano respecto a una base completa. La base adoptada en el presente trabajo es de la forma

$$R_s^H(\rho) Y_{\lambda\nu qLM}(\Omega), \quad (9)$$

donde  $R$  es una función hiperradial y  $Y$  es un armónico hiperesférico que depende de los 5 ángulos introducidos en (8), y que está clasificado por los buenos números cuánticos  $L, M$  del momento angular de un determinado estado físico del átomo. Las expresiones analíticas generales para las  $Y_{\lambda\nu qLM}(\Omega)$  son conocidas y fueron deducidas por un método basado en la teoría de grupos continuos. En esta tesis interesa únicamente el caso en que  $L=M=0$ . En el Capítulo 1 y en el apéndice A se presenta la deducción de los armónicos hiperesféricos  $Y_{\lambda\nu qLM}(\Omega)$  con  $L=0,1$  por un método que consiste en la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias. En el capítulo 1 se define también el sistema de funciones hiperradiales que serán utilizadas; dichas funciones son soluciones de una ecuación diferencial ordinaria del tipo de las consideradas en la teoría de Sturm-Liouville.

El hamiltoniano atómico que vamos a manejar contiene interacciones de 1 y 2 cuerpos. Sin embargo en el capítulo 1 se demuestra que cuando se usa la base (9), los elementos de matriz de una interacción  $V(|r_1-r_2|)$  son proporcionales a los elementos de matriz de la interacción  $V(\sqrt{2} r_1)$  respecto a los mismos estados. Gracias a esta propiedad no es necesario hacer un cálculo independiente de los elementos de matriz  $\langle n' | \frac{1}{|r_1-r_2|} | n \rangle$  de la energía potencial interelectrónica, ya que están relacionados con los elementos de matriz  $\langle n' | \frac{1}{r_1} | n \rangle$  de la energía

potencial electrón-núcleo.

En el capítulo 2 de la tesis se calculan los elementos de matriz de la energía cinética y del operador  $1/r_1$ , respecto a la base definida en el capítulo 1. Allí se comenta sobre las ventajas que tiene esta base en relación al cálculo de la matriz de la energía potencial. Una integral necesaria para la construcción de la matriz de la energía cinética se evalúa en el Apéndice B.

En el capítulo 3 se analizan las restricciones impuestas en la base por el principio de exclusión de Pauli, llegándose a la conclusión de que para satisfacerlo, y al mismo tiempo lograr una matriz hamiltoniana real, hay que utilizar los armónicos hipersféricos reales

$$Y_{\lambda\nu}^{sim}(\underline{\Omega}) = \text{const.} (e^{-i\nu\frac{1}{2}\pi} Y_{\lambda\nu}(\underline{\Omega}) + \text{complejo conjugado}), \quad (10)$$

Se llega así a la matriz hamiltoniana final dada en la ecuación (3.22), y a un determinante secular asociado, el cual es de un tipo generalizado ya que el eigenvalor  $E$  aparece en la diagonal principal con coeficiente distinto de  $(-1)$ , y también en 2 líneas paralelas arriba y abajo de la diagonal. La solución de la ecuación secular en diferentes grados de aproximación se presenta en la sección 3.d, tanto para el caso de He como para el  $H^-$ . Variantes del análisis previo que involucran ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas, en la variable  $\rho$ , en lugar de sistemas lineales algebraicos, se discuten al final del capítulo 3.

Finalmente en el Capítulo 4 se comentan los resultados obtenidos en la tesis, y se confrontan con cálculos realizados anteriormente por otros autores.

## CAPITULO 1

DEFINICION DE LA BASE Y CONEXION ENTRE  
ELEMENTOS DE MATRIZ DE UNO Y DOS  
CUERPOS RESPECTO A ESTA BASE

## a.- Definición de la Base en Coordenadas Z-D.

La base que discutiremos a continuación es una base adecuada para estudiar problemas de 2 cuerpos en mecánica cuántica. Tiene una estructura de coordenadas hipersféricas en 6 dimensiones

$$\psi(x_1, x_2) = R(\rho) Y(\gamma, \alpha, \theta_1, \theta_2, \theta_3), \quad (1.1)$$

donde  $\rho$  es el hiperradio seisdimensional, y los 5 ángulos  $\Omega = (\gamma, \alpha, \theta_1, \theta_2, \theta_3)$  definen puntos en la esfera unidad en 6 dimensiones. La conexión entre los dos sistemas de coordenadas en (1) esta dada por las fórmulas

$$x_{iS} = \rho \left\{ \cos \gamma D_{1i}(\theta_i) \phi_{1S}(\alpha) + \sin \gamma D_{2i}(\theta_i) \phi_{2S}(\alpha) \right\} \quad \begin{matrix} s=1,2 \\ i=1,2,3, \end{matrix} \quad (1.2)$$

*i* es índice de coordenada,      *s* es índice de partícula,

introducidas por Zickendraht-Dzublik et al<sup>36</sup>, las matrices  $D(\theta_i)$  y  $\phi D(\alpha)$  están interpretadas en la sección 1 del apéndice A.

Las  $Y(\Omega)$  son la extensión a 6 dimensiones de los bien conocidos armónicos esféricos  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  de 3 dimensiones y poseen propiedades análogas. Por ejemplo la propiedad

$$\tilde{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1) Y_{lm}, \quad (1.3)$$

se extiende a

$$\tilde{\Lambda}^2 Y(\Omega) = \lambda(\lambda+4) Y(\Omega), \quad (1.4)$$

ya que en general para el grupo ortogonal n-dimensional  $O(n)$  se tiene que  $\Lambda\psi = \lambda(\lambda+n-2)\psi$ .

Desde el punto de vista de Teoría de Grupos, el significado de  $\tilde{\Lambda}^2$  y  $\hat{\Lambda}^2$  que aparecen en las ecs. (1.3) y (1.4) es que son operadores de Casimir de grupos ortogonales en 3 y 6 dimensiones:  $O(3)$  y  $O(6)$  respectivamente<sup>12</sup>.

Para  $O(6)$  el operador invariante  $\Lambda^2$  en coordenadas cartesianas, está dado por

$$\tilde{\Lambda}^2 = \frac{1}{2} \sum_{is} \sum_{i's'} \Lambda_{is,i's'} \Lambda_{i's',is} \quad \begin{array}{l} i, i' = 1, 2, 3 \\ s, s' = 1, 2, \dots \end{array} \quad (1.5)$$

donde  $\Lambda_{is,i's'} \equiv -\Lambda_{i's',is}$  son los generadores de  $O(6)$  cuya realización\* explícita nos conduce a

$$\tilde{\Lambda}^2 = \frac{1}{2} \sum_{is,i's'} (x_{is} \frac{\partial}{\partial x_{i's'}} - x_{i's'} \frac{\partial}{\partial x_{is}}) (x_{i's'} \frac{\partial}{\partial x_{is}} - x_{is} \frac{\partial}{\partial x_{i's'}}),$$

de acuerdo con la definición

$$\Lambda_{sm}^{s'm'} = (-1)^{m+m'} \Lambda_{s',-m'}^{s,-m},$$

dada por Chacón et al<sup>6</sup>.

Recordemos, que el laplaciano de 6 dimensiones en coordenadas hipersféricas<sup>8</sup> se puede expresar como:

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho^5} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^5 \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \nabla_{ang}^2,$$

entonces, el operador  $\Lambda^2$  (de Casimir) en este caso es precisamente

$$\tilde{\Lambda}^2 = -\nabla_{ang}^2,$$

\*.- El término **realización** se usa para denotar una expresión analítica explícita de los generadores respectivos

y el laplaciano en coordenadas cartesianas es<sup>24</sup>

$$\nabla^2 = \nabla_1^2 + \nabla_2^2 = \sum_{s=1}^2 \nabla_s^2 \equiv \sum_{s=1}^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x_s^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_s^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_s^2} \right).$$

Se deduce en el apéndice A, que cuando las coordenadas cartesianas se transforman a las Z-D, el operador de Casimir  $\Lambda^2$  está dado por la ec. (A29).

Para definir completamente la base se agregan a la ec. (1.3) ó a la ec. (1.4), ecuaciones de eigenvalores en que los operadores, son operadores de Casimir de subgrupos de  $O(3)$  ó de  $O(6)$ . En el primer caso, basta agregar

$$L_3 Y_{lm}(\theta, \phi) = m Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (1.6)$$

para definir la base, donde  $L_3$  es el operador de Casimir de  $O(2)$  y  $O(3) \supset O(2)$ . Para el segundo caso el esquema de subgrupos es<sup>7</sup>

$$O(6) \supset \begin{matrix} \mathcal{O}(2) \\ \times \\ SU(3) \end{matrix} \supset O(3) \supset O(2), \quad (1.7)$$

donde  $\mathcal{O}(2)$  y  $O(2)$  tienen diferentes generadores de grupo, por lo cual se indican con letras diferentes, y las ecuaciones de eigenvalores para definir  $Y(\Omega)$  son

$$\hat{M} Y(\Omega) = \nu Y(\Omega), \quad (1.8a)$$

$$\hat{L}^2 Y(\Omega) = L(L+1) Y(\Omega), \quad (1.8b)$$

$$\hat{\tilde{L}}_3 Y(\Omega) = M Y(\Omega), \quad (1.8c)$$

donde  $\hat{M}$ ,  $\hat{L}^2$  y  $\hat{\tilde{L}}_3$  son operadores de Casimir de  $\mathcal{O}(2)$ ,  $O(3)$  y  $O(2)$  respectivamente. Los operadores de Casimir de  $SU(3)$  no aparecen por no ser independientes a los de  $O(6)$  y  $\mathcal{O}(2)$  [Dragt<sup>7</sup>], es decir,  $SU(3)$  y  $\mathcal{O}(2)$

son complementarios respecto a una representación de  $O(6)$ .

Explícitamente, el operador de Casimir de  $O(2)$  es

$$\begin{aligned}\hat{M} &= -i \sum_{i=1}^3 \Lambda_{i1, i2} \\ &= -i (x_1 \cdot \nabla_2 - x_2 \cdot \nabla_1),\end{aligned}\quad (1.9)$$

y en coordenadas Z-D este mismo operador es

$$\hat{M} = -i \frac{\partial}{\partial \alpha}. \quad (1.10)$$

Este operador es el generador de un grupo de rotaciones en el plano  $O(2)$ .

Eisenberg<sup>9</sup> demuestra que las funciones de representación de  $SO(3)$ :  $D_{MK}^{L*}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$  satisfacen las ecuaciones

$$\hat{L}^2 D_{MK}^{L*}(\theta_i) = L(L+1) D_{MK}^{L*}(\theta_i), \quad L_3 D_{MK}^{L*}(\theta_i) = M D_{MK}^{L*}(\theta_i). \quad (1.11)$$

De aquí se deduce (ver apéndice A) que las ecs. (1.8a,b,c), al tener en cuenta (1.10), quedan satisfechas por

$$Y_{\lambda\nu qLM}(\Omega) = e^{i\nu\alpha} \sum D_{MK}^{L*}(\theta_i) \Gamma_K^{\lambda\nu qL}(\gamma). \quad (1.12)$$

La forma analítica de las funciones  $\Gamma_K^{\lambda\nu qL}(\gamma)$  se obtiene sustituyendo (1.12) en (1.4) lo cual conduce a un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas para las  $\Gamma_K(\gamma)$ , como se vé en la ec. (A38).

Nótese que las 4 ecs. (1.4) y (1.8a,b,c) no definen unívocamente a las  $Y(\Omega)$  ya que se requieren 5 ecuaciones, y por lo tanto definen una base no-ortogonal:  $Y_{\lambda\nu qLM}(\Omega)$ , con  $q =$  índice de multiplicidad. Con respecto al elemento de volumen (A27) se tiene

$$\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{4\pi} \sin 4\gamma d\gamma \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^\pi \sin \theta_2 d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\theta_3 Y_{\lambda'\nu'q'L'M'}^* Y_{\lambda\nu qLM} = C_{qq'} \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\nu'\nu} \delta_{L'L} \delta_{M'M}$$

Dragt<sup>7</sup> es el primero que ha introducido la manera de clasificar según la cadena de grupos (1.7). Así que definamos las soluciones de las ecs. (1.4) y (1.8a,b,c) como base de Dragt.

Las formas analíticas de las  $Y(\Omega)$  para  $L=0,1$  son dadas por Dragt<sup>7</sup>, y para  $L$  arbitraria fueron obtenidas por un procedimiento basado en Teoría de Grupos<sup>6</sup>. Los casos  $L=0,1$  pueden rederivarse resolviendo las ecs. (1.4) y (1.8a,b,c) con una realización de los operadores de Casimir en términos de operadores diferenciales, esto se hace en el apéndice A. La forma explícita de  $Y(\Omega)$  para  $L=0$  está dada en la ec. (A48) y para  $L=1$  en las ecs. (A55), (A56) y (A63).

En particular, el caso  $L=0$  que se utilizará en los capítulos siguientes, tiene la forma

$$Y_{\lambda\nu\cdot 00}(\Omega) = \left(\frac{\lambda+2}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\nu\alpha} d_{\frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma), \quad (1.13)$$

donde  $\lambda\nu\cdot 00$  indica que solo existen 4 números cuánticos independientes,  $d_{m'm}^j(\theta)$  son las funciones de representación "reducidas" de  $SO(3)$ <sup>28</sup>,  $\lambda = 0, 2, 4, \dots$  y  $\nu = \lambda, \lambda-4, \dots, -\lambda$ .

## b.- Funciones Radiales

Como factores radiales en la función de onda nos gustaría seleccionar, en vista del problema físico que deseamos estudiar, un sistema de

funciones que sean finitas en la vecindad de  $\rho=0$  y tiendan rápidamente a cero cuando  $\rho \rightarrow \infty$ . Analizando el catálogo de funciones ortogonales estudiadas en la física matemática<sup>2</sup> encontramos que el sistema de funciones de Laguerre cumplen estas condiciones, y serán las que adoptaremos en este trabajo. Dichas funciones se definen por

$$y_s^{\mu\alpha}(x) = N_{\alpha\mu s} e^{-\frac{1}{2}x} x^{\mu} L_s^{\alpha}(x), \quad (1.14a)$$

donde  $x$  es una variable real adimensional cuyo dominio es  $0 \leq x < \infty$ ;  $\alpha, \mu$  son parámetros reales y  $s$  es un entero no-negativo que indica el grado del polinomio de Laguerre  $L_s^{\alpha}(x)$ . Las funciones (1.14a) satisfacen la ecuación diferencial

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{(\alpha+1-2\mu)}{x} \frac{dy}{dx} + \left\{ \frac{(s+\frac{\alpha+1}{2})}{x} - \frac{1}{4} + \frac{\mu(\mu-\alpha)}{x^2} \right\} y = 0. \quad (1.14b)$$

Esto se corrobora substituyendo (1.14a) en (1.14b) y usando la ecuación diferencial de los polinomios de Laguerre<sup>27</sup>:

$$x \frac{d^2 L_s^{\alpha}}{dx^2} + (\alpha+1-x) \frac{dL_s^{\alpha}}{dx} + s L_s^{\alpha} = 0.$$

El operador de Energía cinética que aparecerá más adelante en nuestro análisis, es proporcional a

$$\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{k}{\rho^2},$$

y el cálculo de sus elementos de matriz se simplifica mucho si elegimos el coeficiente de  $\frac{dy}{dx}$  en (1.14b) igual a  $\frac{5}{x}$ . Para lograr esto elegiremos  $\alpha \equiv 2\mu+4$  con lo cual las funciones radiales serán

$$y_s^{\mu}(x) = N_{\mu s} e^{-\frac{1}{2}x} x^{\mu} L_s^{2\mu+4}(x), \quad (1.15a)$$

y la ecuación diferencial que satisfacen, i.e. la ec. (1.14b) con  $\alpha=2\mu+4$ ,

$$\int_0^{\infty} R_s^{\mu}(\rho) R_{s'}^{\mu}(\rho) \rho^4 d\rho = \beta \delta_{ss'} \quad (1.17)$$

$$\left( \frac{1}{\rho^3} \frac{d}{d\rho} \rho^5 \frac{d}{d\rho} - \frac{\mu(\mu+4)}{\rho^2} - \frac{\beta^2}{4} + \frac{\beta(\mu+1/2+s)}{\rho} \right) R_s^{\mu}(\rho) = 0 \quad (1.18)$$

Es importante resaltar que la base (1.16):  $\{ R_s^{\mu}(\rho); s=0,1,2,\dots \}$  es un sistema completo ortonormal de funciones, según se deduce de la teoría general de Sturm-Liouville. Además  $\mu > -5/2$  es un parámetro real fijo al cual eventualmente se le puede dar el valor que resulte más conveniente.

La razón para normalizar las funciones radiales en la forma (1.17) es que, como se verá en el siguiente capítulo, el elemento de volumen en nuestro problema físico es de la forma  $dt = \rho^5 d\rho d\Omega$ , y eventualmente, en el análisis aparecerán integrales como

$$\int_0^{\infty} R_s^{\mu}(\rho) R_{s'}^{\mu}(\rho) \rho^5 d\rho \quad ; \quad \int_0^{\infty} R_s^{\mu}(\rho) \hat{Q} R_{s'}^{\mu}(\rho) d\rho \quad (1.19a,b)$$

donde  $\hat{Q}$  representa a un determinado operador físico. La integral en (1.17) tiene las mismas dimensiones físicas que  $\beta$ , i.e.  $[L^{-1}]$ , y  $\rho$  tiene dimensiones de longitud  $[L]$ , por lo cual se deduce que  $R_s^{\mu}(\rho)$  tiene dimensiones  $[L^{-3}]$ . En virtud de esto, la integral (1.19a) es un número puro, y la (1.19b) tiene las mismas dimensiones físicas que el operador  $\hat{Q}$ . De esta manera, al normalizar según (1.17) se logrará en el análisis subsecuente que los elementos de matriz tengan las mismas dimensiones físicas que el observable al cual se refieren, tal como ocurre en la mecánica cuántica tradicional.

c.- Conexión entre Elementos de Matriz de Interacciones de 1 y 2 Cuerpos

En el estudio de un sistema de dos partículas, el hamiltoniano es la suma de las energías cinética y potencial, conteniendo interacciones de uno y dos cuerpos. En el análisis teórico se presenta la necesidad de evaluar elementos de matriz del tipo

$$\langle s' \lambda' \nu' q' L' M' | V(|x_1 - x_2|) | s \lambda \nu q L M \rangle, \quad (1.20a)$$

$$\langle s' \lambda' \nu' q' L' M' | V(|x_1|) | s \lambda \nu q L M \rangle. \quad (1.20b)$$

Comúnmente para determinar (1.20a) se aplica la transformación de los vectores  $\underline{x}_1, \underline{x}_2$  a los del centro de masa ( $\underline{R}$ ) y relativo ( $\underline{r}$ ). En esta sección vamos a demostrar que, respecto a la base discutida en las secciones anteriores, (1.20a) y (1.20b) son esencialmente proporcionales entre sí.

La transformación mencionada básicamente está dada (para partículas de la misma masa) por

$$\begin{pmatrix} \underline{r} \\ \underline{R} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{x}_1 \\ \underline{x}_2 \end{pmatrix}. \quad (1.21a)$$

Las ecs. (1.21a) son conocidas como Transformaciones de Talmi<sup>33</sup>, y son un caso particular de las fórmulas de Jacobi<sup>16</sup> que expresan la transformación ortogonal de los vectores de posición de  $n$  partículas  $\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_n$  a  $n-1$  vectores relativos  $\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_{n-1}$  y un vector del centro de masa  $\underline{x}_n$ :

$$\underline{x}_s = \frac{1}{\sqrt{s(s+1)}} \left\{ \sum_{t=1}^s \underline{x}_t - s \underline{x}_{s+1} \right\}; \quad s = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$\hat{x}_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{t=1}^n x_t.$$

La transformación de Talmi corresponde al caso  $n=2$  de la de Jacobi. En términos de los momentos canónicos conjugados, esta dada por

$$\begin{pmatrix} \underline{p} \\ \underline{P} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{p}_1 \\ \underline{p}_2 \end{pmatrix}. \quad (1.21b)$$

Los 4 vectores  $\underline{x}_1$ ,  $\underline{x}_2$ ,  $\underline{r}$ ,  $\underline{R}$  y sus correspondientes momentos canónicos conjugados  $\underline{p}_1$ ,  $\underline{p}_2$ ,  $\underline{p}$ ,  $\underline{P}$  considerados ya como operadores según el formalismo de la mecánica cuántica, pueden combinarse para construir los siguientes operadores de creación<sup>35</sup>:

$$\begin{aligned} \underline{\eta}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x}_1 - i\hat{p}_1), & \underline{\eta}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x}_2 - i\hat{p}_2), \\ \underline{\eta}_r &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{r} - i\hat{p}), & \underline{\eta}_R &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{R} - i\hat{P}), \end{aligned} \quad (1.22)$$

usando (1.21a,b) y (1.22) obtenemos

$$\begin{pmatrix} \underline{\eta}_r \\ \underline{\eta}_R \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\eta}_1 \\ \underline{\eta}_2 \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

Sean las siguientes dos combinaciones de  $\underline{\eta}_1$  y  $\underline{\eta}_2$

$$\underline{\alpha} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (-i\underline{\eta}_1 + \underline{\eta}_2), \quad \underline{\beta} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (i\underline{\eta}_1 + \underline{\eta}_2), \quad (1.24)$$

dadas por Chacón et al<sup>6</sup>, y análogamente definimos las siguientes dos de  $\underline{\eta}_r$  y  $\underline{\eta}_R$ :

$$\underline{\alpha}' \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (-i\underline{\eta}_r + \underline{\eta}_R) \quad \underline{\beta}' \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (i\underline{\eta}_r + \underline{\eta}_R). \quad (1.25)$$

Sustituyendo (1.23) en (1.25) y usando la fórmula de Euler, es decir:

$$\cos \frac{1}{2}\pi \pm i \operatorname{sen} \frac{1}{2}\pi = \frac{1}{\sqrt{2}} \pm \frac{i}{\sqrt{2}} = e^{\pm i \frac{1}{2}\pi},$$

tenemos que

$$\underline{\alpha}' = e^{i \frac{1}{2}\pi} \underline{\alpha}, \quad \underline{\beta}' = e^{-i \frac{1}{2}\pi} \underline{\beta}, \quad (1.26)$$

y sus inversas

$$\underline{\alpha} = e^{-i \frac{1}{2}\pi} \underline{\alpha}', \quad \underline{\beta} = e^{i \frac{1}{2}\pi} \underline{\beta}'. \quad (1.27)$$

Estas ecuaciones describen un cambio casi-invariante de los operadores  $\underline{\alpha}$ ,  $\underline{\beta}$  bajo la transformación de Talmi, es decir, bajo esta transformación los operadores  $\underline{\alpha}$ ,  $\underline{\beta}$  quedan simplemente multiplicados por un número complejo de módulo 1, i.e. por un factor de fase.

Una función del tipo<sup>6</sup>  $P_{n_1 n_2}(\underline{\alpha}, \underline{\beta})|0\rangle$  con  $P$  = polinomio homogéneo de grado  $n_1$  en  $\underline{\alpha}$  y grado  $n_2$  en  $\underline{\beta}$ , bajo la transformación de Talmi queda como

$$P_{n_1 n_2}(\underline{\alpha}, \underline{\beta})|0\rangle = e^{-i(n_1 - n_2)\frac{1}{2}\pi} P_{n_1 n_2}(\underline{\alpha}', \underline{\beta}')|0\rangle. \quad (1.28)$$

La base de  $O(6)$  definida por

$$|\lambda \nu q LM\rangle = \sum_{\sigma \tau} C_{\sigma \tau}^{\lambda \nu q L} \left[ Y_{L-(\lambda-\nu)/2+2q+\sigma-\tau}(\underline{\alpha}) \times Y_{(\lambda-\nu)/2-2q+\tau-\sigma}(\underline{\beta}) \right]_M^L \\ \times (\underline{\alpha}' \cdot \underline{\alpha}')^{(\lambda-L-\epsilon)/2-\alpha-q} (\underline{\beta} \cdot \underline{\beta})^{q-\tau} (\underline{\alpha} \cdot \underline{\beta})^{\sigma+\tau} |0\rangle, \quad (1.29a)$$

donde  $Y_{lm}$  es un armónico sólido de Condon-Shortley<sup>21</sup> y  $[f_{1_1} \times g_{1_2}]_M^L$  significa acoplamiento vectorial con coeficientes de Clebsch-Gordan<sup>28</sup> de  $SO(3)$ ,

es de esta forma, ya que es una combinación lineal de términos del tipo

$$Y_{l_1 m_1}(\alpha) Y_{l_2 m_2}(\beta) (\alpha \cdot \alpha)^{c_1} (\beta \cdot \beta)^{c_2} (\alpha \cdot \beta)^{c_3} |0\rangle,$$

y en todos los términos

$$l_1 + 2c_1 + c_3 \equiv n_1 = \frac{1}{2}(\lambda + \nu), \quad l_2 + 2c_2 + c_3 \equiv n_2 = \frac{1}{2}(\lambda - \nu), \quad (1.29b)$$

obtenidos al sumar potencias en (1.29a). De (1.29b) tenemos que

$$\nu = n_1 - n_2. \quad (1.30)$$

Empleando un Teorema de Dragt<sup>7</sup> que en términos generales dice que:

Si  $P_\lambda(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n) |0\rangle$  es parte de una base para la RI  $(\lambda 0)$  de  $O(n)$  y  $P_\lambda$  es de grado  $\lambda$  en los operadores de creación  $\eta_i$ ,

$$\implies P_\lambda(x_1, x_2, \dots, x_n) = \rho^\lambda Y_\lambda(\Omega)$$

es un armónico sólido en  $n$  dimensiones,

se deduce que una relación análoga a (1.28) es válida para los armónicos hipersféricos discutidos en la sección (1.b) Por lo tanto, bajo la transformación de Talmi obtenemos la siguiente relación:

$$Y_{\lambda\nu qLM}\left(\frac{x_1}{\rho}, \frac{x_2}{\rho}\right) = e^{-i\nu\frac{1}{2}\pi} Y_{\lambda\nu qLM}\left(\frac{r}{\rho}, \frac{R}{\rho}\right), \quad (1.31)$$

donde

$$\rho^2 = x_1^2 + x_2^2 = r^2 + R^2$$

es decir,  $\rho^2$  es invariante bajo la transformación de Talmi. La ecuación (1.31) es equivalente a

$$|\lambda\nu qLM\rangle_{x_1, x_2} = e^{-i\nu\frac{1}{2}\pi} |\lambda\nu qLM\rangle_{r, R} \quad (1.32)$$

Finalmente, usando (1.31) y (1.21a) podemos deducir la conexión entre los elementos de matriz (1.20a) y (1.20b) en notación de producto escalar

$$\begin{aligned}
& \left( R_{s'}^{\mu}(\rho) Y_{\lambda' \nu' q' LM} \left( \frac{x_1}{\rho}, \frac{x_2}{\rho} \right), V(|x_1 - x_2|) R_s^{\mu}(\rho) Y_{\lambda \nu q LM} \left( \frac{x_1}{\rho}, \frac{x_2}{\rho} \right) \right) \\
&= e^{i(\nu' - \nu) \frac{1}{2} \pi} \left( R_{s'}^{\mu}(\rho) Y_{\lambda' \nu' q' LM} \left( \frac{r}{\rho}, \frac{R}{\rho} \right), V(\sqrt{2}|r|) R_s^{\mu}(\rho) Y_{\lambda \nu q LM} \left( \frac{r}{\rho}, \frac{R}{\rho} \right) \right) \\
&= e^{i(\nu' - \nu) \frac{1}{2} \pi} \left( R_{s'}^{\mu}(\rho) Y_{\lambda' \nu' q' LM} \left( \frac{x_1}{\rho}, \frac{x_2}{\rho} \right), V(\sqrt{2}|x_1|) R_s^{\mu}(\rho) Y_{\lambda \nu q LM} \left( \frac{x_1}{\rho}, \frac{x_2}{\rho} \right) \right), \quad (1.33)
\end{aligned}$$

donde el paso de la segunda a la última línea es simplemente por un cambio de nombre de las variables de integración.

En la notación de bra-kets el resultado anterior se expresa

$$\begin{aligned}
\langle s' \lambda' \nu' q' LM | V(|x_1 - x_2|) | s \lambda \nu q LM \rangle = \\
e^{i(\nu' - \nu) \frac{1}{2} \pi} \langle s' \lambda' \nu' q' LM | V(\sqrt{2}|x_1|) | s \lambda \nu q LM \rangle \quad (1.34)
\end{aligned}$$

es decir, respecto a la base discutida en este capítulo, los elementos de matriz de una interacción central entre 2 cuerpos son proporcionales a los correspondientes elementos de matriz de la misma interacción central con intensidad aumentada por un factor  $\sqrt{2}$  y actuando sobre un solo cuerpo.

## CAPITULO 2

## EL HAMILTONIANO DEL ATOMO DE He Y SUS ELEMENTOS DE MATRIZ RESPECTO A LA BASE HIPERESFERICA

## a.- El Hamiltoniano del Atomo de Helio

Suponiendo el núcleo fijo, el hamiltoniano de un átomo de 2 electrones y carga nuclear  $Z$  es<sup>8</sup>

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - Ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_{12}}.$$

En el sistema de unidades atómicas  $\hbar=1$ ,  $|e|=1$ ,  $m=1$  y la unidad de energía es  $2E_H = 27.2$  eV, por lo tanto tenemos:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2}\nabla_{(6)}^2 - Z\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{r_{12}} \\ &= -\frac{1}{2}\frac{1}{\rho^3}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{2\rho^2}\Lambda^2 - Z\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{r_{12}}.\end{aligned}\quad (2.1)$$

Se va a efectuar un cálculo variacional de la energía del estado base, el cual tiene  $L=0$ .

En este capítulo solo se considera la parte espacial y en el siguiente se introducirá el factor asociado con el spin, y se examinarán las restricciones impuestas a la función de onda por el principio de Pauli. Por tanto, las funciones espaciales de la base van a tener la forma:

$$\begin{aligned}\psi_{L=0}(x_1, x_2) &= R_s^\mu(\rho) Y_{\lambda\nu 0}(\Omega) \\ &= \left(\frac{\beta^{2\mu+6} s! (\lambda+2)}{(2\mu+4+s)! 16\pi^3}\right)^{\frac{1}{2}} \rho^\mu e^{-\frac{1}{2}\beta\rho} L_s^{2\mu+4}(\beta\rho) e^{i\nu\alpha} d_{\frac{1}{2}\nu\frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma),\end{aligned}\quad (2.2)$$

como se puede comprobar con las ecs. (1.13) y (1.16).

Este sistema de funciones tiene la propiedad de ortonormalidad

$$\int_0^{\infty} R_{s'}^{\mu}(\rho) R_s^{\mu}(\rho) \rho^4 d\rho \int Y_{\lambda'\nu'}^*(\Omega) Y_{\lambda\nu}(\Omega) d\Omega = \beta \delta_{ss'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\nu\nu'}. \quad (2.3)$$

La realización (2.1) de la Energía Cinética implica un tensor métrico y un elemento de volumen  $dt = \rho^5 d\rho d\Omega$  que es el que debemos usar, mientras que en la ec. (2.3) el elemento de volumen es  $dt = \rho^4 d\rho d\Omega$ . Aún teniendo estos dos distintos elementos de volumen en  $\rho$  el método variacional se puede aplicar; el análisis de Pauling<sup>24</sup>, secs. 26-27, muestra que en estos casos el eigenvalor  $E$  aparece no solo en la diagonal del determinante secular, sino también en elementos fuera de la diagonal, es decir, aparece una ecuación secular generalizada. Por lo tanto, los elementos de matriz de  $\hat{H}$  respecto a las funciones espaciales son:

$$\begin{aligned} \langle s'\lambda'\nu' | \hat{H} | s\lambda\nu \rangle = & \int_0^{\infty} d\rho \rho^5 R_{s'}^{\mu}(\rho) \left[ -\frac{1}{2\rho^3} \frac{d}{d\rho} \rho^5 \frac{d}{d\rho} + \frac{\lambda(\lambda+4)}{2\rho^2} \right] R_s^{\mu}(\rho) \int Y_{\lambda'\nu'}^* \\ & * Y_{\lambda\nu} d\Omega + \int_0^{\infty} d\rho \rho^4 R_{s'}^{\mu}(\rho) R_s^{\mu}(\rho) \int Y_{\lambda'\nu'}^*(\Omega) \left[ -Z \left( \frac{\rho}{r_1} + \frac{\rho}{r_2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\rho}{r_{12}} \right] Y_{\lambda\nu}(\Omega) d\Omega. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Usando la propiedad (1.18), tenemos que

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} d\rho \rho^5 R_{s'}^{\mu}(\rho) \left[ -\frac{1}{2\rho^3} \frac{d}{d\rho} \rho^5 \frac{d}{d\rho} + \frac{\lambda(\lambda+4)}{2\rho^2} \right] R_s^{\mu}(\rho) = & \frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\rho \rho^5 R_{s'}^{\mu}(\rho) \\ & * \left\{ \frac{1}{\rho^2} \left[ \lambda(\lambda+4) - \mu(\mu+4) \right] + \frac{\beta(\mu+s+\frac{1}{2}5)}{\rho} - \frac{\beta^2}{4} \right\} R_s^{\mu}(\rho) \equiv R_{s's}, \end{aligned} \quad (2.5a)$$

además

$$\int Y_{\lambda'\nu'}^* Y_{\lambda\nu} d\Omega = \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\nu'\nu}, \quad \int_0^{\infty} d\rho \rho^4 R_{s'}^{\mu}(\rho) R_s^{\mu}(\rho) = \beta \delta_{ss'}, \quad (2.5b)$$

y vamos a introducir las notaciones

$$\Psi_l(\lambda'\nu', \lambda\nu) = \oint Y_{\lambda'\nu'0}^*(\Omega) \left(\frac{\rho}{r_l}\right) Y_{\lambda\nu 0}(\Omega) d\Omega; \quad l = 1, 2, \quad (2.6a)$$

$$\Psi_{12}(\lambda'\nu', \lambda\nu) = \oint Y_{\lambda'\nu'0}(\Omega) \left(\frac{\rho}{r_{12}}\right) Y_{\lambda\nu 0}(\Omega) d\Omega. \quad (2.6b)$$

Con esto la ec. (2.4) nos queda

$$\langle s'\lambda'\nu' | \hat{H} | s\lambda\nu \rangle = \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\nu'\nu} R_{s's} + \beta \delta_{s's} (-Z\Psi_1(\lambda'\nu', \lambda\nu) - Z\Psi_2(\lambda'\nu', \lambda\nu) + \Psi_{12}(\lambda'\nu', \lambda\nu)). \quad (2.6c)$$

Es importante notar la presencia de la delta de Kronecker  $\delta_{s's}$  en la parte de (2.6c) asociada a la energía potencial, cuya aparición se debe a la propiedad de ortogonalidad (2.5b) para las funciones radiales que hemos elegido. Esta selección ocasiona una gran simplificación en la matriz de la energía potencial, la cual resulta ser diagonal en  $s$  e independiente de  $s$ .

### b.- Cálculo de $R_{s's}$ .

Usando (2.5b), la relación de recurrencia

$$xL_s^\alpha(x) = -(s+1)L_{s+1}^\alpha(x) + (2s+\alpha+1)L_s^\alpha(x) - (s+\alpha)L_{s-1}^\alpha(x), \quad (2.7)$$

y la integral

$$\int_0^\infty x^{2\mu+3} e^{-x} L_s^{2\mu+4}(x) L_s^{2\mu+4}(x) dx = \frac{(2\mu+4+s_{<})!}{s_{<}!(2\mu+4)},$$

donde  $s_{<} = \min\{s, s'\}$ ,  $s_{>} = \max\{s, s'\}$ , se puede evaluar la integral (2.5a), (ver Apéndice B). Se obtiene:

$$R_{s's} = \frac{\theta^2}{8} \left\{ \sqrt{(s+1)(2\mu+s+5)} \delta_{s',s+1} + (2s+2\mu+5) \delta_{ss'} + \sqrt{s(2\mu+s+4)} \delta_{s',s-1} \right. \\ \left. + \frac{4[\lambda(\lambda+4) - \mu(\mu+4)]}{(2\mu+4)} \left( \frac{(2\mu+4+s_{<})! s_{>}!}{(2\mu+4+s_{>})! s_{<}!} \right)^{\frac{1}{2}} \right\}. \quad (2.8)$$

c.- Cálculo de  $\Psi_1$ .

Para evaluar la integral en (2.6a), se empieza por introducir una variable angular  $\theta$  relacionada con  $r_1 = \sqrt{(x_1' \cdot x_1')}$ ,  $r_2 = \sqrt{(x_2' \cdot x_2')}$  y  $\rho$  por medio de las fórmulas

$$r_1 = \rho \cos \frac{1}{2} \theta, \quad r_2 = \rho \operatorname{sen} \frac{1}{2} \theta, \quad (2.9)$$

en donde  $0 \leq \theta \leq \pi$ . La conexión de  $\theta$  con los ángulos  $\alpha$ ,  $\gamma$  del sistema Z-D se deduce usando (A1), y nos dá

$$r_1^2 = \frac{1}{2} \rho^2 + \frac{1}{2} \rho^2 \cos 2\gamma \cos 2\alpha, \quad r_2^2 = \frac{1}{2} \rho^2 - \frac{1}{2} \rho^2 \cos 2\gamma \cos 2\alpha, \quad (2.10)$$

entonces

$$\cos \theta = \cos^2 \frac{1}{2} \theta - \operatorname{sen}^2 \frac{1}{2} \theta = \frac{r_1^2 - r_2^2}{\rho^2} \\ = \cos 2\alpha \cos 2\gamma = \frac{1}{2} \cos 2\gamma (e^{i2\alpha} + e^{-i2\alpha}). \quad (2.11)$$

Por otra parte, existe un sistema ortogonal de polinomios (Polinomios de Chebyshev) en  $\cos \theta$ , cuya definición es<sup>27</sup>:

$$U_\lambda(\theta) = \frac{\operatorname{sen}(\frac{1}{2}\lambda+1)\theta}{\operatorname{sen}\theta} = \sum_m \frac{(-)^m (\frac{1}{2}\lambda-m)!}{m! (\frac{1}{2}\lambda-2m)!} (2\cos\theta)^{\frac{1}{2}\lambda-2m}, \quad (2.12)$$

donde  $\lambda=0,2,4, \dots$  y tienen la propiedad de ortogonalidad

$$\int_0^\pi \operatorname{sen}^2 \theta U_{\lambda'}(\theta) U_\lambda(\theta) d\theta = \frac{1}{2} \pi \delta_{\lambda'\lambda}. \quad (2.13)$$

Una función  $F(\theta)$  regular en  $0 \leq \theta \leq \pi$  se puede desarrollar como

$$F(\theta) = \sum_{\lambda} f_{\lambda} U_{\lambda}(\theta), \quad (2.14)$$

y los coeficientes del desarrollo son determinados usando la propiedad de ortogonalidad de los polinomios de Chebyshev, por lo tanto

$$\begin{aligned} f_{\lambda} &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} F(\theta) \sin^2 \theta U_{\lambda}(\theta) d\theta \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} F(\theta) \sin\left(\frac{1}{2}\lambda + 1\right) \theta \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Ahora bien, según la fórmula (4.13) de Rose<sup>28</sup>

$$d_{\frac{1}{2}\nu\frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma) = \left(\frac{\lambda+\nu}{4}\right)! \left(\frac{\lambda-\nu}{4}\right)! \sum_k \frac{(-)^k (\cos 2\gamma)^{\frac{1}{2}\lambda-2k} (\sin^2 2\gamma)^k}{\left(\frac{1}{4}(\lambda-\nu)-k\right)! \left(\frac{1}{4}(\lambda+\nu)-k\right)! k! k!},$$

como  $\sin^2 2\gamma = 1 - \cos^2 2\gamma$ , entonces

$$d_{\frac{1}{2}\nu\frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma) = \left(\frac{\lambda+\nu}{4}\right)! \left(\frac{\lambda-\nu}{4}\right)! \sum_k \sum_l \frac{(-)^{k-l} (\cos 2\gamma)^{\frac{1}{2}\lambda-2(k-l)}}{\left(\frac{\lambda-\nu}{4}-k\right)! \left(\frac{\lambda+\nu}{4}-k\right)! k! l! (-l+k)!}.$$

Cambiando de índice mudo  $k-l=m$  tenemos:

$$d_{\frac{1}{2}\nu\frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma) = \left(\frac{\lambda+\nu}{4}\right)! \left(\frac{\lambda-\nu}{4}\right)! \sum_m \left[ \sum_k \frac{1}{k \left(\frac{\lambda-\nu}{4}-k\right)! \left(\frac{\lambda+\nu}{4}-k\right)! k! (k-m)!} \right] \frac{(-)^m (\cos 2\gamma)^{\frac{1}{2}\lambda-2m}}{m!},$$

y utilizando el teorema de adición de los coeficientes binomiales para efectuar la suma sobre  $k$ , encontramos que:

$$d_{\frac{1}{2}\nu\frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma) = \sum_m \frac{(-)^m \left(\frac{1}{2}\lambda-m\right)! (\cos 2\gamma)^{\frac{1}{2}\lambda-2m}}{m! \left(\frac{\lambda+\nu}{4}-m\right)! \left(\frac{\lambda-\nu}{4}-m\right)! m!}. \quad (2.16)$$

Sustituyendo (2.11) en (2.12), desarrollando binomialmente, haciendo un cambio de índices mudos, y usando la ec. (2.16) se obtiene:

$$\frac{\sin\left(\frac{1}{2}\lambda+1\right)\theta}{\sin\theta} = \sum_{\nu=\lambda}^{-\lambda} e^{i\nu\alpha} d_{\frac{1}{2}\nu\frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma), \quad (2.17)$$

donde la suma se efectúa sobre  $\nu = \lambda, \lambda - 4, \dots, -\lambda$ . Excepto por un factor  $\sqrt{(\lambda+2)/16\pi^2}$ , los términos dentro de la suma (2.17) son  $Y_{\lambda\nu, 00}$ , por lo tanto la ec. (2.17) es una función generatriz para los  $Y_{\lambda\nu, 00}$ .

Para calcular  $V_1$  se empieza por desarrollar  $\frac{\rho}{r_1}$  en términos de  $U_\lambda(\theta)$  es decir, según (2.15)

$$\frac{\rho}{r_1} = \frac{1}{\cos \frac{1}{2}\theta}, \quad (2.18)$$

y de las ecs. (2.12) y (2.14) tenemos que

$$\frac{1}{\cos \frac{1}{2}\theta} = \sum_{\lambda} f_{\lambda} \frac{\sin(\frac{1}{2}\lambda+1)\theta}{\sin \theta}, \quad (2.19)$$

donde, según la ecuación (2.15) y además que  $\sin \theta = 2\sin \frac{1}{2}\theta \cos \frac{1}{2}\theta$ :

$$f_{\lambda} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} 2\sin \frac{1}{2}\theta \sin(\frac{1}{2}\lambda+1)\theta d\theta, \quad (2.20)$$

usando relaciones trigonométricas:

$$f_{\lambda} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \left( \cos\left(\frac{\lambda+1}{2}\theta\right) - \cos\left(\frac{\lambda+3}{2}\theta\right) \right) d\theta, \quad (2.21)$$

e integrando, llegamos a

$$f_{\lambda} = \frac{8(\lambda+2)(-)^{\frac{1}{2}\lambda}}{\pi(\lambda+1)(\lambda+3)}. \quad (2.22)$$

Por lo tanto, usando desde la ec. (2.17) hasta la (2.22) tenemos que

$$\frac{\rho}{r_1} = \frac{8}{\pi} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \frac{(-)^{\frac{1}{2}\lambda}}{\sum_{\nu=-\lambda}^{-\lambda} (\lambda+1)(\lambda+3)} e^{i\nu\alpha} d_{\frac{1}{2}\nu, \frac{1}{2}\nu}^{-\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma). \quad (2.23)$$

Sustituyendo esta ecuación y la ec. (1.13) en la ec. (2.6a) se obtiene

$$\Psi_1(\lambda'\nu', \lambda\nu) = 8\pi^2 \frac{\sqrt{(\lambda+2)(\lambda'+2)}}{16\pi^3} \frac{8}{\pi} \sum_{\bar{\lambda}} \sum_{\bar{\nu}} \frac{(\bar{\lambda}+2)(-\bar{\lambda})}{(\bar{\lambda}+1)(\bar{\lambda}+3)} \int_0^\pi e^{i(-\nu'+\bar{\nu}+\nu)\alpha} d\alpha$$

$$\star \int_0^{\frac{1}{2}\pi} d\frac{1}{2}\lambda'_{\frac{1}{2}\nu'_{\frac{1}{2}\nu'}(4\gamma) d\frac{1}{2}\bar{\lambda}_{\frac{1}{2}\bar{\nu}_{\frac{1}{2}\bar{\nu}}(4\gamma) d\frac{1}{2}\lambda_{\frac{1}{2}\nu_{\frac{1}{2}\nu}(4\gamma) \text{sen} 4\gamma d\gamma. \quad (2.24)$$

La primera integral es simplemente  $2\pi\delta_{-\nu, \nu' - \nu}$ . La segunda integral se evalúa usando las siguientes fórmulas de Rose<sup>28</sup>, donde  $\langle J_1 m_1; J_2 m_2 | J_3 m_3 \rangle$  indica un coeficiente de Clebsch-Gordan de SU(2):

$$\int_0^\pi \text{sen} \beta d_{\mu_3 m_3}^{J_3}(\beta) d_{\mu_2 m_2}^{J_2}(\beta) d_{\mu_1 m_1}^{J_1}(\beta) d\beta = \left( \frac{2}{2J_3+1} \right) \langle J_1 m_1; J_2 m_2 | J_3 m_3 \rangle \langle J_1 \mu_1; J_2 \mu_2 | J_3 \mu_3 \rangle$$

y

$$d_{mm}^J(\beta) = d_{-m-m}^J(\beta),$$

con lo que obtenemos

$$\int_0^{\frac{1}{2}\pi} d\frac{1}{2}\lambda'_{\frac{1}{2}\nu'_{\frac{1}{2}\nu'}(4\gamma) d\frac{1}{2}\bar{\lambda}_{\frac{1}{2}\bar{\nu}_{\frac{1}{2}\bar{\nu}}(4\gamma) d\frac{1}{2}\lambda_{\frac{1}{2}\nu_{\frac{1}{2}\nu}(4\gamma) \text{sen} 4\gamma d\gamma = \frac{1}{2} \left( \frac{2}{\frac{1}{2}\bar{\lambda}+1} \right) \langle \frac{1}{2}\lambda'_{\frac{1}{2}\nu'_{\frac{1}{2}\nu'}; \frac{1}{2}\lambda_{\frac{1}{2}\nu_{\frac{1}{2}\nu} | \frac{1}{2}\bar{\lambda}_{\frac{1}{2}\bar{\nu}_{\frac{1}{2}\bar{\nu}} \frac{1}{2}(\nu'-\nu) \rangle^2.$$

Por lo tanto  $\Psi_1$  en términos de Coeficientes de Clebsch-Gordan es

$$\Psi_1(\lambda'\nu', \lambda\nu) = (-)^{\frac{1}{2}(\lambda+\lambda')} \frac{8}{\pi} \sum_{\bar{\lambda}} \frac{\sqrt{(\lambda+2)(\lambda'+2)}}{(\bar{\lambda}+1)(\bar{\lambda}+3)} \langle \frac{1}{2}\lambda'_{\frac{1}{2}\nu'_{\frac{1}{2}\nu'}; \frac{1}{2}\lambda_{\frac{1}{2}\nu_{\frac{1}{2}\nu} | \frac{1}{2}\bar{\lambda}_{\frac{1}{2}\bar{\nu}_{\frac{1}{2}\bar{\nu}} \frac{1}{2}(\nu'-\nu) \rangle^2, \quad (2.25)$$

con  $\bar{\lambda} = \lambda + \lambda', \lambda + \lambda' - 4, \lambda + \lambda' - 8, \dots, \max(|\lambda - \lambda'|, |\nu - \nu'|)$ .

No es necesario calcular  $\Psi_2$  y  $\Psi_{12}$  ya que por la simetría de la función de onda impuesta por el principio de Pauli y por la relación entre elementos de matriz de 1 y 2 cuerpos, se pueden relacionar con  $\Psi_1$  como se verá en el siguiente capítulo.

## CAPITULO 3

CONSIDERACION DEL PRINCIPIO DE PAULI  
EN EL PROBLEMA DEL HELIO

## a.- Principio de Exclusión en coordenadas Z-D.

La función de onda que describe un estado de un átomo con 2 electrones es:

$$\Psi_{MM_S}^{LS} = \psi_M^L(x_1, x_2) X_{M_S}^S(\sigma_1, \sigma_2), \quad (3.1)$$

donde  $\psi_M^L(x_1, x_2)$  es la parte espacial y  $X_{M_S}^S(\sigma_1, \sigma_2)$  es la parte espinorial.

En la función de onda aparecen los números cuánticos de momento angular orbital (L), momento angular intrínseco (S) y sus proyecciones ( $M, M_S$ ) que caracterizan un estado físico del átomo. Los cuatro vectores de la base espinorial para una representación diagonal de  $S^2$  y  $S_z$  (ver sec. 29.b de Pauling<sup>24</sup>), es decir las funciones ortonormales correspondientes al spin de 2 electrones ( $S=0$  o  $1$ ) son

$$S=0 \quad X_0^0 = 2^{-\frac{1}{2}} [\chi_{\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2) - \chi_{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}}(2)], \quad (3.2a)$$

$$S=1 \quad \begin{cases} X_1^1 = \chi_{\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}}(2), & (3.2b) \\ X_0^1 = 2^{-\frac{1}{2}} [\chi_{\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2) + \chi_{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}}(2)], & (3.2c) \\ X_{-1}^1 = \chi_{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2). & (3.2d) \end{cases}$$

La función (3.2a) cambia de signo bajo el intercambio  $1 \longleftrightarrow 2$ , mien-

tras que las (3.2b), (3.2c) y (3.2d) quedan invariantes ante dicho intercambio, es decir:

$$X_0^0(1,2) = -X_0^0(2,1), \quad (3.3a)$$

$$X_{M_S}^1(1,2) = X_{M_S}^1(2,1), \quad (3.3b)$$

y decimos que (3.3a) es una función antisimétrica, mientras que (3.3b) es simétrica. Se llaman bosones a las partículas cuyos estados son simétricos ante el intercambio de 2 partículas, y fermiones a aquellos cuyos estados son antisimétricos. Ejemplos de bosones son las partículas de espín entero como fotones, mesones  $\pi$ , etc. Ejemplos de fermiones son las partículas de espín  $\frac{1}{2}$  como electrones, protones, etc. Por el Principio de Exclusión de Pauli, dos fermiones no pueden ocupar el mismo estado cuántico individual. Consecuentemente la función de onda total de dos electrones es antisimétrica, y tenemos:

$$\Psi_{MM_S}^{LS}(1,2) = -\Psi_{MM_S}^{LS}(2,1). \quad (3.4a)$$

Entonces  $\psi(x_1, x_2)$  debe tener propiedades complementarias a  $X_{M_S}^S(\sigma_1, \sigma_2)$ . Si  $S=1$  (estado triplete),  $\psi$  debe ser antisimétrico

$$S=1: \quad \psi^{\text{antisim}}(x_1, x_2) = -\psi^{\text{antisim}}(x_2, x_1), \quad (3.4b)$$

y si  $S=0$  (estado singulete),  $\psi$  debe ser simétrica

$$S=0: \quad \psi^{\text{sim}}(x_1, x_2) = \psi^{\text{sim}}(x_2, x_1). \quad (3.4c)$$

Ahora bien, nos interesa el estado base del Helio que tiene

$$S = M_S = L = M = 0,$$

por lo tanto, debemos construir  $\psi_{L=M=0}^{\text{sim}}(x_1, x_2)$ . Para este propósito aceptaremos que es factible expresar la función de onda espacial exacta en términos de la base completa ortonormal discutida en el Capítulo 1,

es decir, que existe un desarrollo del tipo

$$\psi_{L=M=0}(x_1, x_2) = \sum_{s\lambda\nu} C_{s\lambda\nu} R_s^\mu(\rho) Y_{\lambda\nu, L=M=0}(\Omega), \quad (3.5a)$$

donde  $C_{s\lambda\nu}$  son coeficientes numéricos desconocidos por el momento, y que se obtendrán por diagonalización de la matriz hamiltoniana.

Es sabido<sup>9</sup> que la función de onda exacta tiene, en la vecindad del núcleo, un desarrollo del tipo

$$\psi = \sum_{n_1 n_2 n_3 n_4} a_{n_1 n_2 n_3 n_4} |x_1|^{n_1} |x_2|^{n_2} |x_1 - x_2|^{n_3} (\ln \rho)^{n_4}, \quad (3.5b)$$

y que a grandes distancias del núcleo decae asintóticamente hacia 0 según  $\exp(-k(|x_1| + |x_2|))$ . Nuestra base ortonormal es regular en la vecindad de  $\rho=0$ , y cuando  $\rho \rightarrow \infty$  decae según  $e^{-\beta\rho} \equiv \exp\{-\beta|x_1^2 + x_2^2|^{\frac{1}{2}}\}$ . Estas características de la base nos permiten anticipar que se va a requerir un gran número de términos en el desarrollo (3.5a) para reproducir el comportamiento correcto de la función de onda espacial muy cerca y muy lejos del núcleo. Esto probablemente tendrá como consecuencia una lenta convergencia del cálculo de diagonalización.

La función (3.5a) todavía no satisface el principio de Pauli ya que no es simétrica. Para simetrizarla hay que examinar como se comportan los términos  $R_s^\mu(\rho)$  y  $Y_{\lambda\nu, 00}(\Omega)$  bajo el intercambio  $x_1 \leftrightarrow x_2$ . El hiper-radio  $\rho = \sqrt{(x_1 \cdot x_1) + (x_2 \cdot x_2)}$  es invariante bajo el intercambio (1,2) de las partículas, por lo que solo necesitamos analizar el comportamiento de  $Y_{\lambda\nu, 00}(\Omega)$  bajo el intercambio (1,2).

De la definición de las coordenadas Z-D (ver apéndice A) se obtiene:

$$x_1 \cdot x_1 = \frac{1}{2}\rho^2(1 + \cos 2\gamma \cos 2\alpha), \quad (3.6a)$$

$$x_2 \cdot x_2 = \frac{1}{2}\rho^2(1 - \cos 2\gamma \cos 2\alpha), \quad (3.6b)$$

$$\underline{x}_1 \cdot \underline{x}_2 = \frac{1}{2} \rho^2 \cos 2\gamma \sin 2\alpha, \quad (3.6c)$$

Utilizando las relaciones (3.6) tenemos que

$$\rho^4 \cos^2 2\gamma = [(\underline{x}_1 \cdot \underline{x}_1) - (\underline{x}_2 \cdot \underline{x}_2)]^2 + 4(\underline{x}_1 \cdot \underline{x}_2)^2,$$

de donde se observa que  $\cos 2\gamma$  es invariante bajo el intercambio (1,2) de partículas, y entonces de la relación (3.6c) el  $\sin 2\alpha$  también es invariante y simétrico bajo dicho intercambio. Además, como

$$\begin{aligned} (\underline{x}_1 \cdot \underline{x}_1) - (\underline{x}_2 \cdot \underline{x}_2) &= \rho^2 \cos 2\gamma \cos 2\alpha \\ \implies \sin 2\alpha &\text{ es simétrico bajo (1,2)} \\ \cos 2\alpha &\text{ es antisimétrico bajo (1,2).} \end{aligned}$$

Esto implica que

$$2\alpha \xrightarrow{(1,2)} \pi - 2\alpha \quad \text{o bien} \quad \alpha \xrightarrow{(1,2)} \frac{1}{2}\pi - \alpha, \quad (3.7)$$

aquí (1,2) indica permutación de 1 y 2.

Usando la ecuación (1.13) para los armónicos hiperesféricos y la relación (3.7) se obtiene

$$Y_{\lambda\nu\cdot 00}(\underline{\Omega}) \xrightarrow{(1,2)} \left(\frac{\lambda+2}{16\pi^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\nu(\frac{1}{2}\pi - \alpha)} d_{\frac{1}{2}\nu\frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma), \quad (3.8)$$

por lo tanto usando la propiedad  $d_{mm}^J(\beta) \equiv d_{-m-m}^J(\beta)$ , se concluye que

$$Y_{\lambda\nu\cdot 00}(\underline{\Omega}) \xrightarrow{(1,2)} e^{i\frac{1}{2}\nu\pi} Y_{\lambda-\nu\cdot 00}(\underline{\Omega}). \quad (3.9)$$

Las funciones angulares simétricas serán seleccionadas en la forma:

$$Y_{\lambda\nu}^{sim}(\underline{\Omega}) \equiv \frac{e^{-i\frac{1}{2}\nu\pi}}{\sqrt{2(1+\delta_{\nu 0})}} \left[ Y_{\lambda\nu\cdot 00}(\underline{\Omega}) + e^{i\frac{1}{2}\nu\pi} Y_{\lambda-\nu\cdot 00}(\underline{\Omega}) \right], \quad (3.10a)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{\nu 0})}} \left[ e^{-i\frac{1}{2}\nu\pi} Y_{\lambda\nu\cdot 00}(\underline{\Omega}) + e^{i\frac{1}{2}\nu\pi} Y_{\lambda-\nu\cdot 00}(\underline{\Omega}) \right], \quad (3.10b)$$

donde el factor  $e^{-i\frac{1}{2}\nu\pi}$  en (3.10a) se requiere para obtener una matriz de

energía potencial real, esto es evidente debido al hecho de que  $Y_{\lambda\nu}^{sim}(\Omega)$  es real ya que cada término en (3.10b) es el complejo conjugado del otro. El índice  $\nu$  toma ahora solo los valores

$$\nu = \lambda, \lambda-4, \lambda-8, \dots, 2 \text{ ó } 0, \quad (3.11)$$

además  $\frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{\nu 0})}}$  se necesita para normalizar correctamente a  $Y^{sim}$ .

Definición

$$\begin{aligned} |s\lambda\nu\rangle_{sim} &\equiv R_s^\mu(\rho) Y_{\lambda\nu}^{sim}(\Omega) \\ &= R_s^\mu(\rho) [2(1+\delta_{\nu 0})]^{-\frac{1}{2}} \left\{ e^{-i\frac{1}{2}\nu\pi} Y_{\lambda\nu \cdot 00}(\Omega) + e^{i\frac{1}{2}\nu\pi} Y_{\lambda-\nu \cdot 00}(\Omega) \right\}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

Los miembros de la base completa antisimétrica serán  $X^0_o(\sigma_1, \sigma_2) |s\lambda\nu\rangle_{sim}$ , pero en vista de que el hamiltoniano  $H$  que hemos adoptado es independiente del spín, en los elementos de matriz de  $H$  respecto a esta base los productos escalares de las funciones de spín  $X^0_o$  automáticamente dan 1, dejando solo los elementos de matriz respecto a  $|s\lambda\nu\rangle_{sim}$  que se discuten en la siguiente sección.

## b.- Matriz Hamiltoniana para el átomo de Helio.

A continuación en los incisos (i), (ii) y (iii) daremos los elementos de matriz del Hamiltoniano respecto a la base simétrica, para finalmente dar la matriz completa para el Hamiltoniano del átomo de Helio.

### 1) Energía Cinética.

El único cambio respecto a los resultados obtenidos en el capítulo 2 es que el índice  $\nu$  se limita a los valores de la relación (3.11). Los ele-

mentos de matriz de la energía cinética son los obtenidos en la ec. (2.8):

$$\begin{aligned} \text{sim} \langle s' \lambda' \nu' | \hat{T} | s \lambda \nu \rangle_{\text{sim}} &= \frac{\beta^2}{8} \left\{ \sqrt{(s+1)(2\mu+5+s)} \delta_{s',s+1} + (2s+2\mu+5) \delta_{ss'} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{s(2\mu+4+s)} \delta_{s',s-1} + \frac{4}{2\mu+4} \left[ \lambda(\lambda+4) - \mu(\mu+4) \right] \right. \\ &\quad \left. \frac{(2\mu+4+s)! (s_\zeta)!}{(2\mu+4+s_\zeta)! (s_\zeta)!} \right\}^{\frac{1}{2}} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\nu\nu'}, \quad (3.13) \end{aligned}$$

con  $s_\zeta = \min\{s, s'\}$  y  $s_\gamma = \max\{s, s'\}$ .

### 1) Energía Potencial electrón-núcleo.

Debido a la simetría de  $|s\lambda\nu\rangle_{\text{sim}}$  bajo el intercambio (1,2) tenemos

$$\text{sim} \langle s' \lambda' \nu' | \frac{\rho}{r_1} + \frac{\rho}{r_2} | s \lambda \nu \rangle_{\text{sim}} = 2 \text{sim} \langle s' \lambda' \nu' | \frac{\rho}{r_1} | s \lambda \nu \rangle_{\text{sim}}, \quad (3.14)$$

Usando (3.12) y su complejo conjugado encontramos que

$$\begin{aligned} 2 \text{sim} \langle s' \lambda' \nu' | \frac{\rho}{r_1} | s \lambda \nu \rangle_{\text{sim}} &= \frac{e^{i\frac{1}{2}\pi(\nu'-\nu)}}{\sqrt{(1+\delta_{\nu 0})(1+\delta_{\nu' 0})}} \left\{ \langle s' \lambda' \nu' | \frac{\rho}{r_1} | s \lambda \nu \rangle + \right. \\ &\quad \left. (-)^{\frac{1}{2}\nu} \langle s' \lambda' \nu' | \frac{\rho}{r_1} | s \lambda - \nu \rangle + (-)^{\frac{1}{2}\nu'} \langle s' \lambda' - \nu' | \frac{\rho}{r_1} | s \lambda \nu \rangle \right. \\ &\quad \left. (-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)} \langle s' \lambda' - \nu' | \frac{\rho}{r_1} | s \lambda - \nu \rangle \right\}. \quad (3.15) \end{aligned}$$

Los elementos de matriz en el lado derecho de esta ecuación fueron evaluados en la ec. (2.25). De acuerdo a esta ecuación y a la propiedad de simetría de los coeficientes de Clebsch-Gordan<sup>28</sup>

$$\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j m \rangle^2 = \langle j_1 -m_1; j_2 -m_2 | j -m \rangle^2, \quad (3.16)$$

se deduce que el cuarto elemento de matriz es igual al primero y el se-

gundo igual al tercero, apareciendo así en el resultado un factor común  $[1 + (-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}]$ . Además, como  $[1 + (-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}]$  es distinto de cero solo cuando  $\frac{1}{2}(\nu'-\nu)$  es par, tenemos que en los resultados no-nulos se puede poner

$$e^{i\frac{1}{2}\pi(\nu'-\nu)} = (-1)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}. \quad (3.17)$$

Usando (3.16) y (3.17) se tiene que

$$\begin{aligned} \text{sim} \langle s'\lambda'\nu' | \frac{\rho}{r_1} + \frac{\rho}{r_2} | s\lambda\nu \rangle \text{sim} &= \frac{[1 + (-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}] (-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}}{\sqrt{(1+\delta_{\nu 0})(1+\delta_{\nu' 0})}} \left\{ \langle s'\lambda'\nu' | \frac{\rho}{r_1} | s\lambda\nu \rangle \right. \\ &\quad \left. + (-)^{\frac{1}{2}\nu'} \langle s'\lambda'-\nu' | \frac{\rho}{r_1} | s\lambda\nu \rangle \right\}. \quad (3.18) \end{aligned}$$

### iii) Energía Potencial interelectrónica.

Por la fórmula (1.31) se tiene que

$$\langle s'\lambda'\nu' | \frac{\rho}{r_{12}} | s\lambda\nu \rangle = e^{i\frac{1}{2}\pi(\nu'-\nu)} 2^{-\frac{1}{2}} \langle s'\lambda'\nu' | \frac{\rho}{r_1} | s\lambda\nu \rangle. \quad (3.19)$$

Procediendo análogamente al inciso (ii) de arriba se obtiene

$$\begin{aligned} \text{sim} \langle s'\lambda'\nu' | \frac{\rho}{r_{12}} | s\lambda\nu \rangle \text{sim} &= \frac{e^{i\frac{1}{2}\pi(\nu'-\nu)}}{2\sqrt{2(1+\delta_{\nu 0})(1+\delta_{\nu' 0})}} \left\{ e^{i\frac{1}{2}\pi(\nu'-\nu)} \langle s'\lambda'\nu' | \frac{\rho}{r_1} | s\lambda\nu \rangle \right. \\ &\quad + (-)^{\frac{1}{2}\nu} e^{i\frac{1}{2}\pi(\nu'+\nu)} \langle s'\lambda'\nu' | \frac{\rho}{r_1} | s\lambda-\nu \rangle + (-)^{\frac{1}{2}\nu'} e^{i\frac{1}{2}\pi(\nu'-\nu)} \langle s'\lambda'-\nu' | \frac{\rho}{r_1} | s\lambda\nu \rangle \\ &\quad \left. + (-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)} e^{i\frac{1}{2}\pi(\nu'+\nu)} \langle s'\lambda'-\nu' | \frac{\rho}{r_1} | s\lambda-\nu \rangle \right\}, \quad (3.20) \end{aligned}$$

de donde, reduciendo exponenciales y recordando que en el lado derecho el cuarto elemento de matriz es igual al primero, y el segundo igual al

tercero, se obtiene

$$\text{sim} \langle s' \lambda' \nu' | \frac{\rho}{r_{12}} | s \lambda \nu \rangle_{\text{sim}} = \frac{(-)^{\frac{1}{2}(\nu' - \nu)}}{\sqrt{2(1 + \delta_{\nu 0})(1 + \delta_{\nu' 0})}} \left\{ \langle s' \lambda' \nu' | \frac{\rho}{r_1} | s \lambda \nu \rangle + \langle s' \lambda' - \nu' | \frac{\rho}{r_1} | s \lambda \nu \rangle \right\}. \quad (3.21)$$

Reuniendo las tres contribuciones (i), (ii) y (iii), poniendo los valores de los elementos de matriz de  $\frac{\rho}{r_1}$  ec. (2.25), indicando la carga nuclear con Z, y haciendo  $\mu=0$ ; finalmente la matriz secular que determina la energía del estado más bajo del átomo de Helio [ver la siguiente sección], tiene por elementos

$$\begin{aligned} \text{sim} \langle s' \lambda' \nu' | (\hat{H} - E) | s \lambda \nu \rangle_{\text{sim}} = & \frac{\beta^2}{8} \left\{ (2s+5) \delta_{ss'} + \sqrt{s(s+4)} \delta_{s', s-1} \right. \\ & \left. + \lambda(\lambda+4) \left[ \frac{(s'+1)(s'+2)(s'+3)(s'+4)}{(s+1)(s+2)(s+3)(s+4)} \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\nu \nu'} \\ & + \beta \left\{ \left[ -Z(1+(-)^{\frac{1}{2}(\nu' - \nu)}) (-)^{\frac{1}{2}(\nu' - \nu)} + \frac{(-)^{\frac{1}{2}(\nu' - \nu)}}{\sqrt{2}} \right] F_{\nu' \nu}^{\lambda' \lambda} \right. \\ & \left. + \left[ -Z(1+(-)^{\frac{1}{2}(\nu' - \nu)}) (-)^{\frac{1}{2}(\nu' + \nu)} + \frac{(-)^{\frac{1}{2}(\nu' - \nu)}}{\sqrt{2}} \right] F_{-\nu' \nu}^{\lambda' \lambda} \right\} \left\{ (1 + \delta_{\nu 0})(1 + \delta_{\nu' 0}) \right\}^{-\frac{1}{2}} \delta_{ss'} \\ & + E \left\{ -(2s+5) \delta_{ss'} + \sqrt{s(s+4)} \delta_{s', s-1} \right\} \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\nu \nu'}, \quad (3.22a) \end{aligned}$$

donde se omitieron los términos con  $s' > s$ , ya que se deducen de la simetría de la matriz. Las F's son, por definición

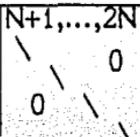
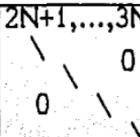
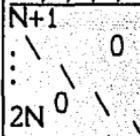
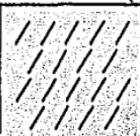
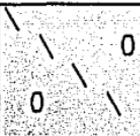
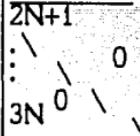
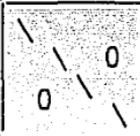
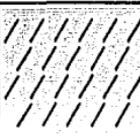
$$F_{\nu' \nu}^{\lambda' \lambda} \equiv (-)^{\frac{1}{2}(\lambda' + \lambda)} \frac{8}{\pi} \sum_{\bar{\lambda}=\lambda}^{\lambda} \min \frac{\sqrt{(\bar{\lambda}+2)(\bar{\lambda}+2)}}{(\bar{\lambda}+1)(\bar{\lambda}+3)} \langle \frac{1}{2} \lambda' \frac{1}{2} \nu'; \frac{1}{2} \lambda, -\frac{1}{2} \nu | \frac{1}{2} \lambda, \frac{1}{2} (\nu' - \nu) \rangle^2, \quad (3.22b)$$

con  $\lambda_{max} = \lambda + \lambda'$ ,  $\lambda_{min} = \max\{|\lambda - \lambda'|, |\nu' - \nu|\}$ , y los valores de  $\bar{\lambda}$  se incrementan de 4 en 4 en la suma. Vale la pena mencionar que existe una fórmula de recurrencia de los coeficientes de Clebsch-Gordan (ver apéndice I de Rose<sup>28</sup>) del tipo

$$A\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j+1, m \rangle + B\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle + C\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j-1, m \rangle = 0,$$

la cual permite determinar las F's eficientemente en una computadora.

La estructura de la matriz secular es la de un conjunto de bloques de cierta dimensión, por ejemplo  $N \times N$ , donde cada bloque se identifica por el par de índices  $(s', s)$

$s'$ \ $s$	0	1	2
0	$1, \dots, N$  $N$	$N+1, \dots, 2N$  0	$2N+1, \dots, 3N$  0
1	$N+1$  $2N$		 0
2	$2N+1$  $3N$	 0	

y dentro de cada bloque los renglones y columnas se identifican con  $(\lambda' \nu')$  y  $(\lambda \nu)$  respectivamente. Los bloques diagonales están "llenos", pero los bloques no-diagonales solo tienen elementos distintos de cero sobre su diagonal. La energía  $E$  solo aparece en la diagonal de los bloques diagonales y de los bloques inmediatamente adyacentes.

La selección  $\mu=0$  en las funciones radiales  $R_s^\mu(\rho)$  se dedujo examinando el problema del He en una base unidimensional

$\psi_0 = e^{-\frac{1}{2}\beta\rho} \mu$  en la cual se logra la mejor aproximación a la energía con  $\mu=0$ . Se probó que  $\mu=0$  en una base bidimensional también es la mejor selección.

### c.- Principio Variacional en coordenadas Z-D.

Se va a efectuar un cálculo variacional de la energía del estado base, el cual tiene  $L=0$ . El principio variacional es el llamado principio de Rayleigh<sup>21</sup>

$$\delta E = \delta \left\{ \frac{\langle \Psi(x_1, x_2) | \hat{H} | \Psi(x_1, x_2) \rangle}{\langle \Psi(x_1, x_2) | \Psi(x_1, x_2) \rangle} \right\} = 0, \quad (3.23)$$

con  $\Psi$  de la forma

$$\Psi = \sum f_{s\lambda\nu} R_s^\mu(\rho) Y_{\lambda\nu}^{sim}(\Omega), \quad (3.24)$$

y nos conduce a un sistema lineal homogéneo para las incógnitas  $f_{s\lambda\nu}$  cuya condición de compatibilidad es la ecuación secular (ver sec. 26.d de Pauling<sup>24</sup>)

$$\text{Det} \| H_{s'\lambda'\nu', s\lambda\nu} - E \Delta_{s'\lambda'\nu', s\lambda\nu} \| = 0, \quad (3.25)$$

donde  $H_{s'\lambda'\nu', s\lambda\nu}$  son los elementos de matriz del operador  $\hat{H}$  respecto la base  $\{Y_{\lambda\nu}^{sim}(\Omega) R_s^\mu(\rho)\}$ , y  $\Delta_{s'\lambda'\nu', s\lambda\nu}$  son los traslapes de 2 funciones de la base

$$\Delta_{s'\lambda'\nu', s\lambda\nu} = \int_0^\infty R_s^\mu R_{s'}^\mu \rho^5 d\rho \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\nu'\nu}. \quad (3.26)$$

d.- Cómputo de la Energía del Estado Base del He, y del  $H^-$ .

1) Caso en que la base se restringe a estados con  $s = s' = 0$ .

Usando (3.22) y simplificando tenemos

$$\begin{aligned} \text{sim} \langle 0\lambda'\nu' | (\hat{H}-E) | 0\lambda\nu \rangle_{\text{sim}} = & \left\{ \left( \frac{\beta^2}{8} - E \right) 5 + \frac{\beta^2}{8} \lambda(\lambda+4) \right\} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\nu\nu'} \\ & + \beta \text{sim} \langle 0\lambda'\nu' | V | 0\lambda\nu \rangle_{\text{sim}}, \quad (3.27) \end{aligned}$$

El segundo término del lado derecho de la igualdad en (3.27) está dado por:

$$\begin{aligned} \text{sim} \langle s'\lambda'\nu' | V | s\lambda\nu \rangle_{\text{sim}} = & \left\{ \left[ -2(1+(-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}) (-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)} + \frac{(-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}}{\sqrt{2}} \right] F_{\nu'\nu'}^{\lambda'\lambda} \right. \\ & \left. + \left[ -2(1+(-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}) (-)^{\frac{1}{2}(\nu'+\nu)} + \frac{(-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}}{\sqrt{2}} \right] F_{-\nu'\nu'}^{\lambda'\lambda} \right\} \frac{\delta_{ss'}}{\sqrt{(1+\delta_{\nu 0})(1+\delta_{\nu' 0})}}, \quad (3.28) \end{aligned}$$

y las  $F_{\nu'\nu'}^{\lambda'\lambda}$  están definidas en (3.22b).

La ecuación (3.27) aún sigue siendo un problema de eigenvalores común, pero como se puede apreciar se trata de una matriz infinita, puesto que  $\lambda=0,2,4,\dots$  y  $\nu=\lambda,\lambda-4,\lambda-8,\dots,2$  ó  $0$ . Al aplicar el método variacional, la ecuación secular resulta ser

$$\left\{ \left( 1 + \frac{\lambda(\lambda+4)}{5} \right) \frac{\beta^2}{8} - E \right\} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\nu\nu'} + \frac{\beta}{5} \text{sim} \langle 0\lambda'\nu' | V | 0\lambda\nu \rangle_{\text{sim}} = 0. \quad (3.29)$$

Por tanto, para obtener el mínimo en la energía y poder generalizar a dimensión grande, se implementó un programa que resuelve la ecuación (3.29) por computadora, donde se utilizó el método de Jacobi para diagonalización de matrices simétricas, y el valor de  $\beta$  se optimiza probando valores alrededor de la  $\beta$  óptima dada en el inciso siguiente. Se

encuentra que para el He:

$$\beta=4.4$$

$\lambda_{max}$	Dim.	$E_{min}$ (u.a.)
2	2	-2.52634
4	4	-2.72539
12	16	-2.77533
24	49	-2.78339
32	81	-2.78448
36	100	-2.78475
40	121	-2.78493
44	144	-2.78506

$$\beta=4.47$$

$\lambda_{max}$	Dim.	$E_{min}$ (u.a.)
2	2	-2.52705
4	4	-2.72558
12	16	-2.77500
24	49	-2.78291
32	81	-2.78398
36	100	-2.78428

Se ve que  $E_{min} \longrightarrow -2.787$  cuando  $Dim \longrightarrow \infty$ .

Y para el  $H^-$  se tiene que

$$\beta=1.7$$

$\lambda_{max}$	Dim.	$E_{min}$ (u.a.)
2	2	-0.409346
4	4	-0.463780
12	16	-0.479893
24	49	-0.482736
32	81	-0.483133
36	100	-0.483232
40	121	-0.483298

$$\beta=1.756$$

$\lambda_{max}$	Dim.	$E_{min}$ (u.a.)
2	2	-0.409913
4	4	-0.464219
12	16	-0.479837
24	49	-0.482552
32	81	-0.482929
36	100	-0.483023

Se ve que  $E_{min} \longrightarrow -0.485$  cuando  $Dim \longrightarrow \infty$ , es decir, en este grado de aproximación el  $H^-$  no es un sistema ligado.

El programa se corrió en la computadora VAX del IFUNAM. La energía obtenida en ambos sistemas está lejos del valor experimental, pero hay que recordar que la base utilizada no es un sistema completo de funciones.

ii) Caso en que la base se restringe a estados con  $\lambda=\lambda'=\nu=\nu'=0$ .

Usando la ecuación (3.22) tenemos, omitiendo los elementos con  $s' > s$  los cuales se deducen del hecho de que  $\hat{H}-E\hat{I}$  es una matriz real simétrica

$$\begin{aligned} \text{sim} \langle s'00 | (\hat{H}-E) | s00 \rangle_{\text{sim}} = & \frac{\beta^2}{8} \left[ (2s+5) \delta_{ss'} + \sqrt{s(s+4)} \delta_{s',s-1} \right] + \\ & + \beta \left[ -4 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right] \frac{16}{3\pi} \delta_{ss'} + E \left[ -(2s+5) \delta_{ss'} + \sqrt{s(s+4)} \delta_{s',s-1} \right]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Por tanto la ecuación secular es

$$\left\{ \left( \frac{\beta^2}{8} - E \right) (2s+5) - \beta V_0 \right\} \delta_{ss'} + \left( \frac{\beta^2}{8} + E \right) \sqrt{s(s+4)} \delta_{s',s-1} = 0, \quad (3.31)$$

donde 
$$V_0 = \frac{16}{3\pi} \left( 2Z - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \quad \text{y} \quad s = s' = 0, 1, 2, \dots,$$

observamos que la matriz Hamiltoniana es, en este caso, una matriz tridiagonal.

Desarrollemos el caso más simple,  $s=s'=0$ . Como la solución ya está normalizada, podemos aplicar el método variacional directamente, es decir

$$\frac{5}{8} \beta^2 - V_0 \beta - 5E = 0, \quad (3.32)$$

o bien 
$$E = \frac{\beta^2}{8} - \frac{1}{5} V_0 \beta. \quad (3.33)$$

Como vemos  $E=E(\beta)$  y la gráfica de (3.33) es una parábola. Para obtener el valor mínimo de la energía, derivamos (3.33) respecto al parámetro variacional  $\beta$  e igualamos a cero, con lo que obtenemos el siguiente valor de  $\beta$  para el He ( $Z=2$ )

$$\beta=4.4721513, \quad (3.34a)$$

este es el valor óptimo de  $\beta$ , para este caso. Sustituyendo (3.34a) en (3.33) encontramos que la energía mínima del estado base es

$$E=-2.5000172 \text{ (u.a.)}, \quad (3.34b)$$

y para el  $H^-$  ( $Z=1$ ) tenemos que el valor óptimo de  $\beta$  es

$$\beta=1.755907, \quad (3.35a)$$

sustituyendo (3.35a) en (3.33) encontramos que la energía mínima del estado base del  $H^-$  es

$$E=-0.3854011. \quad (3.35b)$$

Para analizar el caso general, se utiliza la siguiente fórmula de recurrencia para desarrollar el determinante secular tridiagonal:

$$\Delta_n = [(2n+5)\left(\frac{\beta^2}{8} - E\right) - V_0\beta] \Delta_{n-1} + [n(n+4)\left(\frac{\beta^2}{8} + E\right)^2] \Delta_{n-2}, \quad (3.36)$$

con  $n=1, 2, \dots, N$ ,

y los valores de la energía, que son las raíces de la ecuación  $\Delta_N(E)=0$  se encontraron por el método de la secante para encontrar raíces.

Se encontró que para cualquier dimensión, la  $\beta$  óptima es la misma que en las relaciones (3.34a) y (3.35a), y además

$$E(\text{He}) \rightarrow -2.5000172 \text{ (u.a.)}, \quad E(H^-) \rightarrow -0.3854011 \text{ (u.a.)}.$$

Es decir  $E_{\text{óptima}}$  es independiente de la dimensión en este caso.

### iii) Caso general en que la base no tiene restricción.

Este caso se refiere exactamente a la ec. (3.22), la cual es un problema de eigenvalores generalizado en los siguientes aspectos:

- i) el eigenvalor  $E$  aparece no solo en la diagonal del determinante secular sino también en 2 líneas paralelas a la diagonal, arriba y abajo de ella (recordar que el determinante es simétrico)
- ii) sobre la diagonal principal el término  $(-E)$  no aparece con coeficiente 1 sino con un coeficiente positivo que depende del índice  $s$ .

Para resolver la dificultad i) se aplicó un método iterativo: a las  $E$  que aparecen fuera de la diagonal se les asigna un valor fijo  $E=E_0$  y se resuelve la ecuación secular resultante para obtener el eigenvalor más bajo, el cual resulta ser, por ejemplo,  $E=E_1$ . Enseguida a las  $E$  fuera de la diagonal se les dá el valor fijo  $E=E_1$  y se vuelve a resolver la ecuación secular para obtener como eigenvalor más bajo  $E=E_2$ . El proceso se repite el número de veces que sea necesario hasta lograr la autoconsistencia; generalmente basta efectuar 3 ó 4 iteraciones.

La dificultad ii) implica que el problema algebraico de eigenvalores es del tipo

$$(H - BE)V = 0, \quad (3.37)$$

donde  $B$  es una matriz diagonal positiva definida, y por lo tanto, existe  $B^{-1/2}$ . Multiplicando (3.37) a la izquierda por  $B^{-1/2}$  se obtiene

$$(B^{-1/2}H - B^{1/2}E)V = 0,$$

o bien

$$(H' - E)V' = 0, \quad (3.38a)$$

con

$$H' \equiv B^{-1/2}HB^{-1/2}, \quad V' \equiv B^{1/2}V, \quad (3.38b)$$

(3.38a) es una ecuación de eigenvalores standard que permite aplicar las

técnicas conocidas para determinar eigenvalores, por ejemplo el método de Householder, a la matriz modificada  $H'$ .

De acuerdo con estas consideraciones, la ecuación secular general es, omitiendo de nuevo los términos con  $s' > s$  que se pueden deducir del hecho de que la matriz hamiltoniana es simétrica,

$$\left\{ \left( \frac{\beta^2}{8} - E \right) \delta_{ss'} + \left( \frac{\beta^2}{8} + E_0 \right) \left( \frac{s(s+4)}{(2s+5)(2s+3)} \right)^{\frac{1}{2}} \delta_{s',s-1} + \frac{\beta^2}{8} \lambda(\lambda+4) \left( \frac{(s'+1)(s'+2)(s'+3)(s'+4)}{(s+1)(s+2)(s+3)(s+4)(2s+5)(2s'+5)} \right)^{\frac{1}{2}} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\nu\nu'} + \frac{\beta}{(2s+5)} \text{sim} \langle s' \lambda' \nu' | V | s \lambda \nu \rangle \text{sim} = 0, \quad (3.39)$$

donde el último elemento de matriz está dado en (3.28).

Los resultados encontrados para la energía mínima del He son:

$$\beta=4.4$$

$s_{\max}$	$\lambda_{\max}$	Dim.	$E_{\min}$ (u.a.)
2	8	27	-2.85018
2	12	48	-2.87597
2	16	75	-2.88746
2	20	108	-2.89344
2	24	147	-2.89675
2	28	192	-2.89881
2	32	243	-2.90001
2	36	300	-2.90085
2	40	363	-2.90143
3	16	100	-2.88754
3	20	144	-2.89358
3	24	196	-2.89695
3	28	256	-2.89899
3	36	400	-2.90116
4	16	125	-2.88754
4	20	180	-2.89358
4	24	245	-2.89696

El programa se corrió en la computadora VAX-11 del IFUNAM. Hay que notar que la mejor predicción teórica<sup>9</sup> para la energía no-relativista del estado base de He es

$$E(\text{He}) = -2.903724377(u.a.),$$

por lo que se decidió correlacionar los primeros 9 datos anteriores para no usar más tiempo de máquina de la computadora VAX. Se obtuvieron los siguientes resultados:

$$\text{Dim} = \frac{2.543672768}{(E+2.9037244)^{0.816103879}}, \quad (3.40)$$

con una correlación de 0.9998. Se obtienen así estas extrapolaciones

$s_{\max}$	$\lambda_{\max}$	$E_{\min}(u.a.)$	Dim.
2	44	-2.901874	432
2	52	-2.902455	588
2	72	-2.903124	1083

#### iv) Energía del estado base del $\text{H}^-$ .

Para efectuar este cálculo basta con poner la carga nuclear  $Z=1$  en la ecuación (3.22a). En la tabla de abajo se presentan los valores de  $E$  obtenidos para diversas dimensiones del determinante secular. Como el valor experimental para la energía del  $\text{H}^-$  no se conoce con gran precisión, los valores tabulados deberían mas bien confrontarse con la mejor predicción teórica para la energía no-relativista del  $\text{H}^-$ , que parece ser la de Frankowski<sup>9</sup>, según la cual

$$E(\text{H}^-) = -0.527751(u.a.).$$

Los resultados encontrados para la energía mínima son

$$\beta = 1.7$$

$s_{max}$	$\lambda_{max}$	Dim	$E_{min}$ (u.a.)
2	8	27	-0.502545
2	12	48	-0.512562
2	16	75	-0.517687
2	36	300	-0.524716
2	40	363	-0.525065

Estos datos se obtuvieron en la computadora MICROVAX del IMP.

e).- Análisis alternativo por medio de ecuaciones diferenciales acopladas.

La función de onda de un estado  $^1S$  (i.e.  $S=L=0$ ) del átomo de 2 electrones con carga nuclear  $Z$  se puede expresar como

$$\Psi = X_0^0(\sigma_1, \sigma_2) \sum_{\lambda \nu} R_{\lambda \nu}(\rho) Y_{\lambda \nu}^{sim}(\Omega). \quad (3.41)$$

El Hamiltoniano no-relativista del sistema es

$$H = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\Lambda^2}{\rho^2} \right) + \left( -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right). \quad (3.42)$$

La ecuación de Schroedinger que  $\Psi$  debe satisfacer es

$$H\Psi = E\Psi. \quad (3.43)$$

Sustituyendo (3.41) en (3.43) y luego multiplicando a la izquierda por  $X_0^0(\sigma_1, \sigma_2) Y_{\lambda \nu}^{sim*}(\Omega)$ , sumando sobre los índices del spín e integrando sobre los 5 ángulos hiperesféricos se obtiene

$$-\frac{1}{2} \left( \frac{d}{d\rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\lambda(\lambda+4)}{\rho^2} \right) R_{\lambda \nu}(\rho) + \sum_{\lambda' \nu'} C_{\nu' \nu}^{\lambda' \lambda} R_{\lambda' \nu'}(\rho) = E R_{\lambda \nu}(\rho), \quad (3.44)$$

con

$$C_{\nu'\nu}^{\lambda'\lambda} = [(1+\delta_{\nu 0})(1+\delta_{\nu' 0})]^{-\frac{1}{2}} \left\{ (-Z)(1+(-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}) (-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)} + \frac{(-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}}{\sqrt{2}} \right\} F_{\nu'\nu}^{\lambda'\lambda} \\ + \left\{ (-Z)(1+(-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}) (-)^{\frac{1}{2}(\nu'+\nu)} + \frac{(-)^{\frac{1}{2}(\nu'-\nu)}}{\sqrt{2}} \right\} F_{-\nu'\nu}^{\lambda'\lambda} \quad (3.45)$$

y las  $F_{\nu'\nu}^{\lambda'\lambda}$  definidas en (3.22b).

La ecuación (3.44) es un sistema infinito de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas para las funciones  $R_{\lambda\nu}(\rho)$ . La solución de este sistema proporcionaría la energía  $E$  de un determinado estado  $^1S$  del átomo, y su correspondiente función de onda  $\Psi_i$ .

Haftel & Mandelzweig<sup>11</sup>, discuten una solución aproximada del sistema de ecuaciones (3.44). Las funciones radiales de estos autores son de la forma

$$R_{\lambda\nu}(\rho) = e^{-k\rho} P_n^{(\lambda\nu)}(\rho), \quad (3.46)$$

donde  $P_n$  es un polinomio en  $\rho$  de grado 120, y el sistema se trunca a diversos ordenes crecientes de aproximación. En la aproximación de mayor orden considerada por estos autores se toman en consideración todas las  $Y_{\lambda\nu}^{sim}$  con  $\lambda=0,2,4,\dots,20$  y las respectivas  $\nu$ . La energía del estado base del He obtenida en esta aproximación es

$$E = -2.89358 \text{ (u.a.)}$$

Un cálculo análogo para el  $H^-$  da como energía del estado base

$$E = -0.51764 \text{ (u.a.)}$$

El análisis seguido en las secciones anteriores de esta tesis, es en el fondo equivalente al de estos autores, ya que el polinomio  $P_n(\rho)$  considerado por ellos se realiza aquí por una suma  $\sum_{s=0}^{s_{max}} a_s L_s^{\lambda}(\rho)$  de polinomios de Laguerre. Los resultados presentados en la sección anterior

parecen indicar que no es necesario considerar polinomios de grado tan alto como aquellos dados por Haftel & Mandelzweig<sup>11</sup>, ya que con  $\lambda_{max}=20$  y  $s_{max}=3$  ó  $4$  se reproduce exactamente el mismo valor de  $E$  mencionado por ellos.

Un método de análisis parecido, conocido con el nombre de "aproximación adiabática", fue introducido por Macek<sup>19</sup>, y se ha utilizado mucho en el estudio de estados doblemente excitados del átomo de He. En esta aproximación se supone que la función de onda se puede expresar como

$$\Psi = \sum_S X_M^S(\sigma_1, \sigma_2) R(\rho) \mathcal{Y}(\Omega), \quad (3.47)$$

y el hiperradio  $\rho$  se supone inicialmente constante. Substituyendo esta  $\Psi$  en (3.43) y eliminando  $X_M^S$  se obtiene una ec. diferencial para  $\mathcal{Y}(\Omega)$

$$\left( \frac{1}{2\rho^2} \Delta^2 + \frac{C(\alpha, \gamma)}{\rho} \right) \mathcal{Y}(\Omega, \rho) = U(\rho) \mathcal{Y}(\Omega, \rho), \quad (3.48a)$$

donde

$$C(\alpha, \gamma) \equiv \left[ -\frac{Z\rho}{r_1} - \frac{Z\rho}{r_2} + \frac{\rho}{r_{12}} \right], \quad (3.48b)$$

y las soluciones dependen del parámetro continuo  $\rho$ . La ecuación (3.48a) tiene en principio, una familia de soluciones ortonormales  $\mathcal{Y}_n(\Omega, \rho)$  con  $n=1, 2, 3, \dots$ , que una vez que hayan sido determinadas, pueden servir para obtener  $\Psi$  en la forma

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} R_n(\rho) \mathcal{Y}_n(\Omega, \rho), \quad (3.49)$$

con  $R_n(\rho)$  la parte radial y  $\mathcal{Y}_n(\Omega, \rho)$  la parte angular de la función de onda, además las  $R_n$  se deducen substituyendo en (3.43), multiplicando a la izquierda por  $\mathcal{Y}_n^*(\Omega, \rho)$  e integrando sobre los 5 ángulos  $\Omega$ . Así se llega a:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2} \left( \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) R_n(\rho) + \sum_{n'} \left\{ -\frac{dR_n(\rho)}{d\rho} \left[ \gamma_n, \frac{d\gamma_{n'}}{d\rho} \right] - \frac{1}{2} R_n(\rho) \left[ \gamma_n, \frac{d^2\gamma_{n'}}{d\rho^2} \right] \right. \\
 & \left. - \frac{5}{2\rho} R_n(\rho) \left[ \gamma_n, \frac{d\gamma_{n'}}{d\rho} \right] \right\} + U_n(\rho) R_n(\rho) = ER_n(\rho). \quad (3.50)
 \end{aligned}$$

La ec. (3.48a) no tiene soluciones exactas conocidas, por lo cual se han obtenido<sup>15</sup> soluciones aproximadas para estados <sup>1</sup>S del átomo en la forma

$$\gamma_n(\Omega, \rho) = \sum_{\lambda=0}^{\lambda=\lambda_{\max}} \sum_{\nu} a_{\lambda\nu}^{(n)}(\rho) Y_{\lambda\nu}^{sim}(\Omega). \quad (3.51)$$

Substituyendo en (3.48a) se obtiene una ecuación secular standard cuyas raíces dan  $U_n(\rho)$  y sus eigenvectores tienen por componentes las  $a_{\lambda\nu}^{(n)}(\rho)$ .

El sistema de ecuaciones diferenciales acopladas (3.50) es más complicado que el (3.44)

## CAPITULO 4

## CONCLUSIONES

El objetivo de este trabajo fué ilustrar una aplicación del sistema de coordenadas de Zickendraht-Dzublik et al<sup>36</sup> en el problema físico de la estructura de un átomo de 2 electrones. El análisis estuvo restringido al cálculo de la energía del estado base por un método variacional. Además en el hamiltoniano atómico utilizado se incluyeron solamente la energía cinética de los electrones y las interacciones electrostáticas, omitiendo una serie de términos que producen pequeñas correcciones a la energía y que describen procesos físicos tales como el movimiento del núcleo, la variación relativista de la masa de los electrones, interacciones entre momentos magnéticos, etc. El operador considerado aquí comúnmente se designa como el hamiltoniano no-relativista.

El cálculo variacional de la energía del estado base del He es un tema que ha sido investigado prácticamente desde el nacimiento de la mecánica cuántica; fué implementado por primera vez por Kellner<sup>14</sup> en 1927. Un procedimiento de análisis que ha conducido a excelentes resultados, introducido por Hylleraas<sup>13</sup> en 1929 consiste en proponer como función de prueba para el cálculo variacional a  $\psi = e^{-\frac{1}{2}ksP}$ , donde P es un polinomio en las 3 variables

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_2 - r_1, \quad u = r_{12}. \quad (4.1)$$

Con este tipo de funciones se logra una convergencia rápida del valor calculado de E hacia el eigenvalor teóricamente exacto del hamiltoniano.

Como ejemplo, Frankowski<sup>9</sup> reporta el resultado de un cálculo en donde P consta de 101 términos que además de potencias de s, t, u incluyen también potencias de  $\rho$  y de  $\ln s$ ; el eigenvalor de la energía obtenido es

$$E = -2.903724376 \text{ (u.a.)}, \quad (4.2a)$$

mientras que el valor estimado como teóricamente exacto y obtenido por extrapolación, es

$$E = -2.903724377 \text{ (u.a.)}. \quad (4.2b)$$

El uso de bases completas de funciones para construir la matriz del hamiltoniano respecto a ellas, también ha sido investigado previamente, comúnmente se le conoce como el método de interacción de configuraciones. Probablemente el intento más elaborado en esta dirección es el de Pekeris<sup>25</sup>, quien utiliza 3 coordenadas  $u, v, w$  llamadas "coordenadas perimétricas", definidas por

$$u = (r_{12} + r_2 - r_1), \quad v = (r_{12} + r_1 - r_2), \quad w = (2r_1 + 2r_2 - 2r_{12}), \quad (4.3)$$

cuyo dominio es  $0 \leq u, v, w \leq \infty$ , y toma como base el sistema de funciones

$$e^{-k(u+v+w)} L_l(u) L_m(v) L_n(w), \quad (4.4)$$

donde  $L_r$  son polinomios ordinarios de Laguerre. Con una matriz hamiltoniana de dimensión 125, construida respecto a la base (4.4), Pekeris<sup>25</sup> reporta el eigenvalor

$$E = -2.903723878 \text{ (u.a.)}, \quad (4.5a)$$

mientras que con una matriz de dimensión 1078 obtiene

$$E = -2.903724375 \text{ (u.a.)}. \quad (4.5b)$$

Comparando estos resultados con los obtenidos en nuestro análisis y reportados en el Cap. 3, tenemos que admitir que la convergencia del

eigenvalor calculado hacia el valor exacto es más lenta en la base discutida en este trabajo. La explicación más probable para este comportamiento es la forma asintótica de la función de onda en nuestro análisis, la cual tiende a cero en el infinito según

$$e^{-\frac{1}{2}\beta\rho} = e^{-\frac{1}{2}\beta(r_1^2+r_2^2)^{\frac{1}{2}}}$$

mientras que en los trabajos de todos los autores mencionados previamente, la función de onda tiende a cero según  $e^{-k(r_1+r_2)}$ . Nótese que

$$e^{-k(r_1+r_2)} \equiv e^{-2^{-\frac{1}{2}}k\rho(\sqrt{1+\cos 2\gamma\cos 2\alpha} + \sqrt{1-\cos 2\gamma\cos 2\alpha})}, \quad (4.6)$$

y esta función tiene un desarrollo muy complicado en la base utilizada en este trabajo. La ventaja de las bases que consisten de sistemas ortonormales de funciones es que permiten obtener expresiones analíticas para los elementos de la matriz hamiltoniana, y eventualmente, como en esta tesis, las expresiones no son tan difíciles de computar numéricamente.

Vale la pena hacer algunos comentarios sobre la forma en que aparece el parámetro  $\beta$  en las fórmulas para los elementos de matriz del hamiltoniano, ecuación (3.22). Recordemos que  $\beta$  se introdujo al relacionar la variable adimensional  $x$  con el hiper-radio  $\rho$ , ecuación (1.15c):

$$x = \beta\rho, \quad (4.7)$$

y por lo tanto,  $\beta$  tiene dimensiones de (longitud)<sup>-1</sup>. Este tipo de coeficientes se conocen con el nombre de parámetros de escala. El operador de la energía cinética  $\hat{T}$  tiene términos como  $\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}$  el cual debe re-escribirse como  $\beta^2 \frac{\partial^2}{\partial(\beta\rho)^2}$  al hacerlo actuar sobre la función de onda cuyas variables son adimensionales; por lo tanto los elementos de

matriz de  $\hat{T}$  portan un coeficiente  $\beta^2$  como se vé en [3.22]. Análogamente, la energía potencial  $V$  tiene términos como

$\frac{1}{r_1} = \frac{1}{\rho\sqrt{1+\cos 2\gamma\cos 2\alpha}}$  el cual debe re-escribirse como  $\frac{\beta}{(\beta\rho)\sqrt{1+\cos 2\gamma\cos 2\alpha}}$ , y después de efectuar la integración sobre variables adimensionales es evidente que los elementos de matriz de  $\hat{V}$  quedan con un coeficiente  $\beta$  tal como aparecen en (3.22).

Los parámetros de escala en las funciones de onda tienen cierta conexión con un teorema llamado "Teorema Virial" <sup>26</sup>. Según este teorema, si  $\Psi$  es la eigenfunción exacta del hamiltoniano  $\hat{H} \equiv \hat{T} + \hat{V}$  del átomo de He, entonces

$$2(\Psi, \hat{T}\Psi) = (-1)(\Psi, \hat{V}\Psi). \quad (4.8)$$

Si los valores de expectación en (4.8) se calculan no con  $\Psi$  sino con una función de onda aproximada  $\psi^\beta$  que contiene un parámetro de escala  $\beta$ , tal como las funciones de onda obtenidas por un cálculo variacional en una base finita, entonces la ec. (4.8) no es válida para un valor arbitrario de  $\beta$ . Sin embargo, existe un valor particular de  $\beta$ , designado con  $\beta_0$ , y dado en términos de una  $\beta$  arbitraria, por

$$\beta_0 \equiv \beta \frac{(-1)(\psi^\beta, \hat{V}\psi^\beta)}{2(\psi^\beta, \hat{T}\psi^\beta)}, \quad (4.9)$$

con el cual se satisface el teorema virial y además  $\beta_0$  es el valor del parámetro de escala que produce la mejor aproximación variacional a la energía del estado base <sup>26</sup>. Esta energía óptima es

$$E_{\text{opt}} = - \frac{(\psi^{\beta_0}, \hat{V}\psi^{\beta_0})^2}{4(\psi^{\beta_0}, \hat{T}\psi^{\beta_0})}. \quad (4.10)$$

En nuestro cálculo el valor óptimo de  $\beta$  se obtuvo considerando una serie de valores contiguos de  $\beta$ , hasta encontrar aquel que produce la menor energía.

En estas líneas finales el autor desearía resumir lo que en su opinión son los aspectos mas relevantes de esta tesis.

i) El hecho de que respecto a la base elegida en este trabajo los elementos de matriz de interacciones de 1 y 2 cuerpos son esencialmente proporcionales entre sí. Hay que notar que esta propiedad la tienen también todas aquellas bases que cuando se expresan en términos de operadores de creación consisten de polinomios de grados definidos en los operadores  $\alpha$ ,  $\beta$  introducidos en la Sección 1.c; el hecho es, por lo tanto, independiente del sistema de coordenadas Z-D.

ii) Las funciones hiperradiales elegidas  $R_s^\mu(\rho)$ , por una parte simplifican la matriz de la energía potencial ya que dan origen a una delta de Kronecker  $\delta_{ss'}$ , por otra parte causan la aparición en la matriz de la energía cinética del término ( $s' \leq s$ )

$$\frac{1}{8} \beta^{2\lambda} (\lambda+4) \left( \frac{(s'+1)(s'+2)(s'+3)(s'+4)}{(s+1)(s+2)(s+3)(s+4)} \right)^{\frac{1}{2}} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\nu\nu'}$$

que afortunadamente es relativamente sencillo y no da origen a una matriz densa debido a las deltas de Kronecker en los índices angulares. La matriz hamiltoniana completa se puede considerar como poco densa ("sparse").

iii) El aspecto negativo que hay que reconocer es que la base no posee el factor exponencial  $e^{-k(r_1+r_2)}$  que tiene la función de onda exacta en

la región asintótica lejos del núcleo, esto requiere la superposición de muchos términos de la base para aproximar la función exacta, originando una lenta convergencia del cálculo algebraico en función de la dimensión de la base.

## APENDICE A

### OPERADOR DE ENERGIA CINETICA EN COORDENADAS DE ZICKENDRAHT-DZUBLIK

a.- Definición de las Coordenadas de Zickendraht-Dzublik et al.

El *conjunto* de coordenadas angulares  $(\gamma, \alpha, \theta_1, \theta_2, \theta_3)$  que son de interés en relación a una teoría microscópica de movimientos colectivos está definido por las fórmulas de transformación:

$$x_i^s = \sum_{k=1}^2 \rho_k D_{ki}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) d_{ks}(\alpha), \quad \begin{matrix} i=1,2,3 \\ s=1,2, \end{matrix} \quad (A1)$$

donde definimos

$$\rho_1 = \rho \cos \gamma, \quad \rho_2 = \rho \sin \gamma, \quad 0 \leq \gamma \leq \frac{1}{2}\pi, \quad (A2)$$

como si fuera la relación de coordenadas cartesianas a polares en el plano.

Además  $D(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$  es una matriz de rotación de  $3 \times 3$ , que especifica por medio de los ángulos de Euler  $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ , la orientación relativa de un sistema intrínseco con respecto al sistema de laboratorio. Tal matriz está dada en la página 152 de Rutherford<sup>29</sup> con la notación:

$$\phi = \theta_1, \quad \theta = \theta_2, \quad \psi = \theta_3,$$

y  $d(\alpha)$  es la matriz de rotaciones en un plano cuya forma explícita es

$$d(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}. \quad (A3)$$

b.- Expresión Clásica de la Energía Cinética T de dos partículas de masa = 1.

Dicha expresión esta dada por

$$2T = \sum_{s=1}^2 \sum_{i=1}^3 \dot{x}_i^s \dot{x}_i^s, \quad (\text{A4})$$

De acuerdo con (A1)

$$\dot{x}_i^s = \sum_k \left\{ \rho_k^s D_{ki} \dot{D}_{ks} + \rho_k^s \dot{D}_{ki} D_{ks} + \rho_k^s D_{ki} \dot{D}_{ks} \right\}, \quad (\text{A5})$$

y usando la expresión (59.19) de Corben<sup>s</sup>, es decir:

$$\dot{D}_{lk} = \epsilon_{ilm} \omega'_m D_{lk} \quad (3 \text{ dim.}), \quad \dot{D}_{ik} = \epsilon_{i13} \alpha \dot{D}_{lk} \quad (2 \text{ dim.}), \quad (\text{A6})$$

con  $\omega'_m$  y  $\alpha$  como velocidades angulares referidas al sistema intrínseco y sustituyendo (A6) en (A5) tenemos que:

$$\dot{x}_i^s = \sum_k \left\{ \rho_k^s D_{ki} \dot{D}_{ks} + \epsilon_{klm} \rho_k^s \omega'_m D_{li} \dot{D}_{ks} + \epsilon_{kls} \rho_k^s \alpha D_{ki} \dot{D}_{ls} \right\}, \quad (\text{A7})$$

Además sustituyendo la ec. (A7) en la ec. (A4), usando la ortogonalidad de las  $D$  y las  $\dot{D}$ , y el tensor de Levi-Civita

$$\epsilon_{klm} = \begin{cases} 1 & \text{si } (klm) \text{ es una permutación par de } (123) \\ -1 & \text{si dicha permutación es impar} \\ 0 & \text{si al menos dos subíndices son iguales} \end{cases} \quad (\text{A8})$$

obtenemos:

$$2T = \rho_k \rho_k + (\rho_1^2 + \rho_2^2) (\omega'_3)^2 + \rho_1^2 (\omega'_2)^2 + \rho_2^2 (\omega'_1)^2 + (\rho_1^2 + \rho_2^2) \alpha^2 - 2(\rho_1 \rho_2 + \rho_2 \rho_1) (\omega'_3) \alpha. \quad (\text{A9})$$

Como  $\rho_1 \rho_2 = \rho_2 \rho_1$  y usando la ec. (A2), tenemos finalmente la expresión clásica de la energía cinética:

$$2T = \rho^2 + \rho^2 [\dot{\gamma}^2 + (\omega'_3)^2 + (\omega'_2)^2 \cos^2 \gamma + (\omega'_1)^2 \sin^2 \gamma + \alpha^2 - 2\alpha \omega'_3 \sin 2\gamma]. \quad (\text{A10})$$

### c.- Expresión Contravariante de la Energía Cinética.

La expresión contravariante<sup>30</sup> de la energía cinética es

$$2T = \sum_{\mu, \nu=1}^6 g^{\mu\nu} P_\mu P_\nu. \quad (\text{A11})$$

Para poder expresar la ec. (A10) en términos de la ec. (A11)

necesitamos utilizar la expresión

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q}} = P_q, \quad (\text{A12})$$

para los momentos canónicos conjugados, y la expresión 24.10 de Sommerfeld<sup>31</sup>, es decir

$$\frac{\partial T}{\partial \omega'_i} = L'_i, \quad (\text{A13})$$

para los momentos angulares  $L'_i$  referidos al sistema intrínseco.

Con lo cual:

$$P_\rho = \dot{\rho}, \quad P_\gamma = \rho^2 \dot{\gamma}, \quad P_\alpha = \rho^2 (\dot{\alpha} - \omega'_3 \text{sen} 2\gamma),$$

$$L'_1 = \rho^2 \omega'_1 \text{sen}^2 \gamma, \quad L'_2 = \rho^2 \omega'_2 \text{cos}^2 \gamma, \quad L'_3 = (\omega'_3 - \dot{\alpha} \text{sen} 2\gamma) \rho^2.$$

Ahora bien, obteniendo las inversas de estas relaciones y sustituyendo en la ec. (A10) encontramos que

$$2T = P_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2} \left\{ P_\gamma^2 + \frac{L'^2_1}{\text{sen}^2 \gamma} + \frac{L'^2_2}{\text{cos}^2 \gamma} + \frac{1}{\text{cos}^2 2\gamma} \left[ L'^2_3 \text{sen}^2 2\gamma + P_\alpha^2 + 2P_\alpha L'_3 \text{sen} 2\gamma \right. \right. \\ \left. \left. - 2\text{sen} 2\gamma (L'^2_3 \text{sen} 2\gamma + L'_3 P_\alpha \text{sen}^2 2\gamma + P_\alpha L'_3 + P_\alpha^2 \text{sen} 2\gamma) \right. \right. \\ \left. \left. + L'^2_3 + P_\alpha^2 \text{sen}^2 2\gamma + 2P_\alpha L'_3 \text{sen} 2\gamma \right] \right\}. \quad (\text{A14})$$

Simplificando finalmente llegamos a

$$2T = P_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2} \left\{ P_\gamma^2 + \frac{1}{\text{cos}^2 2\gamma} \left[ P_\alpha^2 + L'^2_3 + 2P_\alpha L'_3 \text{sen} 2\gamma \right] + \frac{L'^2_1}{\text{sen}^2 \gamma} + \frac{L'^2_2}{\text{cos}^2 \gamma} \right\} \quad (\text{A15})$$

Pero además sabemos que<sup>29</sup>

$$\begin{pmatrix} L'_1 \\ L'_2 \\ L'_3 \end{pmatrix} = \underset{\sim}{S} \begin{pmatrix} P_{\theta_1} \\ P_{\theta_2} \\ P_{\theta_2} \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \underset{\sim}{S} = \begin{pmatrix} -\frac{\text{cos} \theta_3}{\text{sen} \theta_2} & \text{sen} \theta_3 & \text{cot} \theta_2 \text{cos} \theta_3 \\ \frac{\text{sen} \theta_3}{\text{sen} \theta_2} & \text{cos} \theta_3 & -\text{cot} \theta_2 \text{sen} \theta_3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A16})$$

y sustituyendo se obtiene:

$$\begin{aligned}
 2T = & P_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2} P_\gamma^2 + \frac{1}{\rho^2 \cos^2 2\gamma} P_\alpha^2 + \frac{2 \operatorname{sen} 2\gamma}{\rho^2 \cos^2 2\gamma} P_\alpha P_{\theta_3} + \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{11}^2}{\operatorname{sen}^2 \gamma} + \frac{S_{21}^2}{\cos^2 \gamma} \right) P_{\theta_1}^2 \\
 & + \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{12}^2}{\operatorname{sen}^2 \gamma} + \frac{S_{22}^2}{\cos^2 \gamma} \right) P_{\theta_2}^2 + \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{1}{\cos^2 2\gamma} + \left( \frac{S_{13}^2}{\operatorname{sen}^2 \gamma} + \frac{S_{23}^2}{\cos^2 \gamma} \right) \right) P_{\theta_3}^2 \\
 & + \frac{2}{\rho^2} \left( \frac{S_{11} S_{12}}{\operatorname{sen}^2 \gamma} + \frac{S_{21} S_{22}}{\cos^2 \gamma} \right) P_{\theta_1} P_{\theta_2} + \frac{2}{\rho^2} \left( \frac{S_{11} S_{13}}{\operatorname{sen}^2 \gamma} + \frac{S_{21} S_{23}}{\cos^2 \gamma} \right) P_{\theta_1} P_{\theta_3} \\
 & + \frac{2}{\rho^2} \left( \frac{S_{12} S_{13}}{\operatorname{sen}^2 \gamma} + \frac{S_{22} S_{23}}{\cos^2 \gamma} \right) P_{\theta_2} P_{\theta_3}, \tag{A17}
 \end{aligned}$$

donde las  $S_{ij}$  con  $i=j=1,2,3$  son las componentes de la matriz  $\underline{S}$ .

Ahora, identificando

$$\begin{array}{ll}
 1 \longrightarrow \rho, & 4 \longrightarrow \theta_1, \\
 2 \longrightarrow \gamma, & 5 \longrightarrow \theta_2, \\
 3 \longrightarrow \alpha, & 6 \longrightarrow \theta_3,
 \end{array}$$

podemos encontrar fácilmente las componentes  $g^{\mu\nu}$  de la ec. (A11).

#### d.- Operador de Energía Cinética de Laplace-Beltrami<sup>22</sup>.

Dicho operador ha sido ampliamente utilizado en la mecánica cuántica, y esta dado por la ec. 6, página 129 de Eisenberg<sup>9</sup>, es decir,

$$2T = -\frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial q^\mu} \sqrt{g} g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial q^\nu}, \tag{A18}$$

con

$$g^{-1} = \det | g^{\mu\nu} |. \tag{A19}$$

Las componentes del tensor  $g^{\mu\nu}$  se deducen de la ec. (A17), por lo tanto

$$g^{\mu\nu} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho^2 \cos^2 2\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\sin 2\gamma}{\rho^2 \cos^2 2\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{11}^2}{\sin^2 \gamma} + \frac{S_{21}^2}{\cos^2 \gamma} \right) & \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{11} S_{12}}{\sin^2 \gamma} + \frac{S_{21} S_{22}}{\cos^2 \gamma} \right) & \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{11} S_{13}}{\sin^2 \gamma} + \frac{S_{21} S_{23}}{\cos^2 \gamma} \right) \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{11} S_{12}}{\sin^2 \gamma} + \frac{S_{21} S_{22}}{\cos^2 \gamma} \right) & \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{12}^2}{\sin^2 \gamma} + \frac{S_{22}^2}{\cos^2 \gamma} \right) & \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{12} S_{13}}{\sin^2 \gamma} + \frac{S_{22} S_{23}}{\cos^2 \gamma} \right) \\ 0 & 0 & \frac{\sin 2\gamma}{\rho^2 \cos^2 2\gamma} & \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{11} S_{13}}{\sin^2 \gamma} + \frac{S_{21} S_{23}}{\cos^2 \gamma} \right) & \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{S_{12} S_{13}}{\sin^2 \gamma} + \frac{S_{22} S_{23}}{\cos^2 \gamma} \right) & \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{1}{\cos^2 2\gamma} + \left( \frac{S_{13}^2}{\sin^2 \gamma} + \frac{S_{23}^2}{\cos^2 \gamma} \right) \right) \end{vmatrix},$$

al desarrollar el determinante obtenemos:

$$g^{-1} = \frac{4}{\rho^{10} \sin^2 \theta_2 \cos^2 2\gamma \sin^2 \gamma} = \frac{16}{\rho^{10} \sin^2 \theta_2 \sin^2 4\gamma}.$$

De manera que

$$g = \frac{1}{16} \rho^{10} \sin^2 \theta_2 \sin^2 4\gamma. \quad (\text{A20})$$

Sustituyendo en la ec. (A.18) obtenemos:

$$\hat{T} = - \frac{1}{\rho^5 \sin 4\gamma \sin \theta_2} \sum_{\mu, \nu=1}^6 \frac{\partial}{\partial q^\mu} \rho^5 \sin 4\gamma \sin \theta_2 g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial q^\nu}. \quad (\text{A21})$$

Por lo tanto, desarrollando la sumatoria obtenemos:

$$\begin{aligned} \hat{T} = & - \frac{1}{\rho^3} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^5 \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2 \sin 4\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 4\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} - \frac{1}{\rho^2 \cos^2 2\gamma} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \\ & - \frac{2 \sin 2\gamma}{\rho^2 \cos^2 2\gamma} \frac{\partial^2}{\partial \theta_3 \partial \alpha} + \frac{1}{\rho^2 \sin \theta_2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial}{\partial \theta_i} \sin \theta_2 g^{\theta_i \theta_j} \frac{\partial}{\partial \theta_j}, \end{aligned} \quad (\text{A22})$$

donde la última suma es la contribución de los términos, que contienen derivadas respecto a los ángulos de Euler. Sin embargo un cálculo elemental aunque un poco largo, nos lleva a la conclusión de que estos términos se pueden expresar en función de los operadores del momento angular referidos al sistema intrínseco:  $\hat{L}'_i$ , cuya definición es (ver página 96 de Eisenberg<sup>8</sup>):

$$\begin{pmatrix} \hat{L}'_1 \\ \hat{L}'_2 \\ \hat{L}'_3 \end{pmatrix} = \underset{\sim}{S} \begin{pmatrix} -i \frac{\partial}{\partial \theta_1} \\ -i \frac{\partial}{\partial \theta_2} \\ -i \frac{\partial}{\partial \theta_3} \end{pmatrix}, \quad (\text{A23})$$

siendo  $\underset{\sim}{S}$  la matriz dada en la ec. (A16). De esta manera la expresión (A22) finalmente se transforma en

$$\begin{aligned} 2\hat{T} = & \frac{1}{\rho^3} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^5 \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2 \text{sen} 4\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \text{sen} 4\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} - \frac{1}{\rho^2 \text{cos}^2 2\gamma} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{2 \text{sen} 2\gamma}{\rho^2 \text{cos}^2 2\gamma} \frac{\partial^2}{\partial \theta_3 \partial \alpha} \\ & + \frac{1}{\rho^2 \text{sen}^2 \gamma} \hat{L}'^2_1 + \frac{1}{\rho^2 \text{cos}^2 \gamma} \hat{L}'^2_2 + \frac{1}{\rho^2 \text{cos}^2 2\gamma} \hat{L}'^2_3, \end{aligned} \quad (\text{A24})$$

que es la expresión cuántica para la energía cinética.

e.- Elemento de Volumen asociado con el tensor  $g^{\mu\nu}$ .

Dicho elemento de volumen está dado por<sup>32</sup>

$$dV = \sqrt{g} \prod_{i=1}^6 dq^i, \quad (\text{A25})$$

usualmente en coordenadas hipersféricas de n-dimensiones se expresa como  $dV = \rho^{n-1} d\rho d\Omega$ .

Por tanto, para nuestro sistema en coordenadas de Zickendraht-Dzublik, obtenemos:

$$dV = dr = \sqrt{g} d\rho dy da d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3, \quad (\text{A26})$$

$$dr = \rho^5 d\rho d\Omega, \quad d\Omega = \text{sen} \theta_2 \text{sen} 4\gamma dy da d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3, \quad (\text{A27})$$

donde hemos suprimido un factor numérico (1/4) irrelevante. El dominio de cada variable es:

$$\begin{aligned} 0 \leq \rho \leq \infty, \quad 0 \leq \gamma \leq \frac{\pi}{4}, \quad 0 \leq \alpha \leq 2\pi, \\ 0 \leq \theta_1 \leq 2\pi, \quad 0 \leq \theta_2 \leq \pi, \quad 0 \leq \theta_3 \leq 2\pi. \end{aligned}$$

f.- Soluciones de  $\Lambda^2 Y = \lambda(\lambda+4)Y$ .

La ec. (A24) la podemos expresar como:

$$2T = -\frac{1}{\rho^5} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^5 \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \Lambda^2, \quad (\text{A28})$$

donde  $\Lambda^2$  es el operador definido por:

$$\begin{aligned} \Lambda^2 = & -\frac{1}{\text{sen}4\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \text{sen}4\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} - \frac{1}{\text{cos}^2 2\gamma} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{2\text{sen}2\gamma}{\text{cos}^2 2\gamma} \frac{\partial^2}{\partial \theta_3 \partial \alpha} + \frac{1}{\text{sen}^2 \gamma} \hat{L}'^2_1 \\ & + \frac{1}{\text{cos}^2 \gamma} \hat{L}'^2_2 + \frac{1}{\text{cos}^2 2\gamma} \hat{L}'^2_3. \end{aligned} \quad (\text{A29})$$

Este operador juega en 6 dimensiones el mismo papel que el operador de momento angular  $\hat{L}'_1 \cdot \hat{L}'_1$  juega en 3, es decir,  $\Lambda^2$  es el operador de Casimir de un grupo  $O(6)$ .

Por otra parte, está mencionado en la ec. (4.11) de Chacón et al<sup>6</sup>, que eigenfunciones de  $\Lambda^2$  están dadas por

$$Y_{\lambda\nu qLM}(\Omega) = e^{i\nu\alpha} \sum_{K=-L}^{-L+\epsilon} D_{MK}^{L*}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \Gamma_K^{\lambda\nu qL}(\gamma), \quad (\text{A30})$$

Y la ecuación de eigenvalores de dicho operador, es la siguiente:

$$\Lambda^2 Y_{\lambda\nu qLM} = \lambda(\lambda+4) Y_{\lambda\nu qLM}. \quad (\text{A31})$$

Desarrollando (A31) y usando (A29) y (A30) encontramos

$$\begin{aligned} e^{i\nu\alpha} \sum_K \left\{ -\frac{1}{\text{sen}4\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \text{sen}4\gamma \frac{\partial \Gamma_K}{\partial \gamma} D_{MK}^{L*} + \left( \frac{\hat{L}'^2_1}{\text{sen}^2 \gamma} + \frac{\hat{L}'^2_2}{\text{cos}^2 \gamma} \right) D_{MK}^{L*} \Gamma_K + \right. \\ \left. \frac{1}{\text{cos}^2 2\gamma} \left[ \nu^2 + \hat{L}'^2_3 + 2\nu \hat{L}'_3 \text{sen}2\gamma \right] D_{MK}^{L*} \Gamma_K \right\} = \lambda(\lambda+4) e^{i\nu\alpha} \sum_K D_{MK}^{L*} \Gamma_K. \end{aligned} \quad (\text{A32})$$

Para simplificar la ec. (A32) hacemos uso de los operadores  $\hat{L}'_{\pm} \equiv \hat{L}'_1 \pm i\hat{L}'_2$  del momento angular de ascenso y descenso, es decir

$$\hat{L}'_1{}^2 = \frac{1}{2}(\hat{L}'_2{}^2 - \hat{L}'_3{}^2) + \frac{1}{2}(\hat{L}'_+{}^2 + \hat{L}'_-{}^2), \quad (\text{A33a})$$

$$\hat{L}'_2{}^2 = \frac{1}{2}(\hat{L}'_2{}^2 - \hat{L}'_3{}^2) - \frac{1}{2}(\hat{L}'_+{}^2 + \hat{L}'_-{}^2). \quad (\text{A33b})$$

Así como de las siguientes fórmulas para los operadores de momento angular  $\hat{L}'_+$  y  $\hat{L}'_-$  aplicados a la matriz de representación<sup>8</sup>

$$\hat{L}'_- D_{MK}^{L*} = \sqrt{(L-K)(L+K+1)} D_{M,K+1}^{L*}, \quad (\text{A33c})$$

$$\hat{L}'_+ D_{MK}^{L*} = \sqrt{(L+K)(L-K+1)} D_{M,K-1}^{L*}, \quad (\text{A33d})$$

$$\hat{L}'_+ D_{MK}^{L*} = \sqrt{(L+K)(L+K-1)(L-K+1)(L-K+2)} D_{M,K-2}^{L*} \equiv C_K^L D_{M,K-2}^{L*}, \quad (\text{A33e})$$

$$\hat{L}'_- D_{MK}^{L*} = \sqrt{(L-K)(L-K-1)(L+K+1)(L+K+2)} D_{M,K+2}^{L*} \equiv C_{-K}^L D_{M,K+2}^{L*}, \quad (\text{A33f})$$

$$\hat{L}'_3 D_{MK}^{L*} = K^2 D_{MK}^{L*}, \quad (\text{A33g})$$

$$\hat{L}'_2 D_{MK}^{L*} = L(L+1) D_{MK}^{L*}. \quad (\text{A33h})$$

Aplicando estos operadores al problema de eigenvalores (A31) la ec. (A32) se reduce a

$$\begin{aligned} e^{i\nu\alpha} \sum_K \left\{ \left[ -\frac{1}{\sin 4\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 4\gamma \frac{\partial \Gamma_K}{\partial \gamma} \right] D_{MK}^{L*} + \frac{1}{\sin^2 \gamma} \left( \frac{L(L+1) - K^2}{2} D_{MK}^{L*} + \right. \right. \\ \left. \frac{1}{2} C_K^L D_{M,K-2}^{L*} + \frac{1}{2} C_{-K}^L D_{M,K+2}^{L*} \right) \Gamma_K + \frac{1}{\cos^2 \gamma} \left( \frac{L(L+1) - K^2}{2} D_{MK}^{L*} - \frac{1}{2} C_K^L D_{M,K-2}^{L*} \right. \\ \left. - \frac{1}{2} C_{-K}^L D_{M,K+2}^{L*} \right) \Gamma_K + \frac{1}{\cos^2 2\gamma} (\nu^2 + K^2 + 2\nu K \sin 2\gamma) D_{MK}^{L*} \Gamma_K \} \\ = \lambda(\lambda+4) e^{i\nu\alpha} \sum_K D_{MK}^{L*} \Gamma_K. \quad (\text{A34}) \end{aligned}$$

Usando las relaciones

$$\frac{1}{\sin^2 \gamma} + \frac{1}{\cos^2 \gamma} = \frac{4}{\sin^2 2\gamma}; \quad \frac{1}{\sin^2 \gamma} - \frac{1}{\cos^2 \gamma} = \frac{4 \cos 2\gamma}{\sin^2 2\gamma}, \quad (\text{A35})$$

haciendo un corrimiento del índice mudo  $K$  y aprovechando que:

$$C_{K+2}^L \equiv C_{-K}^L \quad \text{y} \quad C_{-K+2}^L \equiv C_K^L,$$

podemos simplificar la ec. (A34) de la siguiente manera:

$$\sum_K \left\{ -\frac{1}{\text{sen}4\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \text{sen}4\gamma \frac{\partial \Gamma_K}{\partial \gamma} + \frac{1}{\text{sen}^2 2\gamma} \left[ 2(L(L+1)-K^2) \Gamma_K + \cos 2\gamma (C_{-K}^L \Gamma_{K+2} + C_K^L \Gamma_{K-2}) \right] + \frac{(\nu^2 + K^2 + 2\nu K \text{sen} 2\gamma)}{\cos^2 2\gamma} \Gamma_K - \lambda(\lambda+4) \Gamma_K \right\} D_{MK}^{L*} = 0. \quad (\text{A36})$$

También es sabido que para el caso de funciones ortonormales

$$\sum_K F_K(\gamma) D_{MK}^{L*} \equiv 0 \quad \implies \quad F_K(\gamma) = 0. \quad (\text{A37})$$

Por lo tanto, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, de segundo orden, acopladas, que determinan a las funciones  $\Gamma_K(\gamma)$ :

$$\frac{1}{\text{sen}4\gamma} \frac{d}{d\gamma} \text{sen}4\gamma \frac{d\Gamma_K}{d\gamma} - \frac{2[L(L+1)-K^2] \Gamma_K + \cos 2\gamma (C_{-K}^L \Gamma_{K+2} + C_K^L \Gamma_{K-2})}{\text{sen}^2 2\gamma} - \frac{(\nu^2 + K^2 + 2\nu K \text{sen} 2\gamma) \Gamma_K}{\cos^2 2\gamma} + \lambda(\lambda+4) \Gamma_K = 0, \quad (\text{A38})$$

con  $K = L+\epsilon, L+\epsilon-2, \dots, -L+\epsilon$ .

g.- Caso  $L=0$ .

Como  $L=0$ , entonces  $K=0$  y  $C_0^0 = 0$ . Por lo tanto (A38) se reduce a

$$\frac{1}{\text{sen}4\gamma} \frac{d}{d\gamma} \text{sen}4\gamma \frac{d\Gamma_0}{d\gamma} - \frac{\nu^2}{\cos^2 2\gamma} \Gamma_0 + \lambda(\lambda+4) \Gamma_0 = 0, \quad (\text{A39})$$

y haciendo  $4\gamma = \theta$  se tiene que

$$\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{d}{d\theta} \text{sen}\theta \frac{d\Gamma_0}{d\theta} - \frac{(\nu^2) \Gamma_0}{\cos^2 \frac{1}{2}\theta} + \frac{\lambda}{4} \left( \frac{\lambda}{4} + 1 \right) \Gamma_0 = 0 \quad \text{con} \quad \Gamma_0 = \Gamma_0(\theta). \quad (\text{A40})$$

Ahora bien, usando la expresión 170, página 123 de Eisenberg<sup>8</sup>, es decir:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta_2^2} + \cot \theta_2 \frac{\partial}{\partial \theta_2} + \frac{1}{\sin^2 \theta_2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta_3^2} \right) - \frac{2 \cos \theta_2}{\sin^2 \theta_2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_1 \partial \theta_3} + l(l+1) \right\} D_{m',m}^l(\theta_j) = 0, \quad (\text{A41})$$

o bien, si  $\theta_2 = \theta$  y tomando en cuenta que

$$D_{m',m}^l(\theta_j) = e^{-im'\theta_1} d_{m',m}^l(\theta) e^{-im\theta_3},$$

obtenemos:

$$\left\{ \frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} (m'^2 + m^2 - 2mm' \cos \theta) + l(l+1) \right\} d_{m',m}^l(\theta) = 0,$$

lo cual es idéntico a

$$\left\{ \frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \left[ \left( \frac{m'+m}{2} \right)^2 2(1-\cos \theta) + \left( \frac{m'-m}{2} \right)^2 2(1+\cos \theta) \right] + l(l+1) \right\} d_{m',m}^l(\theta) = 0. \quad (\text{A42})$$

Además, utilizando relaciones trigonométricas tenemos que

$$\frac{2}{\sin^2 \theta} (1-\cos \theta) = \frac{1}{\cos^2 \frac{1}{2}\theta}, \quad \frac{2}{\sin^2 \theta} (1+\cos \theta) = \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta}, \quad (\text{A43})$$

∴

$$\left\{ \frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{\frac{1}{4}(m'+m)^2}{\cos^2 \frac{1}{2}\theta} - \frac{\frac{1}{4}(m'-m)^2}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta} + l(l+1) \right\} d_{m',m}^l(\theta) = 0. \quad (\text{A44})$$

De manera que comparando la ec. (A44) con la ec. (A40) vemos que:

$$l = \frac{\lambda}{4}, \quad m' = m = \frac{\nu}{4} \quad \text{y} \quad \Gamma_0 = d_{m',m}^l(\theta). \quad (\text{A45})$$

Por lo tanto, las eigenfunciones de  $\Lambda^2$  con  $L=0$  son

$$Y_{\lambda\nu 0}(\Omega) = N e^{i\nu\alpha} d_{\frac{1}{4}\nu, \frac{1}{4}\nu}^{\frac{1}{4}\lambda}(4\gamma). \quad (\text{A46})$$

La constante de normalización  $N$  respecto al elemento de volumen  $d\Omega$  en (A27) se obtiene usando las relaciones (4.58c) y (4.59) de Rose<sup>28</sup>, ó sea

$$\int_0^\pi \sin\theta d_{m_1 m_2}^{j_1}(\theta) d_{m_1 m_2}^{j_2}(\theta) d\theta = \left( \frac{2}{2j_1+1} \right) \delta_{j_1 j_2}. \quad (\text{A47})$$

Entonces

$$1 = N^2 \int_0^{2\pi} \sin 4\gamma d_{\frac{1}{2}\nu \frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma) d_{\frac{1}{2}\nu \frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma) d\gamma \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^\pi \sin\theta_2 d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\theta_3$$

$$= N^2 \left( \frac{16\pi^3}{\lambda+2} \right),$$

es decir

$$N = \left( \frac{\lambda+2}{16\pi^3} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Y finalmente, las eigenfunciones normalizadas de  $\Lambda^2$  para  $L=0$  están dadas por

$$Y_{\lambda\nu 0}(\Omega) = \left( \frac{\lambda+2}{16\pi^3} \right)^{\frac{1}{2}} e^{i\nu\alpha} d_{\frac{1}{2}\nu \frac{1}{2}\nu}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma), \quad (\text{A48})$$

siendo los valores admisibles de los números cuánticos

$$\lambda = 0, 2, 4, \dots, \quad (\text{A49})$$

$$\nu = \lambda, \lambda-4, \lambda-8, \dots, -\lambda.$$

La ec. (A48) es comprobada por la Teoría de Grupos con la relación (4.11) de Chacón et al<sup>6</sup>.

#### h.- Caso $L=1$ .

Como la suma sobre  $K$  en la ec. (A30) va de  $K=L-\epsilon$  a  $K=-L+\epsilon$  en saltos de 2, y de las relaciones (3.12) y (3.14) de Chacón et al<sup>6</sup>, podemos concluir que: Si  $\lambda-L = \text{par}$ ,  $\epsilon=0$ , mientras que si  $\lambda-L = \text{impar}$ ,  $\epsilon=1$ . Se deduce que hay dos posibilidades en el caso de  $L=1$ :

1)  $\lambda$  impar.

Si  $\lambda$  es impar,  $\epsilon=0 \implies K = \pm 1$ .

De (A33e) y (A33f):  $C_1^1 = 2$ ,  $C_{-1}^1 = 0$ . Entonces, sustituyendo en la ec. (A38) obtenemos:

Para  $K = 1$

$$\frac{1}{\sin 4\gamma} \frac{d}{d\gamma} \sin 4\gamma \frac{d\Gamma_1}{d\gamma} + \frac{2\cos 2\gamma}{\sin^2 2\gamma} \Gamma_{-1} + \left\{ -\frac{2}{\sin^2 2\gamma} - \frac{\nu^2 + 1 + 2\nu \sin 2\gamma}{\cos^2 2\gamma} + \lambda(\lambda + 4) \right\} \Gamma_1 = 0. \quad (\text{A50a})$$

Para  $K = -1$

$$\frac{1}{\sin 4\gamma} \frac{d}{d\gamma} \sin 4\gamma \frac{d\Gamma_{-1}}{d\gamma} + \frac{2\cos 2\gamma}{\sin^2 2\gamma} \Gamma_1 + \left\{ -\frac{2}{\sin^2 2\gamma} - \frac{\nu^2 + 1 - 2\nu \sin 2\gamma}{\cos^2 2\gamma} + \lambda(\lambda + 4) \right\} \Gamma_{-1} = 0. \quad (\text{A50b})$$

Como vemos las ecs. (A50) forman un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, y no se pueden resolver por los métodos más comunes, por lo que empleando técnicas de Teoría de Grupos<sup>6</sup> se obtiene la solución que mencionaremos a continuación.

Tenemos dos posibilidades para el índice de multiplicidad  $q$ :

$$q = \frac{\lambda - \nu - 2}{4} \quad \text{y} \quad q = \frac{\lambda - \nu}{4} \quad (\text{A51})$$

que se obtuvieron de analizar la ecuación (3.12) de Chacón et al<sup>6</sup>, y con esto queda bien definido en términos de los números cuánticos  $\lambda$ ,  $\nu$ , es decir, se elimina la multiplicidad.

Empleando las ecuaciones (4.11), (4.12), (4.13) y (4.14) de Chacón et al<sup>6</sup>, se obtienen las siguientes soluciones de las ecs. (A50):

Si  $q = \frac{\lambda - \nu - 2}{4}$  entonces

$$\Gamma_K^{\lambda\nu 1}(\gamma) = (K\cos\gamma + \sin\gamma) F_0^{\lambda\nu}(\gamma) + (-K\cos\gamma + \sin\gamma) F_1^{\lambda\nu}(\gamma), \quad (\text{A52a})$$

donde

$$F_{l_1}^{\lambda\nu}(\gamma) = \sum_{\sigma} \frac{(-)^{\sigma} \left( \frac{\lambda+1}{2} - l_1 - \sigma \right)! (\cos 2\gamma)^{\frac{1}{2}(\lambda-1) - l_1 - 2\sigma}}{\sigma! \left( \frac{\lambda-\nu}{4} - \frac{1}{2} - \sigma \right)! \left( \frac{\lambda+\nu}{4} - l_1 - \sigma \right)!},$$

y si  $q = \frac{1}{2}(\lambda - \nu)$  entonces

$$\Gamma_K^{\lambda\nu, 1}(\gamma) = (K\cos\gamma + \text{sen}\gamma)F_0^{\lambda\nu}(\gamma) + (-K\cos\gamma + \text{sen}\gamma)F_1^{\lambda\nu}(\gamma), \quad (\text{A52b})$$

donde

$$F_{l_1}^{\lambda\nu}(\gamma) = \sum_{\sigma} \frac{(-)^{\sigma} \left(\frac{\lambda-1}{2} + l_1 - \sigma\right)! (\cos 2\gamma)^{\frac{1}{2}(\lambda-1) - l_1 - 1 - 2\sigma}}{\sigma! \left(\frac{\lambda-\nu}{4} + l_1 - 1 - \sigma\right)! \left(\frac{\lambda + \nu - 2}{4} - \sigma\right)!}.$$

Se puede comprobar por sustitución directa, que efectivamente, las ecs. (A52) son soluciones de las ecs. (A50). Los valores que puede tomar  $\nu$  se deducen de las expresiones para  $\check{F}(\gamma)$  y  $F(\gamma)$ . Cuando se usa  $\check{F}(\gamma) \rightarrow \nu = \lambda - 2, \lambda - 6, \lambda - 10, \dots, -\lambda$ ; pero cuando se usa  $F(\gamma) \rightarrow \nu = \lambda, \lambda - 4, \lambda - 8, \dots, -\lambda + 2$ .

Las ecs. (A52) también nos sirven para normalizar. La integral de normalización es

$$\int Y_{\lambda\nu qLM}^*(\Omega) Y_{\lambda\nu qLM}(\Omega) d\Omega = 1, \quad (\text{A53})$$

donde  $Y_{\lambda\nu qLM}(\Omega)$  está dado por la relación (4.11) de Chacón et al<sup>6</sup>, y está dada en la ec. (A27). Explícitamente tenemos:

$$\sum_{K'} \sum_{K''} |A|^2 \int_0^{2\pi} e^{-i(\nu-\nu)\alpha} d\alpha |B|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} D_{MK}^{L*}(\theta_i) D_{MK'}^L(\theta_i) \text{sen}\theta_2 d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3$$

$$|N^{\lambda\nu}|^2 \int_0^{\frac{1}{2}\pi} \Gamma_{K'}^{\lambda\nu qL} \Gamma_K^{\lambda\nu qL} \text{sen} 2\gamma \cos 2\gamma d\gamma = 1. \quad (\text{A54})$$

La integral sobre  $\alpha$  es trivial y nos dá  $A = (2\pi)^{-\frac{1}{2}}$ , para encontrar  $|B|^2$  usamos la fórmula (4.60) de Rose<sup>28</sup> de la cual se deduce que  $K'$  debe ser igual a  $K$  y que  $B = [3/8\pi^2]^{\frac{1}{2}}$ , y para encontrar  $|N^{\lambda\nu}|^2$  la ec. (A52b) se pone en términos de polinomios de Jacobi<sup>1,2,3</sup>. Por lo tanto, las eigenfunciones de  $\Lambda^2$  normalizadas para  $L=1$  y  $\lambda$  impar son:

Si  $q = \frac{1}{2}(\lambda - \nu)$  entonces

$$Y_{\lambda\nu}{}^{1M}(\Omega) = \left(\frac{3}{4\pi^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\nu\alpha} \sum_{k=1, -1} D_{MK}^{1*}(\theta_i) \frac{1}{\sqrt{\lambda + \nu + 2}} \Gamma_K^{\lambda\nu}(\gamma), \quad (\text{A55})$$

y los valores admisibles de  $\nu$  son  $\nu = \lambda, \lambda - 4, \lambda - 8, \dots, -\lambda + 2$ .

Por otra parte, de las definiciones de  $F^*(\gamma)$  y  $F(\gamma)$  se puede comprobar que  $F_{1,1}^{\lambda\nu}(\gamma) \equiv F_{1,-1}^{\lambda, -\nu}(\gamma)$  lo cual implica, según (A52a) y (A52b), que

$$F_K^{\lambda\nu}(\gamma) \equiv \Gamma_{-K}^{\lambda, -\nu}(\gamma).$$

En consecuencia, los restantes armónicos hipersféricos de  $L=1$ ,  $\lambda$  impar,  $q = \frac{1}{2}(\lambda - \nu - 2)$  son

$$Y_{\lambda\nu}{}^{1M}(\Omega) = \left(\frac{3}{4\pi^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\nu\alpha} \sum_{k=1, -1} D_{MK}^{1*}(\theta_i) \frac{1}{\sqrt{\lambda - \nu + 2}} \Gamma_{-K}^{\lambda, -\nu}(\gamma), \quad (\text{A56})$$

donde los valores admisibles de  $\nu$  son  $\nu = \lambda - 2, \lambda - 6, \lambda - 10, \dots, -\lambda$ .

ii)  $\lambda$  par.

Si  $\lambda$  es par,  $\epsilon = 1 \implies K=0, C_0^1=0$  y la ec. (A38) se reduce a

$$\frac{1}{\sin 4\gamma} \frac{d}{d\gamma} \sin 4\gamma \frac{d\Gamma_0}{d\gamma} - \left[ \frac{4}{\sin^2 2\gamma} + \frac{\nu^2}{\cos^2 2\gamma} - \lambda(\lambda + 4) \right] \Gamma_0 = 0, \quad (\text{A57})$$

haciendo  $4\gamma = \theta$  tenemos

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d\Gamma_0}{d\theta} - \left[ \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta} + \frac{(\frac{1}{2}\nu)^2}{\cos^2 \frac{1}{2}\theta} \right] \Gamma_0 + \frac{\lambda}{4} \left( \frac{\lambda}{4} + 1 \right) \Gamma_0 = 0, \quad (\text{A58})$$

con  $\Gamma_0 = \Gamma_0(\theta)$ . Que también podemos expresar como:

$$\left\{ \frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{(\frac{1}{2}\nu)^2}{\cos^2 \frac{1}{2}\theta} - \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta} + \frac{\lambda}{4} \left( \frac{\lambda}{4} + 1 \right) \right\} \Gamma_0 = 0, \quad (\text{A59})$$

y comparando con la ec. (A44) tenemos que

$$l = \frac{\lambda}{4}, \quad \left(\frac{m'+m}{2}\right)^2 = (\frac{1}{2}\nu)^2, \quad \left(\frac{-m+m'}{2}\right)^2 = \frac{1}{4} \quad \text{y} \quad \Gamma_0 = d_{m'm}^l, \quad (\text{A60})$$

de donde

$$m = \frac{\nu-2}{4} \quad \text{y} \quad m' = \frac{\nu+2}{4}. \quad (\text{A61})$$

Por lo tanto las eigenfunciones de  $\Lambda^2$  con  $L=1$  y  $\lambda$  par son:

$$Y_{\lambda\nu, 1M}(\Omega) = N e^{i\nu\alpha} D_{M0}^{1*}(\theta_i) d_{\frac{1}{2}(\nu+2), \frac{1}{2}(\nu-2)}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma). \quad (\text{A62})$$

Para obtener la constante de normalización  $N$  respecto al elemento de volumen en (A27) usamos la ec. (A47). Finalmente las eigenfunciones normalizadas son

$$Y_{\lambda\nu, 1M}(\Omega) = \left(\frac{3(\lambda+2)}{16\pi^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\nu\alpha} D_{M0}^{1*}(\theta_i) d_{\frac{1}{2}(\nu+2), \frac{1}{2}(\nu-2)}^{\frac{1}{2}\lambda}(4\gamma), \quad (\text{A63})$$

siendo los valores admisibles de  $\nu$ :  $\{\lambda-2, \lambda-6, \lambda-10, \dots, -\lambda+2\}$ .

Este resultado también es corroborado por las técnicas de Teoría de Grupos<sup>6</sup>.

A P E N D I C E B

CALCULO DE  $R_{s's}$  (Ec. (2.5a)).

La integral que deseamos desarrollar es la siguiente:

$$\int_0^{\infty} R_{s'}^{\mu}(\rho) \left\{ \frac{1}{\rho^2} [\lambda(\lambda+4) - \mu(\mu+4)] + \frac{\beta(\mu+s+5/2)}{\rho} - \frac{1}{4}\beta^2 \right\} R_s^{\mu}(\rho) \rho^5 d\rho$$

$$= [\lambda(\lambda+4) - \mu(\mu+4)] \int_0^{\infty} R_{s'}^{\mu}(\rho) R_s^{\mu}(\rho) \rho^3 d\rho + \beta(\mu+s+5/2) \int_0^{\infty} R_{s'}^{\mu}(\rho) R_s^{\mu}(\rho) \rho^4 d\rho$$

$$- \frac{\beta^2}{4} \int_0^{\infty} R_{s'}^{\mu}(\rho) R_s^{\mu}(\rho) \rho^5 d\rho. \quad (B1)$$

La primera integral del lado derecho de (B1) con  $x = \beta\rho$ , y usando la ec. (1.14), es:

$$\int_0^{\infty} R_{s'}^{\mu}(\rho) R_s^{\mu}(\rho) \rho^3 d\rho = \frac{\beta^2 \sqrt{s!s'!}}{\sqrt{(2\mu+4+s)!(2\mu+4+s')}} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{2\mu+3} L_{s'}^{2\mu+4}(x) L_s^{2\mu+4}(x) dx$$

(B2)

Ahora, usando la ec. (4.17.2) de Lebedev<sup>17</sup> y suponiendo por sencillez que  $\mu$  es entera, tenemos

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^{2\mu+3} L_{s'}^{2\mu+4}(x) L_s^{2\mu+4}(x) dx = \sum_{k=0}^{s'} \frac{(2\mu+s'+4)! (-)^k \int_0^{\infty} e^{-x} x^{2\mu+3+k} L_s^{2\mu+4}(x) dx}{k!(s'-k)!(2\mu+4+k)!}$$

(B3)

La fórmula (11) de Gradshteyn<sup>10</sup>, pag 845, nos conduce a:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^{2\mu+3} L_{s'}^{2\mu+4}(x) L_s^{2\mu+4}(x) dx = \sum_{k=0}^{s'} \frac{(2\mu+4+s')! (-)^k (2\mu+3+k)!}{k!(s'-k)!(2\mu+4+k)! s!} (1-k)_s. \quad (B4)$$

Si  $s' \leq s$ , entonces  $(1-k)_s = 0$  para  $k=1, 2, 3, \dots, s'$  y la suma en (B4) es igual a

$$\frac{(2\mu+4+s')!}{s'!(2\mu+4)} \quad \text{si } s' \leq s, \quad (\text{B5a})$$

en el caso opuesto, debido a la simetría en  $s, s'$  se deduce que la suma en (B4) es igual a

$$\therefore \frac{(2\mu+4+s)!}{s!(2\mu+4)} \quad \text{si } s \leq s', \quad (\text{B5b})$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty R_s^\mu(\rho) R_{s'}^\mu(\rho) \rho^3 d\rho &= \frac{\beta^2 \sqrt{s!s'!}}{\sqrt{(2\mu+4+s)!(2\mu+4+s')!}} \frac{(2\mu+4+s_{<})!}{s_{<}!(2\mu+4)} \\ &= \frac{\beta^2}{(2\mu+4)} \left( \frac{s_{>}!(2\mu+4+s_{<})!}{s_{<}!(2\mu+4+s_{>})!} \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

donde  $s_{<} \equiv \min\{s, s'\}$ ,  $s_{>} \equiv \max\{s, s'\}$ .

Usando la ec. (1.15) en la segunda integral del lado derecho de (B1), tenemos:

$$\beta(\mu+s+5/2) \int_0^\infty R_s^\mu(\rho) R_{s'}^\mu(\rho) \rho^4 d\rho = \beta^2(\mu+5/2+s) \delta_{s's}. \quad (\text{B7})$$

Para calcular la tercera integral del lado derecho de (B1) podemos emplear la ec. (13.44) de Arfken<sup>2</sup>. Explícita y convenientemente es:

$$\beta \rho L_s^{2\mu+4} = -(s+1) L_{s+1}^{2\mu+4} + (2s+2\mu+5) L_s^{2\mu+4} - (s+2\mu+4) L_{s-1}^{2\mu+4}. \quad (\text{B8})$$

Además se observa que

$$\left( \frac{s}{2\mu+4+s} \right)^{\frac{1}{2}} R_{s-1}^\mu = \left( \frac{\beta^{2\mu+6} s!}{(2\mu+4+s)!} \right)^{\frac{1}{2}} \rho^\mu e^{-\frac{1}{2}\beta\rho} L_{s-1}^{2\mu+4}(\beta\rho), \quad (\text{B9})$$

$$\text{y} \quad \left( \frac{2\mu+5+s}{s+1} \right)^{\frac{1}{2}} R_{s+1}^\mu = \left( \frac{\beta^{2\mu+6} s!}{(2\mu+4+s)!} \right)^{\frac{1}{2}} \rho^\mu e^{-\frac{1}{2}\beta\rho} L_{s+1}^{2\mu+4}(\beta\rho). \quad (\text{B10})$$

Ahora, sustituyendo (B8), (B9) y (B10) en la tercera integral de (B1) y empleando la relación (1.15), obtenemos la integral de traslape:

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{4}\beta^2 \int_0^\infty R_{s'}^\mu(\rho) R_s^\mu(\rho) \rho^s d\rho = \frac{1}{4}\beta^2 \left\{ \sqrt{(s+1)(2\mu+s+5)} \delta_{s',s+1} - (2s+2\mu+5) \delta_{ss'} \right. \\
 \left. + \sqrt{s(2\mu+s+4)} \delta_{s',s-1} \right\}. \quad (B11)
 \end{aligned}$$

Combinando los valores de las 3 integrales se obtiene la  $R_{s's}$  dada en la ecuación (2.8).

## R E F E R E N C I A S

- 1.- Abramowitz & Stegun. Handbook of Mathematical Functions. Ed. Dover.
- 2.- Arfken G. Mathematical Methods for Physicists. Ed Academic Press. 1970.
- 3.- Bateman H. Integral Transforms. Ed. McGraw-Hill.
- 4.- Biedenharn L. C. & Van Dam H. Quantum Theory of Angular Moment Ed. Academic Press. 1965.
- 5.- Corben H. C., Stehle P. Classical Mechanics. Ed. John Wiley. 1950.
- 6.- Chacón E., Castanos O. & Frank A., J. Math. Phys. 25,1442(1984)
- 7.- Dragt A. J., J. Math. Phys. 6,533(1965)
- 8.- Eisenberg J. M. & Greiner W. Nuclear Models. Ed. North-Holland. 1970.
- 9.- Frankowski K., Pekeris C. L., Phys. Rev. 146,46(1965).
- 10.- Gradshteyn I. S. & Ryshik I. M. Tables of Integrals. Series and Products. Academic Press.
- 11.- Haftel M. I., Mandelzweig, Annals of Physics. N. Y. 150,48(1983)
- 12.- Hamermesh M. Group theory and its application to physical problems Ed. Addison-Wesley. 1964.
- 13.- Hylleraas E., Zeit. Fur Phys. 65,209(1930).
- 14.- Kellner G. W., Zeit. Fur Phys. 44,91(1927).
- 15.- Klar H., Klar M., J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 13,1057(1980).
- 16.- Kramer P., Moshynski M., "Group Theory of Harmonic Oscillators and Nuclear Structure", en Group Theory and its Applications, Editado por Loeb M., Academic Press N.Y. 1968.
- 17.- Lebedev N. N. Special Functions and their applications. Ed. Dover.

1972.

- 18.- Lin C. D., Phys. Rev. A12,493(1975).
- 19.- Macek J. H., J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1,831(1968).
- 20.- Margenau H. & Murphy G. M. The Math. of Phys. and Chemistry.  
Ed. Van Nostran C. I. 1943.
- 21.- Messiah A. Mecanica Cuantica I y II. Ed. Tecnos. 1975.
- 22.- Miller W. Jr. Lecture Notes in Physics. Vol. 189. Ed. Springer  
Verlag.
- 23.- Morse P. M. & Feshbach H. Methods of Theoretical Physics. Vol II.  
Ed. McGraw-Hill. 1953.
- 24.- Pauling L. & Wilson E. B. Int. to Quntum Mechanics.  
Ed. McGraw-Hill. 1935.
- 25.- Pekeris C. L., Phys. Rev. 112,1649(1958); 115,1216(1959);  
126,1470(1962).
- 26.- Pilar F. L. Elementary Quantum Chemistry. Ed. McGraw-Hill.  
1968.
- 27.- Rainville E. D. Special Functions. Ed. McMillan-Company. 1980.
- 28.- Rose M. E., Elementary Theory of Angular Moment. Ed. John  
Wiley. 1957.
- 29.- Rutherford D. E., Classical Mechanics. Ed. Oliver and Boyd.  
Ed. I P
- 30.- Schroedinger E., Ann. Phys. 79,734(1926).
- 31.- Sommerfeld A., Mechanics. Ed. Academic Press. 1952.
- 32.- Spiegel M., Análisis Vectorial. Serie Schaum's. Ed. McGraw-Hill.
- 33.- Talmi I., Helv. Phys. Acta 25,185(1952).
- 34.- Tinkam M., Group Theory and Quantum Mechanics.  
Ed. McGraw-Hill. 1954.

- 35.- Wilson E. B., Decius J. C. & Cross C. E. Molecular Vibrations.  
Ed. Dover. 1955.
- 36.- Zickendraht W., J. Math. Phys. 12,1663(1971); A. Ya. Dzublik,  
Ovcharenko V. I., Steshenko A. I., and Filippov G. F., Yad. Fiz.  
15,869(1972) [Sov. J. Nucl. Phys. 15,487(1972)].