UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

Facultad de Ciencias

EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS Y EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS

T E S I S

Que para obtener el título de

F I S I C O

p r e s e n t a

SALVADOR ANTONIO CRUZ JIMENEZ

México, D. F. *1972*

A MIS PADRES.

A MIS HERMANAS.

Con profundo agradecimiento al Dr. Eugenio Ley Koo, quien con admirable paciencia me oriento en el desarrollo de este trabajo. Sin sus atinados consejos la realizacion de esta tesis habria sido imposible.

AGRADEZCO A LOS DOCTORES:

MARCOS MOSHINSKY, MANUEL BERRONDO DEL VALLE,

JORGE FLORES VALDES, ELPIDIO CHACON ESPONDA,

POR HABER ACEPTADO FUNGIR COMO SINODALES, MI GRATITUD ASI MISMO POR SUS VALIOSOS CONSEJOS Y CRITICAS SOBRE ESTE TRABAJO.

AGRADEZCO AL INSTITUTO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR LA AYUDA ECONOMICA PRESTADA PARA LA ELABORACION DE ESTA TESIS.

INDICE.

INTRODUCCION.

LA LEY DE GRAVITACION UNIVERSAL ES UNA DE LAS MAS ADMIRABLES CONTRIBUCIONES DEL PENSAMIENTO HUMANO PARA LA CIENCIA. A PARTIR DE SU FORMULACION POR EL CELEBRE FISICO INGLES SIR ISAAC NEWTON EN 1666, EL ESTUDIO DEL MOVIMIENTO PLANETARIO PUDO SER COMPRENDIDO CON CLARIDAD CONCILIANDO ASI LAS ANTES SEPARADAS MECANICA CELESTE Y MECANICA TERRESTRE Y EN GENERAL, LA ASTRONOMIA ENCONTRO EL PILAR FUNDAMENTAL SOBRE EL CUAL DESCANSA. POSTERIORMENTE, AL ESTUDIAR EL MOVIMIENTO DE LOS PLANETAS A LA LUZ DE LA LEY DE GRAVITACION, SE OBSERVO QUE EL ANALISIS DE SISTEMAS FORMADOS POR TRES CUERPOS, EN GENERAL NO ADMITE SOLUCION ANALITICA EXACTA, EXCEPTO EN SITUACIONES MUY ESPECIALES. (+) Y POR CONSIGUIENTE, EL ESTUDIO DE SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS COMO EL SISTEMA PLANETARIO, TAMPOCO PUEDE SER HECHO DE MANERA EXACTA. ANTE ESTA DIFICULTAD HUBO LA NECESIDAD DE ESTUDIAR A DICHOS SISTEMAS DE FORMA APROXIMADA. SE PUEDE AFIRMAR ENTONCES QUE A PARTIR DE ESTE MOMENTO EL ESTUDIO DEL PROBLEMA DE MUCHOS CUERPOS TUVO SU ORIGEN.

CUANTICAMENTE SE PRESENTA LA MISMA DIFICULTAD QUE EN EL CASO CLASICO PARA EL ESTUDIO DE SISTEMAS DE MUCHAS PARTICULAS, YA QUE NO SE CONOCE ALGUN PROCEDIMIENTO GENERAL QUE NOS PERMITA OBTENER UNA SOLUCION ANALITICA DEL PROBLEMA. ASI PUES, ES NECESARIO RECURRIR A TECNICAS DE APROXIMACION COMO SUCEDE EN EL CASO CLASICO.

EL OBJETO DE ESTA TESIS ES ESTABLECER EL "METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS" EN EL ANALISIS CUANTICO DE SISTEMAS DE MUCHAS PARTICULAS, ASI COMO MOSTRAR EXPLICITAMENTE LOS PASOS DE QUE CONSTA DICHO METODO EN EL ESTUDIO DEL PROBLEMA CUANTICO DE TRES CUERPOS Y SEÑALAR EL CAMINO A SEGUIR EN EL CASO DE N CUERPOS, PRESENTANDOSE ALGUNOS RESULTADOS GENERALES. LA CARACTERISTICA DEL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS ES QUE SU FORMULACION ES EXACTA Y PERMITE REDUCIR LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL DE SCHROEDINGER A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES AL

(+) "El problema de tres cuerpos puede ser resuelto de forma cerrada si se supone que el triángulo formado por los tres cuerpos siempre permanece similar a sí mismo": Lagrange, Academia de Paris--1772. Ver Mechanics, por A. Sommerfeld, p. 174, Academic Press, 1964.

GEBRAICAS LINEALES Y HOMOGENEAS, CUYA SOLUCION, EN PRINCIPIO, NOS PROPORCIONA LA FUNCION DE ONDA QUE DESCRIBE EXACTAMENTE AL SISTEMA. SIN EMBARGO PRACTICAMENTE ES IMPOSIBLE RESOLVER UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES, POR LO TANTO ES NECESARIO LIMITAR EL NUMERO DE ELLAS Y ES AQUI DONDE SE INTRODUCE LA APROXIMACION.

ES CONVENIENTE SUBRAYAR QUE EN ESTE TRABAJO NO SE PRETENDE RESOLVER ALGUN PROBLEMA ESPECIFICO. ESENCIALMENTE SE DESEA PRESENTAR EL FORMALISMO SEGUIDO EN EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS PARA EL ESTUDIO DEL PROBLEMA CUANTICO DE MUCHOS CUERPOS, EN ESPECIAL EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS.

CON EL OBJETO DE PRESENTAR LO ANTERIOR DE MANERA DETALLADA Y EXPLICITA, LA TESIS SE HA DIVIDIDO EN TRES CAPITULOS Y UNA SECCION DE APENDICES. EN EL PRIMER CAPITULO SE ESTABLECE EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS Y SU APLICACION AL ESTUDIO DEL PROBLEMA DE TRES CUERPOS, GENERALIZANDO ALGUNOS RESULTADOS PARA SISTEMAS DE N CUERPOS. EN ESTE CAPITULO SE SIGUE FUNDAMENTALMENTE EL TRABAJO DE M. FABRE DE LA RIPELLE(1) PARA EL CASO GENERAL. EN EL SEGUNDO CAPITULO SE ESTUDIAN LOS SISTEMAS ATOMICOS DESDE EL PUNTO DE VISTA DEL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS, PARTICULARIZANDO PARA EL ATOMO DE DOS ELECTRONES. EL CAPITULO TRES TRATA FUNDAMENTALMENTE SOBRE LA OBTENCION DE PARENTESIS DE TRANSFORMACION QUE, EN GENERAL, SIMPLIFICAN EL CALCULO DE ELEMENTOS DE MATRIZ EN EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS, DICHOS PARENTESIS SON EL ANALOGO HEXADIMENSIONAL DE LOS PARENTESIS DE TRANSFORMACION DE MOSHINSKY-TALMI, Y FUERON OBTENIDOS ORIGINALMENTE POR J. REVAI Y J. RAYNAL(4), DE AQUI QUE SE LES LLAMA COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL. EN ESTE MISMO CAPITULO SE OBTIENE CON DETALLE UNA RELACION ENTRE LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL Y LOS DE MOSHINSKY-TALMI.

FINALMENTE, EN LA SECCION DE APENDICES SE DESARROLLAN ALGUNOS RESULTADOS CUYA OBTENCION EXIGE UNA MAYOR LABOR MATEMATICA, LO CUAL TIENE EL OBJETO DE NO OSCURECER EL RAZONAMIENTO SEGUIDO EN EL TEXTO PRINCIPAL DE LA TESIS. CABE MENCIONAR QUE EN EL CONTEXTO DE ESTA TESIS SE SEÑALAN OPORTUNAMENTE ALGUNOS PUNTOS QUE ACTUALMENTE SON MOTIVO DE INVESTIGACION.

CAPITULO 1.

EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS .

INTRODUCCION.

EL ESTUDIO DE SISTEMAS DE MUCHAS PARTICULAS ES UNO DE LOS PROBLEMAS QUE GENERALMENTE NO ADMITEN UNA SOLUCION ANALITICA EXACTA, POR LO QUE HA SIDO NECESARIO IDEAR MODELOS Y TECNICAS QUE NOS PERMITAN OBTENER UNA SOLUCION LO MAS APROXIMADA POSIBLE AL ESTADO REAL DEL SISTEMA. GENERALMENTE, LOS MODELOS ELEGIDOS SON TALES QUE SU TRATAMIENTO MATEMATICO SEA SIMPLE Y QUE APROXIMADAMENTE DESCRIBAN EL COMPORTAMIENTO DEL SISTEMA.

EL PROBLEMA QUE NOS INTERESA ES UN SISTEMA DE MUCHAS PARTICULAS QUE INTERACCIONAN UNICAMENTE ENTRE PARES, ES DECIR, EL HAMILTONIANO CUANTICO CORRESPONDIENTE A ESTE SISTEMA ES EL SIGUIENTE:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{\nabla_i^2}{m_i} + \sum_{i<j}^{N} V(r_{ij}) \qquad \text{(A)}$$

DEBIDO A LA NATURALEZA DEL POTENCIAL, EL TRATAMIENTO ANALITICO DE LA ECUACION DE EIGENVALORES ASOCIADA A ESTE HAMILTONIANO EN GENERAL NO NOS OFRECE UNA SOLUCION EXACTA PARA EL PROBLEMA; DE AQUI LA NECESIDAD DE EMPLEAR ALGUNAS TECNICAS DE APROXIMACION.

UNO DE LOS MODELOS MAS EMPLEADOS COMO PRIMERA APROXIMACION AL PROBLEMA, ES EL "MODELO DE PARTICULA INDEPENDIENTE", ESTE CONSISTE FUNDAMENTALMENTE EN PROMEDIAR LAS INTERACCIONES ENTRE LAS PARTICULAS QUE CONSTITUYEN EL SISTEMA, DE TAL FORMA QUE CADA PARTICULA PUEDE TRATARSE COMO SI ESTUVIERA BAJO LA ACCION DE UN POTENCIAL COMUN $U = \sum U_i(\bar{r}_i)$ PRODUCTO DEL PROMEDIO DE LA INTERACCION DE DICHA PARTICULA CON EL RESTO; ES DECIR, EL HAMILTONIANO CUANTICO PARA EL SISTEMA DE N PARTICULAS PUEDE ESCRIBIRSE EN TERMINOS DE ESTO ULTIMO COMO SIGUE:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{\nabla_i^2}{m_i} + \sum_{i=1}^{N} U_i(r_i) + \left(\sum_{i<j}^{N} V(r_{ij}) - \sum_{i=1}^{N} U_i(r_i)\right) \qquad \text{(B)}$$

AHORA BIEN, DEBEMOS ENCONTRAR EL VALOR DE U DE TAL FORMA QUE SE PROXIME LO MAS POSIBLE AL POTENCIAL REAL, ES DECIR:

$$\left|\sum_{i<j} V(r_{ij}) - \sum U_i(r_i)\right| \longrightarrow 0 \qquad \text{(C)}$$

L VALOR DE U_i SE PUEDE ENCONTRAR BUSCANDO AUTO CONSISTENCIA EN LAS - IGENECUACIONES DETERMINADAS POR LOS DOS PRIMEROS TERMINOS EN LA EXPRE ION **B**:

$$\hat{H}_i^{(0)} \psi_i^{(0)} = E_i \psi_i^{(0)} \qquad ; i = 1, \ldots, N \qquad \text{(D)}$$

ONDE

$$\hat{H}_i^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{\nabla_i^2}{m_i} + U_i(r_i) \qquad \text{(E)}$$

$$U_i(r) = \int V(r_{ij})\, \psi_j^{*}(r_j)\, \psi_j^{(0)}(r_j)\, d\tau_j \qquad \text{(F)}$$

LA AUTO CONSISTENCIA SE BUSCA PROPONIENDO UNA FUNCION DE PRUEBA ARA CADA UNA DE LAS ECUACIONES D, MEDIANTE ESTA FUNCION, SE CALCULA EL ALOR DE U_i MEDIANTE LA ECUACION F Y ESTE VALOR SE UTILIZA NUEVAMENTE ENTRO DE LA ECUACION D CORRESPONDIENTE PARA ENCONTRAR UNA NUEVA FUN-- ION $\psi_i^{(0)}$, QUE EN GENERAL ES DISTINTA DE LA PROPUESTA INICIALMENTE. EL ROCESO SE REPITE SUCESIVAMENTE, HASTA QUE SE OBTENGA LA MISMA FUNCION RODUCTO QUE LA ANTERIOR, EN ESTE MOMENTO HAY AUTO CONSISTENCIA Y SE DI E QUE SE TIENE EL OPTIMO VALOR PARA U_i. OBSERVESE QUE ESTE METODO SE RE ITE PARA LAS N PARTICULAS QUE COMPONEN AL SISTEMA, DE MANERA QUE FINAL ENTE, LA FUNCION DE ONDA QUE DESCRIBE AL SISTEMA SE EXPRESA COMO:

$$\psi^{(0)}_{(r_i)} = \psi_1^{(0)}(\bar{r}_1)\, \psi_2^{(0)}(\bar{r}_2) \cdots \psi_N^{(0)}(\bar{r}_N)$$

LA ENERGIA DEL SISTEMA ES LA SUMA DE LAS ENERGIAS INDIVIDUALES:

$$E^{(0)} = E_1 + E_2 + \cdots + E_N$$

TODO LO ANTERIOR ES POSIBLE YA QUE POR EL PROCESO DE AUTO CONSIS- ENCIA, EL POTENCIAL COMUN U ES TAL QUE SE OBTIENE EL MINIMO VALOR - ARA LA DIFERENCIA **(C)**.

OR LO QUE EL HAMILTONIANO $\hat{}$ SE APROXIMA A $\hat{H} \doteq -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{\nabla_i^2}{m_i} + \sum_{i=1}^{N} U_i(r_i)$

MEDIANTE EL METODO DE PARTICULA INDEPENDIENTE, EL ESTADO DEL SISTEMA, QUEDA ENTONCES DETERMINADO POR LOS ESTADOS INDIVIDUALES DE LAS PARTICULAS QUE LO FORMAN, LO CUAL CONSTITUYE UNA APROXIMACION BASTANTE CRUDA, YA QUE LOS TERMINOS DE INTERACCION ENTRE LAS PARTICULAS NO SE HAN CONSIDERADO DIRECTAMENTE.

EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS PROPORCIONA UN ENFOQUE TOTALMENTE DISTINTO PARA LA SOLUCION DEL PROBLEMA DE MUCHOS CUERPOS. TIENE LA GRAN VENTAJA DE SER UN METODO EXACTO EN SU FORMULACION, ES DECIR, NO REQUIERE DE SUPOSICIONES INICIALES, COMO POR EJEMPLO EN EL METODO DE PARTICULA INDEPENDIENTE Y ADEMAS LAS APROXIMACIONES SE INTRODUCEN AL FINAL.

ESTE CAPITULO TIENE EL OBJETO DE ESTABLECER DE UNA MANERA SISTEMATICA EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS EN EL ESTUDIO DEL PROBLEMA DE MUCHOS CUERPOS. EL ANALISIS DE SISTEMAS FORMADOS POR TRES CUERPOS DESDE EL PUNTO DE VISTA DE DICHO METODO, SE REALIZA CON DETALLE, GENERALIZANDO LOS RESULTADOS PARA EL CASO DE N CUERPOS. CON EL FIN DE PROPORCIONAR UNA IDEA COMPLETA SOBRE EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS, EL CAPITULO SE HA DIVIDIDO EN TRES SECCIONES. EN LA PRIMERA SECCION SE ESTABLECEN LOS LINEAMIENTOS GENERALES DEL METODO. EN LA SEGUNDA SECCION, SE DESARROLLAN EXPLICITAMENTE CADA UNO DE LOS PASOS EN QUE CONSISTE EL METODO PARA EL CASO DE TRES CUERPOS. FINALMENTE, EN LA TERCERA SECCION, SE TRATA EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS EN GENERAL, SIGUIENDO ESENCIALMENTE EL TRABAJO DE M. FABRE DE LA RIPELLE (1). COMO PODRA OBSERVARSE, EL CAMINO SEGUIDO EN EL ESTUDIO DE SISTEMAS DE TRES CUERPOS ES GENERALIZABLE PARA SISTEMAS DE N CUERPOS.

1.A EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS.

MEDIANTE ESTE METODO ES POSIBLE SEPARAR EL HAMILTONIANO DEL SISTEMA DE N PARTICULAS, EN UNA PARTE CORRESPONDIENTE AL MOVIMIENTO DEL CENTRO DE MASA Y OTRA AL MOVIMIENTO INTERNO. ASI MISMO EL PROBLEMA DE EIGENVALORES ASOCIADO A LA PARTE CINETICA DEL HAMILTONIANO INTERNO, SE REDUCE A LA SOLUCION DE LA ECUACION DE HELMHOLTZ $3(N-1)$ DIMENSIONAL CUYA --

PARTE ANGULAR NOS PROPORCIONA UNA BASE COMPLETA DE EIGENFUNCIONES - EN TERMINOS DE LAS CUALES PODEMOS EXPRESAR EL POTENCIAL Y LA FUNCION DE ONDA QUE DESCRIBE EL ESTADO INTERNO DEL SISTEMA, LO QUE NOS PERMITE REDUCIR LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL DE SCHROEDINGER A UN CONJUNTO INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS EN LA VARIABLE RADIAL.

EN REALIDAD, EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS ES UNA GENERALIZACION DEL CAMINO SEGUIDO EN EL ESTUDIO DEL PROBLEMA DE DOS CUERPOS QUE INTERACCIONAN A TRAVES DE UNA FUERZA CENTRAL. PARA COMPRENDER MEJOR ESTO, ES CONVENIENTE RECORDAR LOS PASOS SEGUIDOS EN ESTE ULTIMO.

EL HAMILTONIANO CUANTICO PARA UN SISTEMA DE DOS PARTICULAS QUE INTERACCIONAN BAJO UNA FUERZA CENTRAL ES:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(|\bar{r}_2 - \bar{r}_1|) \qquad (1.1)$$

DONDE m_1 Y m_2 SON SUS RESPECTIVAS MASAS Y $\bar{r}_1$ Y $\bar{r}_2$, SUS CORRESPONDIENTES VECTORES DE POSICION.

MEDIANTE LA TRANSFORMACION LINEAL DE COORDENADAS:

$$\begin{aligned} \frac{m_1\bar{r}_1 + m_2\bar{r}_2}{m_1+m_2} &= \bar{R} \\ \bar{r}_2 - \bar{r}_1 &= \bar{\rho} \end{aligned} \qquad (1.2)$$

EL HAMILTONIANO DEL SISTEMA (EC.1.1), PUEDE ESCRIBIRSE COMO LA SUMA DE UNA PARTE QUE DEPENDE UNICAMENTE DE LAS COORDENADAS DEL CENTRO DE MASA Y OTRA QUE ES FUNCION SOLO DE LA COORDENADA RELATIVA DE AMBAS PARTICULAS, ES DECIR:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\nabla_{C.M.}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{rel}^2 + V(\rho) \qquad (1.3)$$

(μ = masa reducida)

YA QUE LO QUE NOS INTERESA ES LA ESTRUCTURA DEL SISTEMA, NOS CONCRETAREMOS A ESTUDIAR UNICAMENTE EL MOVIMIENTO INTERNO DEL MISMO, SIENDO EL HAMILTONIANO CORRESPONDIENTE EL SIGUIENTE:

$$\hat{H}_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2_{rel} + V(\rho) \tag{1.4}$$

LA ECUACION DE SCHROEDINGER ASOCIADA A ESTE HAMILTONIANO ES:

$$\hat{H}_{rel} \Psi(\rho) = E \Psi(\rho) \tag{1.5}$$

POR LA SIMETRIA QUE OFRECE EL POTENCIAL EN ESTE CASO Y YA QUE UNICAMENTE DEPENDE DE LA COORDENADA RELATIVA, RESULTA CONVENIENTE ESTUDIAR EL PROBLEMA EN TERMINOS DE COORDENADAS ESFERICAS. DE ESTA MANERA, LA ECUACION DE SCHROEDINGER (1.5) RESULTA SEPARABLE EN UNA PARTE RADIAL Y OTRA ANGULAR; ESTA ULTIMA, COMO SE VERA, TIENE COMO EIGENFUNCIONES A LOS ARMONICOS ESFERICOS, QUE CONSTITUYEN UNA BASE COMPLETA PARA LAS FUNCIONES QUE DEPENDEN DE LAS COORDENADAS ANGULARES.

CONSIDEREMOS ENTONCES, AL OPERADOR DADO POR LA ECUACION (1.4), EN COORDENADAS ESFERICAS Y RESOLVAMOS EL PROBLEMA DE EIGENVALORES CORRESPONDIENTE. ESTO EQUIVALE A RESOLVER LA ECUACION:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{\hat{l}^2(\vartheta,\varphi)}{\rho^2}\right] + V(\rho)\right\}\Psi(\rho,\vartheta,\varphi) = E\,\Psi(\rho,\vartheta,\varphi) \tag{1.6}$$

DONDE $\hat{l}^2(\vartheta,\varphi)$ ES EL OPERADOR ASOCIADO AL CUADRADO DEL MOMENTO ANGULAR TOTAL:

$$\hat{l}^2(\vartheta,\varphi) = -\hbar^2\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\operatorname{sen}\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{1.7}$$

LAS EIGENFUNCIONES ASOCIADAS A ESTE OPERADOR SON LOS ARMONICOS ESFERICOS, ES DECIR (A LA VUELTA):

$$\hat{l}^2 \cdot Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\, Y_l^m(\theta,\varphi) \quad (1.8)$$

POR LO QUE LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL (1.6) SE REDUCE A:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\rho^2}\right] + V(\rho)\right\}R(\rho) = E\,R(\rho) \quad (1.9)$$

COMO PUEDE APRECIARSE, LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL (1.6), HA SIDO REDUCIDA A UNA ECUACION DIFERENCIAL ORDINARIA QUE DEPENDE EXCLUSIVAMENTE DE LA VARIABLE ρ. ESTO HA SIDO POSIBLE GRACIAS A LA FORMA DEL POTENCIAL.

PARA SISTEMAS AISLADOS, EL POTENCIAL TIENE EN GENERAL SIMETRIA ROTACIONAL, PERO EN EL CASO DE QUE EXISTAN OTROS EFECTOS QUE ORIGINEN UNA DEPENDENCIA ANGULAR EN EL POTENCIAL, PODEMOS HACER USO DE LA COMPLETEZ DE LA BASE QUE FORMAN LOS ARMONICOS ESFERICOS, DE MANERA QUE EL POTENCIAL SE REPRESENTA COMO UNA SUPERPOSICION DE ARMONICOS ESFERICOS, ES DECIR:

SI

$$V = V(\rho,\theta,\varphi) \quad (1.10)$$

ENTONCES ES POSIBLE ESCRIBIR:

$$V(\rho,\theta,\varphi) = \sum_{l,m} V_l^m(\rho)\, Y_l^m(\theta,\varphi) \quad (1.11)$$

DONDE

$$V_l^m(\rho) = \int V(\rho,\theta,\varphi)\, Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\, d\Omega$$

ASI MISMO, LA FUNCION DE ONDA PUEDE EXPRESARSE EN TERMINOS DE ARMONICOS ESFERICOS COMO SIGUE:

$$\psi(\rho,\theta,\varphi) = \sum_{l',m'} R_{l'}(\rho)\, Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi) \quad (1.12)$$

SUBSTITUYENDO LOS DESARROLLOS (1.11) Y (1.12) EN LA ECUACION DE SCHROEDINGER (1.6) Y MULTIPLICANDO AMBOS MIEMBROS POR $Y_{l''}^{m''*}(\vartheta,\varphi)$ E INTEGRANDO SOBRE LAS COORDENADAS ANGULARES, SE OBTIENE EL SIGUIENTE SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS, QUE DEPENDEN EXCLUSIVAMENTE DE LA VARIABLE RADIAL:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{l''(l''+1)}{\rho^2}\right]-E\right\} R_{l''}(\rho) \; +$$

$$+\sum_{l,m}\sum_{l',m'} V_l^m(\rho)\, R_{l'}(\rho) \left\langle Y_{l''}^{m''}(\vartheta,\varphi)\middle| Y_l^m(\vartheta,\varphi)\middle| Y_{l'}^{m'}(\vartheta,\varphi)\right\rangle \quad (1.13)$$

HEMOS REDUCIDO LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL DE SCHROEDINGER A UN SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS DEPENDIENTES DE ρ.

AHORA BIEN, EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS CONSISTE ESENCIALMENTE EN LOS MISMOS PASOS QUE EL PROBLEMA DE DOS PARTICULAS, PERO - DESDE LUEGO GENERALIZADOS PARA UN SISTEMA DE N CUERPOS. EN ESTE CASO, EL NUMERO DE COORDENADAS INTERNAS ES 3(N-1), PUESTO QUE SE SEPARAN LAS 3 CORRESPONDIENTES AL CENTRO DE MASA, POR LO QUE EL TRATAMIENTO MATEMATICO SE REALIZA EN UN ESPACIO DE 3(N-1) DIMENSIONES. EXPLICITAMENTE, EL -- METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS CONSISTE EN LO SIGUIENTE:

1) SEPARAR EL MOVIMIENTO DEL CENTRO DE MASA. ESTO SE LOGRA SI SE LLEVA A CABO UNA TRANSFORMACION LINEAL DEL CONJUNTO DE COORDENADAS DE CADA PARTICULA (3N EN TOTAL), A UN NUEVO CONJUNTO QUE INCLUYA AL CENTRO DE MASA $\vec{R}$ Y 3(N-1) COORDENADAS INTERNAS. ESTE NUEVO CONJUNTO PUEDE SER, POR EJEMPLO, LAS COORDENADAS DE JACOBI.

2) MEDIANTE LAS NUEVAS 3(N-1) COORDENADAS INTERNAS, SE DEFINEN LAS - COORDENADAS HIPERESFERICAS, QUE CORRESPONDEN A UN ESPACIO CONFIGURACIONAL DE 3(N-1) DIMENSIONES.

3) EXPRESAR EL OPERADOR DE ENERGIA CINETICA EN COORDENADAS HIPERESFERICAS (DESDE LUEGO DICHO OPERADOR CORRESPONDE AL HAMILTONIANO INTERNO-

DEL SISTEMA).OBTENIENDOSE ASI UNA PARTE RADIAL Y OTRA ANGULAR EN EL ESPACIO DE 3(N-1) DIMENSIONES.

4)RESOLVER LA ECUACION DE EIGENVALORES ASOCIADA A LA PARTE ANGULAR DEL OPERADOR DE ENERGIA CINETICA,OBTENIENDO COMO EIGENFUNCIONES A LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS,LOS CUALES CONSTITUYEN UNA BASE COMPLETA POR SER SOLUCION DEL PROBLEMA DE EIGENVALORES.

5)EXPANDER EL POTENCIAL Y LA FUNCION DE ONDA EN TERMINOS DE ARMONICOS HIPERESFERICOS.

6)SUBSTITUIR LOS DESARROLLOS ARRIBA CITADOS EN LA ECUACION DE SCHROEDINGER,REDUCIENDOSE ESTA A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS EN LA VARIABLE RADIAL.

1.B EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS TRATADO MEDIANTE EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS.

EN ESTA SECCION SE DESARROLLARAN EXPLICITAMENTE Y CON DETALLE LOS PASOS INDICADOS EN LA SECCION ANTERIOR,PARA EL CASO PARTICULAR DE TRES CUERPOS.

EL HAMILTONIANO CUANTICO PARA UN SISTEMA CONSTITUIDO POR TRES PARTICULAS QUE INTERACCIONAN ENTRE PARES,ES EL SIGUIENTE:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{3} \frac{\nabla_i^2}{m_i} + \sum_{i<j}^{3} V(r_{ij}) \qquad (1.14)$$

COMO NOS INTERESA EL MOVIMIENTO INTERNO DEL SISTEMA,DEBEMOS BUSCAR UNA MANERA DE SEPARAR EL HAMILTONIANO EN UNA PARTE CORRESPONDIENTE AL CENTRO DE MASA DEL SISTEMA Y OTRA PARA EL MOVIMIENTO INTERNO DEL MISMO. ESTO LO LOGRAMOS SI ESTABLECEMOS UNA TRANSFORMACION LINEAL ENTRE LAS COORDENADAS DE CADA PARTICULA $\bar{r}_1, \bar{r}_2, \bar{r}_3$ Y UN NUEVO CONJUNTO DE COORDE-

NADAS: $\bar{R}$ PARA EL CENTRO DE MASA Y $\bar{\xi}_i, \bar{\eta}_i$ PARA LAS COORDENADAS INTERNAS. DE ESTA MANERA, AL SEPARAR LAS COORDENADAS DEL CENTRO DE MASA (3-DIMENSIONES), NOS RESTRINGIMOS A TRABAJAR EN EL ESPACIO DE 3X3-3=6 DIMENSIONES, DEFINIDAS POR LAS COORDENADAS INTERNAS $\bar{\xi}_i, \bar{\eta}_i$.

SEAN, POR EJEMPLO, LAS COORDENADAS DE JACOBI EL NUEVO CONJUNTO DE COORDENADAS, QUE PARA ESTE CASO TIENEN LA SIGUIENTE EXPRESION:

$$\bar{\xi}_i = \left(\frac{m_j m_k}{m_j+m_k}\right)^{1/2} (\bar{r}_j - \bar{r}_k)$$

$$\bar{\eta}_i = \left[\frac{m_i(m_j+m_k)}{M}\right]^{1/2} \left(\bar{r}_i - \frac{m_j\bar{r}_j + m_k\bar{r}_k}{m_j+m_k}\right) \qquad (1.15)$$

$$M = m_1+m_2+m_3 \quad ; \quad i,j,k = 1,2,3 \quad (i \neq j \neq k)$$

DONDE $\bar{\xi}_i$ ES UN VECTOR PROPORCIONAL A LA COORDENADA RELATIVA DE DOS PARTICULAS (SU SIGNO ESTA SUJETO AL HECHO DE QUE i, j, k FORMEN UNA PERMUTACION CICLICA DE 1,2Y3); $\bar{\eta}_i$ ES LA COORDENADA RELATIVA DE LA TERCERA DE LAS PARTICULAS RESPECTO AL CENTRO DE MASA DE LAS OTRAS DOS - Y $\bar{R}$ ES LA COORDENADA DEL CENTRO DE MASA DEL SISTEMA.

COMO PUEDE VERSE, EXISTEN DISTINTAS MANERAS DE NUMERAR A LAS PARTICULAS, PERO SIEMPRE TENDREMOS SOLO TRES DISTINTOS CONJUNTOS DE COORDENADAS EQUIVALENTES ENTRE SI; POR ESTA RAZON SE HA AGREGADO EL INDICE (i) EN LAS COORDENADAS DE JACOBI. ES POSIBLE PASAR DE UN CONJUNTO A OTRO MEDIANTE UNA TRANSFORMACION LINEAL ADECUADA; PARA ELLO, CONSIDEREMOS DOS - CONJUNTOS ARBITRARIOS $(\bar{\xi}_i, \bar{\eta}_i)$ Y $(\bar{\xi}_k, \bar{\eta}_k)$, QUE DE ACUERDO A LA EXPRESION - 1.15 SON:

$$\left.\begin{aligned}\bar{\xi}_i &= \left(\frac{m_j m_k}{m_j+m_k}\right)^{1/2} (\bar{r}_j-\bar{r}_k)\\ \bar{\eta}_i &= \left[\frac{m_i(m_j+m_k)}{M}\right]^{1/2}\left(\bar{r}_i-\frac{m_j\bar{r}_j+m_k\bar{r}_k}{m_j+m_k}\right)\end{aligned}\right\} \qquad (1.16\text{A})$$

$$\left.\begin{aligned}\bar{\xi}_k &= \left(\frac{m_i m_j}{m_i+m_j}\right)^{1/2} (\bar{r}_i-\bar{r}_j)\\ \bar{\eta}_k &= \left[\frac{m_k(m_i+m_j)}{M}\right]^{1/2}\left(\bar{r}_k-\frac{m_i\bar{r}_i+m_j\bar{r}_j}{m_i+m_j}\right)\end{aligned}\right\} \qquad (1.15\text{B})$$

EL PASO DE UN CONJUNTO DE COORDENADAS DE JACOBI A OTRO ES PURAMENTE ALGEBRAICO Y SE PUEDE HACER SIN DIFICULTAD OBTENIENDOSE LA RELACION:

$$\begin{aligned}\bar{\xi}_k &= -\left[\frac{m_i m_k}{(m_i+m_j)(m_j+m_k)}\right]^{1/2}\bar{\xi}_i + \left[\frac{m_j M}{(m_i+m_j)(m_j+m_k)}\right]\bar{\eta}_i\\ \bar{\eta}_k &= -\left[\frac{m_j M}{(m_i+m_j)(m_j+m_k)}\right]^{1/2}\bar{\xi}_i - \left[\frac{m_i m_k}{(m_i+m_j)(m_j+m_k)}\right]^{1/2}\bar{\eta}_i\end{aligned} \qquad (1.17)$$

SI HACEMOS EL SIGUIENTE CAMBIO:

$$A \equiv \left[\frac{m_i m_k}{(m_i+m_j)(m_j+m_k)}\right]^{1/2}$$

$$B \equiv \left[\frac{m_j M}{(m_i+m_j)(m_j+m_k)}\right]^{1/2}$$

SE PUEDE VER QUE:

$$A^2 + B^2 = 1 \qquad (1.18)$$

POR LO QUE ES POSIBLE ESCRIBIR:

$$\begin{aligned} A &\equiv \cos \varphi_{ki} \\ B &\equiv \operatorname{sen} \varphi_{ki} \end{aligned} \qquad (1.19)$$

POR LO TANTO, LA TRANSFORMACION ENTRE LOS DOS CONJUNTOS DE COORDENADAS (1.16A) Y (1.16B) ES:

$$\begin{pmatrix} \bar{\xi}_k \\ \bar{\eta}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos\varphi_{ki} & \operatorname{sen}\varphi_{ki} \\ -\operatorname{sen}\varphi_{ki} & -\cos\varphi_{ki} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\xi}_i \\ \bar{\eta}_i \end{pmatrix} \qquad (1.20)$$

DONDE φ_{ki} ES EL ANGULO DE FASE QUE NOS PERMITE PASAR DE UN CONJUNTO A OTRO. ESTE ANGULO ESTA DADO POR LA SIGUIENTE EXPRESION:

$$\varphi_{ki} = \arctan \frac{B}{A} = \arctan (-1)^p \left(\frac{m_j M}{m_i m_k} \right)^{1/2} \qquad (1.21)$$

EL FACTOR $(-1)^p$ INDICA EL SIGNO DE LA PERMUTACION CICLICA DE i, j, k.

COMO SE PODRA APRECIAR, MEDIANTE EL NUEVO CONJUNTO DE COORDENADAS INTRODUCIDO (ECS. 1.15), LA SEPARACION DE LA PARTE DEL HAMILTONIANO ---- CORRESPONDIENTE AL CENTRO DE MASA SE OBTENDRA DE UNA MANERA NATURAL.

LA PARTE CINETICA DEL HAMILTONIANO 1.14 ES:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{3} \frac{\nabla_i^2}{m_i} \qquad (1.22)$$

EMPLEANDO AHORA LA TRANSFORMACION DE COORDENADAS (1.15), QUE ESENCIALMENTE CONSISTE EN LA DEPENDENCIA FUNCIONAL: $\bar{r}=\bar{r}(\bar{\xi}_i,\bar{\eta}_i,\bar{R})$, Y APLICANDO SUCESIVAMENTE LA REGLA DE LA CADENA, SE OBTIENE LA SIGUIENTE EXPRESION PARA (1.22) EN TERMINOS DE COORDENADAS DE JACOBI:

$$\hat{T} = -\frac{1}{2M}\nabla^2_{c.M.} - \frac{1}{2}\left(\nabla^2_{\xi_i} + \nabla^2_{\eta_i}\right) \qquad (1.23)$$

DONDE $\hbar \equiv 1$.

DE AQUI SE PUEDE VER FACILMENTE QUE LAS PARTES INTERNA Y DEL CENTRO DE MASA SON RESPECTIVAMENTE:

$$\hat{T}_{c.M.} = -\frac{1}{2M}\nabla^2_{c.M.} \qquad (1.24A)$$

$$\hat{T}_{int} = -\frac{1}{2}\left(\nabla^2_{\xi_i} + \nabla^2_{\eta_i}\right) \qquad (1.24B)$$

COMO SE MENCIONO EN UNA OCASION, NOS INTERESA EL ESTADO INTERNO DEL SISTEMA, POR LO QUE EN ADELANTE TRABAJAREMOS EXCLUSIVAMENTE CON $\hat{T}_{int}$. DADO ARRIBA.

GRACIAS A LAS COORDENADAS INTRODUCIDAS, HEMOS PODIDO OBTENER LAS EXPRESIONES (1.24); PERO EXISTE TODAVIA UNA PROPIEDAD MUY IMPORTANTE DEL NUEVO CONJUNTO DE COORDENADAS DEFINIDO POR (1.15). DE LA ECUACION DE TRANSFORMACION (1.20), SE PUEDE VER QUE:

$$\xi_k^2 + \eta_k^2 = \bar{\xi}_k\cdot\bar{\xi}_k + \bar{\eta}_k\cdot\bar{\eta}_k$$

$$= (\cos^2\varphi_{ki} + \operatorname{sen}^2\varphi_{ki})\,\xi_i^2 + (\cos^2\varphi_{ki} + \operatorname{sen}^2\varphi_{ki})\,\eta_i^2$$

$$= \xi_i^2 + \eta_i^2$$

ES DECIR:

$$\xi_i^2 + \eta_i^2 = \xi_k^2 + \eta_k^2 = \text{invariante} \equiv \rho^2 \qquad (1.25)$$

POR LO ANTERIOR, LA MAGNITUD DE LOS VECTORES $\bar{\xi}_i, \bar{\eta}_i$ SE PUEDE ESCRIBIR COMO:

$$\xi_i = \rho \cos \alpha_i$$

$$\eta_i = \rho \operatorname{sen} \alpha_i \qquad (1.26)$$

LA EXPRESION 1.25 REPRESENTA UNA ESFERA HEXA-DIMENSIONAL DE RADIO (HIPERRADIO) ρ Y EL ANGULO α_i QUE APARECE EN (1.26) ES EL QUE RELACIONA LA LONGITUD DE LOS VECTORES $\bar{\xi}_i$ Y $\bar{\eta}_i$, CON DICHO HIPERRADIO. LAS CUATRO COORDENADAS RESTANTES CORRESPONDEN A LOS ANGULOS POLAR Y AZIMUTAL PARA CADA VECTOR, ES DECIR: $\hat{\xi}_i = (\theta_{\xi_i}, \varphi_{\xi_i})$; $\hat{\eta}_i = (\theta_{\eta_i}, \varphi_{\eta_i})$. ESTAS CANTIDADES ASI DESCRITAS CONSTITUYEN LAS LLAMADAS COORDENADAS HIPERESFERICAS:

$$\rho \quad , \quad (\alpha_i, \hat{\xi}_i, \hat{\eta}_i) \equiv \Omega_i \qquad (1.27)$$

ESTAMOS AHORA EN POSICION DE ESTUDIAR EL MOVIMIENTO INTERNO DE NUESTRO SISTEMA MEDIANTE EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS. LA VENTAJA DE ESTO ESTRIBA EN EL HECHO DE QUE PODEMOS ESCRIBIR LA ECUACION (1.24) FORMADA POR UNA PARTE HIPERRADIAL Y OTRA HIPERANGULAR. LAS EIGENFUNCIONES DE ESTA ULTIMA SON LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS PARA SEIS DIMENSIONES, LOS CUALES CONSTITUYEN UNA BASE COMPLETA QUE NOS PERMITIRA HACER DESARROLLOS TANTO DEL POTENCIAL COMO DE LA FUNCION DE ONDA PARA EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS.

PROCEDEREMOS, ENTONCES, A EXPRESAR EL OPERADOR PARA LA ENERGIA CINETICA INTERNA EN TERMINOS DE COORDENADAS HIPERESFERICAS. EL OPERADOR ASOCIADO A LA ENERGIA CINETICA INTERNA ES (EC. 1.24):

$$\hat{T}_{int} = -\frac{1}{2}\left(\nabla^2_{\xi_i} + \nabla^2_{\eta_i}\right)$$

EL OPERADOR LAPLACIANO TRIDIMENSIONAL EN COORDENADAS ESFERICAS ES:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{l}^2(\vartheta, \varphi)}{r^2}$$

DONDE, DE ACUERDO A (1.7), $\hat{\ell}^2(\theta,\varphi)$ ES EL OPERADOR ASOCIADO AL CUADRADO DEL MOMENTO ANGULAR TOTAL:

$$\hat{\ell}^2 = -\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \quad ; (\hbar\equiv 1)$$

EN TERMINOS DE LO ANTERIOR, LA EXPRESION 1.24 PUEDE ESCRIBIRSE:

$$\hat{T}_{int} = -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\xi_i^2}\frac{\partial}{\partial\xi_i}\left(\xi_i^2\frac{\partial}{\partial\xi_i}\right) + \frac{1}{\eta_i^2}\frac{\partial}{\partial\eta_i}\left(\eta_i^2\frac{\partial}{\partial\eta_i}\right)\right] +$$

$$+\frac{1}{2}\left[\frac{\hat{\ell}^2(\hat{\xi}_i)}{\xi_i^2} + \frac{\hat{\ell}^2(\hat{\eta}_i)}{\eta_i^2}\right] \qquad (1.28)$$

AHORA BIEN, HACIENDO USO DE LA DEFINICION DE LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS (EC. 1.26), LO ANTERIOR PUEDE EXPRESARSE EN TERMINOS DE ESTE ULTIMO CONJUNTO DE COORDENADAS. EL CAMINO A SEGUIR ES BASTANTE DIRECTO;-- ESENCIALMENTE SE HACE USO DE LA REGLA DE LA CADENA ATENDIENDO A LA RELACION FUNCIONAL:

$$\xi_i = \xi_i(\rho, \alpha_i)$$

$$\eta_i = \eta_i(\rho, \alpha_i)$$

Y SABIENDO QUE LAS SIGUIENTES RELACIONES SE CUMPLEN:

$$\xi_i^2 + \eta_i^2 = \rho^2$$
$$\tan\alpha_i = \frac{\eta_i}{\xi_i} \qquad (1.29)$$

DE ESTA MANERA SE OBTIENE LO SIGUIENTE:

$$\frac{\partial}{\partial\xi_i} = \frac{\partial\rho}{\partial\xi_i}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial\alpha_i}{\partial\xi_i}\frac{\partial}{\partial\alpha_i} = (\cos\alpha_i)\frac{\partial}{\partial\rho} - \left(\frac{1}{\rho}\operatorname{sen}\alpha_i\right)\frac{\partial}{\partial\alpha_i}$$

$$\frac{\partial}{\partial\eta_i} = \frac{\partial\rho}{\partial\eta_i}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial\alpha_i}{\partial\eta_i}\frac{\partial}{\partial\alpha_i} = (\operatorname{sen}\alpha_i)\frac{\partial}{\partial\rho} + \left(\frac{1}{\rho}\cos\alpha_i\right)\frac{\partial}{\partial\alpha_i} \qquad (1.30)$$

APLICANDO LA DERIVADA (1.30) COMO LO INDICA LA ECUACION 1.28, SE ENCUENTRA, DESPUES DE ALGUNAS SIMPLIFICACIONES, LA SIGUIENTE EXPRESION PARA (1.28) EN COORDENADAS HIPERESFERICAS:

$$\hat{T}_{int} = -\frac{1}{2}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\alpha_i^2} + \frac{2}{\rho^2}(\cot\alpha_i - \tan\alpha_i)\frac{\partial}{\partial\alpha_i} - \right.$$
$$\left. - \frac{\hat{l}^2(\hat{\xi}_i)}{\rho^2\cos^2\alpha_i} - \frac{\hat{l}^2(\hat{\eta}_i)}{\rho^2\operatorname{sen}^2\alpha_i}\right\} \qquad (1.31)$$

APROVECHANDO LA RELACION:

$$\cot 2\alpha = \frac{\cot\alpha - \tan\alpha}{2}$$

LA ECUACION (1.31) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$\hat{T}_{int} = -\frac{1}{2}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho^2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\alpha_i^2} - 4\cot 2\alpha_i\frac{\partial}{\partial\alpha_i} + \frac{\hat{l}^2(\hat{\xi}_i)}{\cos^2\alpha_i} + \frac{\hat{l}^2(\hat{\eta}_i)}{\operatorname{sen}^2\alpha_i}\right)\right\} \qquad (1.32)$$

MEDIANTE ESTA ULTIMA ECUACION PODEMOS VER LA VENTAJA DE HABER EXPRESADO $\hat{T}_{int}$ EN TERMINOS DE LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS ρ Y Ω_i ; YA QUE TENEMOS AHORA UNA ECUACION SEPARABLE EN DOS PARTES: UNA PARTE RADIAL Y OTRA ANGULAR QUE PODEMOS ASOCIAR AL CUADRADO DEL MOMENTO ANGULAR HEXADIMENSIONAL, DENOTADO CON LA LETRA $\hat{K}^2(\Omega_i)$:

$$\hat{K}^2(\Omega_i) \equiv -\frac{\partial^2}{\partial\alpha_i^2} - 4\cot 2\alpha_i\frac{\partial}{\partial\alpha_i} + \frac{\hat{l}^2(\hat{\xi}_i)}{\cos^2\alpha_i} + \frac{\hat{l}^2(\hat{\eta}_i)}{\operatorname{sen}^2\alpha_i} \qquad (1.33)$$

POR LO QUE LA EXPRESION 1.32 SE REDUCE A :

$$\hat{T}_{int.} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{K}^2(\Omega_i)}{\rho^2}\right) \qquad (1.34)$$

RECORDEMOS QUE EN (1.33) $\hat{l}^2(\hat{\xi}_i)$ Y $\hat{l}^2(\hat{\eta}_i)$, SON LOS OPERADORES ASOCIADOS A LOS CUADRADOS DE LOS MOMENTOS ANGULARES TRIDIMENSIONALES CORRES-

PONDIENTES A $\bar{\xi}_i$ Y $\bar{\eta}_i$;RESPECTIVAMENTE.

CONSIDEREMOS EL PROBLEMA DE EIGENVALORES:

$$\hat{T}_{int}\,\Psi(\rho,\Omega_i) = E\,\Psi(\rho,\Omega_i)$$

ES DECIR:

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{K}^2(\Omega_i)}{\rho^2}\right)\Psi(\rho,\Omega_i) = E\,\Psi(\rho,\Omega_i)$$

(1.35)

CON $\hat{K}^2(\Omega_i)$ DEFINIDO EN (1.33). LA ECUACION 1.35 ES DE VARIABLES SEPARABLES, POR LO QUE LA FUNCION DE ONDA PUEDE ESCRIBIRSE COMO EL PRODUCTO DE UNA PARTE ANGULAR Y OTRA RADIAL:

$$\Psi(\rho,\Omega) = R(\rho)\,W(\Omega) \qquad (1.36)$$

SUBSTITUYENDO ESTO ULTIMO EN LA ECUACION 1.35 OBTENEMOS:

$$\frac{\rho^2}{R}\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{5\rho}{R}\frac{dR}{d\rho} + 2E\rho^2 = \frac{1}{W}\cdot\hat{K}^2(\Omega)\cdot W$$

(1.37)

AMBOS MIEMBROS DE ESTA ULTIMA ECUACION DEPENDEN DE VARIABLES DISTINTAS: ρ Y Ω ,POR LO QUE, PARA QUE LA IGUALDAD SEA VALIDA PARA TODO VALOR DE ρ Y Ω ,ES NECESARIO IGUALAR CADA UNO DE ELLOS A LA MISMA CONSTANTE λ ,ENTONCES:

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(2E - \frac{\lambda}{\rho^2}\right)R = 0 \qquad (1.38)$$

$$\hat{K}^2(\Omega)\cdot W = \lambda\,W$$

(1.39)

LAS EIGENFUNCIONES DE LA ECUACION 1.39 SON LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS, SON ARMONICOS PRECISAMENTE POR SER SOLUCION DE LA ECUACION DE LAPLACE HEXADIMENSIONAL EN SU PARTE ANGULAR. A CONTINUACION ENCONTRAREMOS EXPLICITAMENTE LA EXPRESION PARA TALES ARMONICOS HIPERESFERICOS, ASI COMO EL EIGENVALOR λ.

ESCRIBAMOS LA ECUACION 1.39 DE FORMA EXPLICITA COMO:

$$-\frac{\partial^2 W}{\partial \alpha^2} - 4\cot 2\alpha \frac{\partial W}{\partial \alpha} + \frac{\hat{l}^2(\hat{\xi})\cdot W}{\cos^2\alpha} + \frac{\hat{l}^2(\hat{\eta})\cdot W}{\operatorname{sen}^2\alpha} = \lambda W \tag{1.40}$$

AHORA, SABEMOS QUE $W = W(\alpha, \hat{\xi}, \hat{\eta})$; COMO LOS OPERADORES $\hat{l}^2(\hat{\xi})$ Y $\hat{l}^2(\hat{\eta})$ ACTUAN SOLAMENTE SOBRE LAS COORDENADAS ANGULARES $\hat{\xi}$ Y $\hat{\eta}$ RESPECTIVAMENTE, ENTONCES PODEMOS ESCRIBIR A W COMO EL PRODUCTO DE TRES FUNCIONES INDEPENDIENTES:

$$W = X(\alpha)\, Y(\hat{\xi})\, Z(\hat{\eta}) \tag{1.41}$$

LA ECUACION 1.40 SE REDUCE ENTONCES A LO SIGUIENTE:

$$-\frac{1}{X}\frac{d^2 X}{d\alpha^2} - \frac{4\cot 2\alpha}{X}\frac{dX}{d\alpha} + \frac{1}{\cos^2\alpha}\frac{\hat{l}^2(\hat{\xi})\cdot Y}{Y} + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\alpha}\frac{\hat{l}^2(\hat{\eta})\cdot Z}{Z} = \lambda \tag{1.42}$$

YA QUE LAS FUNCIONES QUE SATISFACEN LA ECUACION DE EIGENVALORES:

$$\hat{l}^2 \cdot F(\theta,\varphi) = l(l+1)\, F(\theta,\varphi)$$

SON PRECISAMENTE LOS ARMONICOS ESFERICOS, ENTONCES:

$$Y(\hat{\xi}) = Y_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{\xi})$$

$$Z(\hat{\eta}) = Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{\eta})$$

POR LO TANTO, LA ECUACION 1.42 SE REDUCE A :

$$\frac{d^2 \mathcal{X}}{d\alpha^2} + 4\cot 2\alpha \frac{d\mathcal{X}}{d\alpha} - \left[\frac{l_\xi(l_\xi+1)}{\cos^2\alpha} + \frac{l_\eta(l_\eta+1)}{\operatorname{sen}^2\alpha} - \lambda \right] \mathcal{X} = 0$$

(1.43)

RESOLVIENDO ESTA ULTIMA ECUACION POR SERIES DE POTENCIAS SE PUEDE OBTENER LA EXPRESION EXPLICITA PARA $\mathcal{X}(\alpha)$ (+):

$$\mathcal{X}(\alpha) = (\cos\alpha)^{l_\xi} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta} \; P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)$$

(1.44)

DONDE $P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha)$ ES UN POLINOMIO DE JACOBI DE ORDEN n Y ARGUMENTO $(\cos 2\alpha)$.

LA EXPRESION EXPLICITA PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS, DE ACUERDO A (1.41), ES ENTONCES:

$$\mathcal{W}_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega) = N_K^{l_\xi l_\eta} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta} (\cos\alpha)^{l_\xi} \; P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) \; Y_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{\xi}) \; Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{\eta})$$

(1.45)

DONDE $N_K^{l_\xi l_\eta}$ ES LA CONSTANTE DE NORMALIZACION(++) Y K ES EL NUMERO CUANTICO HIPERORBITAL, DADOS POR:

$$N_K^{l_\xi l_\eta} = \left[\frac{2\, n!\, (K+2)\, (l_\xi + l_\eta + n + 1)!}{\Gamma(n + l_\xi + \frac{3}{2})\, \Gamma(n + l_\eta + \frac{3}{2})} \right]^{1/2} \qquad (1.46)$$

(+) Ver Apendice I (A)

(++) Ver Apendice I (B)

$$K = 2n + l_\xi + l_\eta \tag{1.47}$$

Y EL EIGENVALOR λ EN (1.40) ES:

$$\lambda = K(K+4) \tag{1.48}$$

COMO PUEDE APRECIARSE, K ES LA SUMA DE LOS NUMEROS CUANTICOS ORBITALES l_ξ , l_η Y UN NUEVO NUMERO CUANTICO n ,INTRODUCIDO POR LA SOLUCION DE LA ECUACION DE EIGENVALORES (1.43).SI SE DESEA EMPLEAR FUNCIONES CON MOMENTO ANGULAR TOTAL BIEN DEFINIDO,PODEMOS ESCRIBIR:

$$\mathcal{W}_K^{l_\xi l_\eta LM}(\Omega) = \sum_{m_\xi, m_\eta} (l_\xi m_\xi l_\eta m_\eta | LM)\, \mathcal{W}_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega) \tag{1.49}$$

DONDE $(l_\xi m_\xi l_\eta m_\eta | LM)$ SON LOS COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN.

POR SER SOLUCION DEL PROBLEMA DE EIGENVALORES ASOCIADO AL OPERADOR $\hat{K}^2(\Omega)$ (EC.1.39),LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS FORMAN UNA BASE COMPLETA DE EIGENFUNCIONES DEFINIDAS EN LA SUPERFICIE DE UNA ESFERA HEXADIMENSIONAL.GRACIAS A DICHA COMPLETEZ,ES POSIBLE EXPRESAR EL POTENCIAL EN TERMINOS DE ARMONICOS HIPERESFERICOS COMO SIGUE:

$$\sum_{i<j}^{3} V(r_{ij}) = \sum_{K, l_\xi, l_\eta} V_K^{l_\xi l_\eta}(\rho)\, \mathcal{W}_K^{l_\xi l_\eta LM}(\Omega) \tag{1.50}$$

CON:

$$V_K^{l_\xi l_\eta}(\rho) = \int \mathcal{W}_K^{l_\xi l_\eta LM^*}(\Omega) \left[\sum_{i<j}^{3} V(r_{ij}) \right] d\Omega$$

DEBIDO A LA NATURALEZA CENTRAL DEL POTENCIAL,COMO SE VERA POSTERIORMENTE, $l_\xi = l_\eta = l$ Y $L=0$; $M=0$,POR ELLO NO SE HA INCLUIDO LA SUMA SOBRE L Y M. EL CALCULO DE LAS INTEGRALES EXPRESADAS EN (1.50) PUEDE REALIZARSE DIRECTAMENTE O EMPLEANDO UNA TRANSFORMACION UNITARIA ENTRE ARMONICOS HIPERESFERICOS QUE CORRESPONDEN A DISTINTOS CONJUNTOS (Ω_i) ES

DECIR:

$$W_{k\,(\Omega_i)}^{\lambda_{s_i} l_{\eta_i} LM} = \sum_{\lambda_{s_k}, \lambda_{\eta_k}} \langle \lambda_{s_k} l_{\eta_k} | \lambda_{s_i} l_{\eta_i} \rangle_{KL}\, W_{K\,(\Omega_k)}^{\lambda_{s_k} l_{\eta_k} LM} \quad (1.51)$$

DONDE LOS COEFICIENTES QUE DEFINEN A DICHA TRANSFORMACION:

$$\langle \lambda_{s_k} \lambda_{\eta_k} | \lambda_{s_i} l_{\eta_i} \rangle_{KL}$$

PUEDEN SER CALCULADOS EXPLICITAMENTE. EN EL CAPITULO TRES SE TRATARA CON DETALLE LA OBTENCION DE DICHOS COEFICIENTES. EL USO DE ESTOS COEFICIENTES PARA EL CASO DE TRES CUERPOS, SIMPLIFICA LOS CALCULOS IMPLICADOS COMO SE VERA POSTERIORMENTE.

A CONTINUACION HAREMOS USO DEL DESARROLLO 1.50 PARA EL POTENCIAL ASI COMO DE UN DESARROLLO ANALOGO PARA LA FUCION DE ONDA QUE DESCRIBE EL ESTADO INTERNO DEL SISTEMA, PARA REDUCIR LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL DE SCHROEDINGER A UN CONJUNTO INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS EN LA VARIABLE RADIAL.

CONSIDEREMOS LA ECUACION DE SCHROEDINGER CORRESPONDIENTE AL HAMILTONIANO INTERNO DE NUESTRO SISTEMA EN COORDENADAS HIPERESFERICAS, (VER ECUACIONES 1.34 Y 1.14):

$$\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{K}^2(\Omega)}{\rho^2}\right) + \sum_{i<j}^{3} V(r_{ij})\right\} \Psi(\rho,\Omega) = E\,\Psi(\rho,\Omega) \quad (1.52)$$

SUBSTITUYENDO EN ESTA ECUACION EL DESARROLLO DEL POTENCIAL EN TERMINOS DE ARMONICOS HIPERESFERICOS (EC. 1.50), OBTENEMOS:

$$\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{K}^2(\Omega)}{\rho^2}\right) - E\right\} \Psi(\rho,\Omega_i) + \sum_{K,l_s,l_\eta} V_{K\,(\rho)}^{l_s l_\eta}\, W_{K\,(\Omega)}^{l_s l_\eta LM} \cdot \Psi(\rho,\Omega) = 0 \quad (1.53)$$

HACIENDO AHORA EL DESARROLLO DE LA FUNCION DE ONDA EN TERMINOS DE ARMONICOS HIPERESFERICOS:

$$\Psi^{L'M'}(\rho,\Omega) = \sum_{K',l'_3,l'_4} R_{K'}(\rho)\, W_{K'}^{l'_3 l'_4 L' M'}(\Omega) \qquad (1.54)$$

DONDE SE HA EXCLUIDO LA SUMA SOBRE L' Y M' POR LA MISMA RAZON DADA EN LA ECUACION (1.50). ENTONCES, EN TERMINOS DE ESTO Y SABIENDO QUE

$$\hat{K}^2 \cdot W_K = K(K+4)\, W_K ,$$

LA ECUACION (1.53) RESULTA:

$$\sum_{K',l'_3,l'_4} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{K'(K'+4)}{\rho^2}\right) R_{K'}(\rho)\, W_{K'}^{l'_3 l'_4 L' M'}(\Omega) +$$

$$+ \sum_{K,l_3,l_4} \sum_{K',l'_3,l'_4} V_K^{l_3 l_4}(\rho)\, R_{K'}(\rho)\, W_K^{l_3 l_4 L M}(\Omega)\, W_{K'}^{l'_3 l'_4 L' M'}(\Omega) = 0 \qquad (1.55)$$

MULTIPLIQUEMOS AHORA POR $W_{K''}^{l''_3 l''_4 L'' M'' *}(\Omega)$ E INTEGREMOS SOBRE TODOS LOS ANGULOS, APROVECHANDO LA PROPIEDAD DE ORTONORMALIDAD DE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS:

$$\left\langle W_{K'}^{l'_3 l'_4 L' M'}(\Omega) \middle| W_K^{l_3 l_4 L M}(\Omega) \right\rangle = \delta_{KK'}\, \delta_{LL'}\, \delta_{MM'}\, \delta_{l_3 l'_3}\, \delta_{l_4 l'_4}$$

ENTONCES, LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL (1.55) SE REDUCE A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ACOPLADAS EN LA VARIABLE ρ :

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{K''(K''+4)}{\rho^2}\right) R_{K''}(\rho) +$$

$$+ \sum_{K,l_3,l_4} \sum_{K',l'_3,l'_4} V_K^{l_3 l_4}(\rho)\, R_{K'}(\rho) \left\langle W_{K''}^{l''_3 l''_4 L'' M''}(\Omega) \middle| W_K^{l_3 l_4 L M}(\Omega) \middle| W_{K'}^{l'_3 l'_4 L' M'}(\Omega) \right\rangle = 0 \qquad (1.56)$$

HASTA AHORA, TODO LO QUE SE HA HECHO ES ENCONTRAR UNA BASE PARA LAS FUNCIONES ANGULARES Y EN TERMINOS DE DICHA BASE EXPRESAR EL POTENCIAL ASI COMO LA FUNCION DE ONDA QUE DESCRIBE AL SISTEMA. AHORA ENCONTRAREMOS UNA BASE PARA LAS FUNCIONES RADIALES. ESTO SE LOGRA SI NOS RESTRINGIMOS AL CASO "MONOPOLAR" ($K=0$) EN LA EXPRESION (1.56), LO QUE EQUIVALE A CONSIDERAR UNICAMENTE AQUELLA PARTE DE LA INTERACCION QUE POSEE SIMETRIA HIPERESFERICA. PARA ESTE CASO PARTICULAR, EL SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES SE DESACOPLA REDUCIENDOSE A LO SIGUIENTE:

$$\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{5}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{K''(K''+4)}{\rho^2}\right)+V_0^{00}(\rho)\,W_0^{0000}(\Omega)\right\}R^{(0)}_{n_\rho'' K''}(\rho)=$$

$$=E^{(0)}_{n_\rho'' K''}\,R^{(0)}_{n_\rho'' K''}(\rho) \tag{1.57}$$

AQUI $W_0^{0000}(\Omega)$ ES UNA CONSTANTE Y LAS FUNCIONES $R^{(0)}_{n_\rho'' K''}$ CONSTITUYEN UNA BASE COMPLETA Y ORTONORMAL POR SER SOLUCION DEL PROBLEMA DE EIGENVALORES:

$$\hat{H}^{(0)}R^{(0)}_{n_\rho'' K''}(\rho)=E^{(0)}_{n_\rho'' K''}\,R^{(0)}_{n_\rho'' K''}(\rho) \tag{1.58}$$

CON

$$\hat{H}^{(0)}\equiv-\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{5}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{K''(K''+4)}{\rho^2}\right)+V_0^{00}(\rho)\,W_0^{0000}(\Omega) \tag{1.59}$$

LA EIGENECUACION (1.58) TIENE SOLUCIONES PARA ENERGIAS POSITIVAS COMO NEGATIVAS. PARA CONSIDERAR EL PROBLEMA DE ESTADOS LIGADOS CONSIDERAMOS $E^{(0)}_{n_\rho''}<0$ EN CUYO CASO n_ρ'' TOMA VALORES DISCRETOS. SI $E^{(0)}_{n_\rho''}>0$, DEBEN INCLUIRSE LOS VALORES DE n_ρ'' CONTINUOS. EN TERMINOS DE ESTO ULTIMO, ES POSIBLE EXPRESAR CUALQUIER FUNCION RADIAL COMO LA SIGUIENTE SUPERPOSICION(+):

$$R_K(\rho)=\sum_{n_\rho'' K''}a^{K}_{n_\rho'' K''}\,R^{(0)}_{n_\rho'' K''}(\rho) \tag{1.60}$$

DONDE n_ρ'' TOMA VALORES TANTO DISCRETOS COMO CONTINUOS (EN EL CASO DE TENER UNICAMENTE VALORES CONTINUOS LA SUMA SE TRADUCE EN UNA INTEGRAL).

(+) No debe confundirse el número cuántico radial n_ρ con el número n que surgió de la solución de la ecuación angular (1.37).

En terminos de esto ultimo y junto con el uso de la base hiperesferica, la funcion de onda que describe al sistema se puede escribir como:

$$\Psi(\rho,\Omega) = \sum_{\substack{k', l_3' l_4' \\ n_\rho'}} a_{n_\rho' k'}^{l_3' l_4'} R_{n_\rho' k'}^{(0)}(\rho) W_{k'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) \tag{1.61}$$

Por lo tanto la expresion 1.53 se reduce a lo siguiente:

$$\sum_{\substack{k' l_3' l_4' \\ n_\rho'}} \left\{ -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{k'(k'+4)}{\rho^2} \right) - E \right\} a_{n_\rho' k'}^{l_3' l_4'} R_{n_\rho' k'}^{(0)}(\rho) W_{k'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) +$$

$$+ \sum_{k, l_3 l_4} \sum_{k' l_3' l_4'} a_{n_\rho' k'}^{l_3' l_4'} V_k^{l_3 l_4}(\rho) R_{n_\rho' k'}^{(0)}(\rho) W_k^{l_3 l_4 L M}(\Omega) W_{k'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) = 0$$

$$\tag{1.62}$$

Escribiendo explicitamente los terminos con $k=0$ esta ultima expresion quedea como:

$$\sum_{\substack{k' l_3' l_4' \\ n_\rho'}} \left\{ -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{k'(k'+4)}{\rho^2} \right) + V_0^{00} W_0^{0000} - E \right\} a_{n_\rho' k'}^{l_3' l_4'} \cdot$$

$$\cdot R_{n_\rho' k'}^{(0)}(\rho) W_{k'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) + \sum_{\substack{k \neq 0 \\ l_3, l_4}} \sum_{\substack{k', l_3' l_4' \\ n_\rho'}} a_{n_\rho' k'}^{l_3' l_4'} V_k^{l_3 l_4}(\rho) R_{n_\rho' k'}^{(0)}(\rho) \cdot$$

$$\cdot W_k^{l_3 l_4 L M}(\Omega) W_{k'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) = 0 \tag{1.63}$$

Notese que en la segunda sumatoria se han excluido los terminos con $k=0$ por haberse escrito explicitamente. En virtud de las expresiones 1.58 y 1.59, esta ultima ecuacion se reduce a :

$$\sum_{\substack{k' l_3' l_4' \\ n_\rho'}} \left(E^{(0)}_{n_\rho' k'} - E \right) a^{l_3' l_4'}_{n_\rho' k'} R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) W^{l_3' l_4' L' M'}_{k'}(\Omega) +$$

$$+ \sum_{\substack{k \neq 0 \\ l_3, l_4}} \sum_{\substack{k' l_3' l_4' \\ n_\rho'}} a^{l_3' l_4'}_{n_\rho' k'} V^{l_3 l_4}_{k}(\rho) R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) W^{l_3 l_4 L M}_{k}(\Omega) W^{l_3' l_4' L' M'}_{k'}(\Omega) = 0$$

(1.64)

MULTIPLICANDO AMBOS MIEMBROS DE ESTA ULTIMA EXPRESION, POR

$$\left(R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho) W^{l_3'' l_4'' L'' M''}_{k''}(\Omega) \right)^{*}$$

INTEGRANDO SOBRE TODO EL ESPACIO Y SABIENDO QUE LA SIGUIENTE CONDICION SE CUMPLE:

$$\left\langle R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) W^{l_3' l_4' L' M'}_{k'}(\Omega) \middle| R^{(0)}_{n_\rho k}(\rho) W^{l_3 l_4 L M}_{k}(\Omega) \right\rangle = \delta_{n_\rho n_\rho'} \delta_{k k'} \delta_{L L'} \delta_{M M'} \delta_{l_3 l_3'} \delta_{l_4 l_4'}$$

(1.65)

OBTENEMOS FINALMENTE EL SIGUIENTE SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES Y HOMOGENEAS ACOPLADAS EN LOS COEFICIENTES $a^{l_3 l_4}_{n_\rho k}$:

$$\left(E^{(0)}_{n_\rho'' k''} - E \right) a^{l_3'' l_4''}_{n_\rho'' k''} +$$

$$+ \sum_{\substack{k \neq 0 \\ l_3, l_4}} \sum_{\substack{k' l_3' l_4' \\ n_\rho'}} a^{l_3' l_4'}_{n_\rho' k'} \left\langle R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho) \middle| V^{l_3 l_4}_{k}(\rho) \middle| R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) \right\rangle \cdot$$

$$\cdot \left\langle W^{l_3'' l_4'' L'' M''}_{k''}(\Omega) \middle| W^{l_3 l_4 L M}_{k}(\Omega) \middle| W^{l_3' l_4' L' M'}_{k'}(\Omega) \right\rangle = 0$$

(1.66)

LA SOLUCION DE ESTE SISTEMA DE ECUACIONES SERA NO TRIVIAL SOLAMENTE SI SU DETERMINANTE ES NULO, LO CUAL EQUIVALE A RESOLVER LA ECUACION SECULAR CORRESPONDIENTE. DE ESTA FORMA PODEMOS CALCULAR EXPLICITAMENTE EL VALOR DE E Y LOS COEFICIENTES DEL DESARROLLO $a^{l_3 l_4}_{n_\rho k}$.

Observese que hasta ahora el formalismo seguido es exacto, en la practica es imposible resolver un numero infinito de ecuaciones, por lo que debemos limitar el numero de ellas. La convergencia de las soluciones determina la eficacia del metodo, el estudio de dicha convergencia es motivo aun de investigacion.

Un punto interesante en este desarrollo es el estudio de las integrales:

$$\left\langle W_{k''}^{l_3''l_4''L''M''}(\Omega) \middle| W_{k}^{l_3 l_4 L M}(\Omega) \middle| W_{k'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) \right\rangle$$

Si fuese posible obtener una expresion general explicita para dichas integrales, el Metodo de Coordenadas Hiperesfericas se podria aplicarse de forma sistematica. Lo mismo puede decirse acerca del calculo de elementos de matriz de la forma:

$$\left\langle R_{n_\rho'' k''}^{(0)}(\rho) \middle| V_{k}^{l_3 l_4}(\rho) \middle| R_{n_\rho' k'}^{(0)}(\rho) \right\rangle$$

1.C. El Metodo de Coordenadas Hiperesfericas. Caso General.

Hasta ahora se ha tratado el problema de tres cuerpos de una manera explicita. En esta seccion se estudian los resultados generales basados en el trabajo de M. Fabre De La Ripelle (1) para el caso de N particulas. Los pasos seguidos en este tratamiento general son esencialmente los mismos que en el caso de tres cuerpos.

El Hamiltoniano cuantico para un sistema de N particulas que interaccionan entre pares es el siguiente:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{\nabla_i^2}{m_i} + \sum_{i<j}^{N} V(r_{ij}) \qquad (1.67)$$

SI COMO EN EL CASO DE TRES CUERPOS, NUMERAMOS A LAS PARTICULAS - ASIGNANDOLES SUS RESPECTIVOS VECTORES DE POSICION $\bar{r}_1, \ldots, \bar{r}_N$ Y AHORA INTRODUCIMOS UNA TRANSFORMACION LINEAL $\mathcal{L}$ QUE NOS RELACIONE AL CONJUNTO $(\bar{r}_1, \ldots, \bar{r}_N)$ CON LAS NUEVAS COORDENADAS $\bar{R}$, PARA EL CENTRO DE MASA Y $\bar{\xi}_1, \ldots, \bar{\xi}_{N-1}$ PARA LAS COORDENADAS INTERNAS, ENTONCES PODREMOS SEPARAR EL MOVIMIENTO DEL CENTRO DE MASA DEL SISTEMA.

CUALQUIER TRANSFORMACION LINEAL QUE INCLUYA AL CENTRO DE MASA ES UTIL EN ESTE CASO. EN PARTICULAR PODEMOS EMPLEAR LAS COORDENADAS DE JACOBI QUE EN EL CASO GENERAL TIENEN LA SIGUIENTE FORMA:

$$\bar{\xi}_i = \frac{\left(\sum_{s=1}^{i+1} m_s\right) m_{i+1}}{\sum_{r=1}^{i+1} m_r} \left(\bar{r}_{i+1} - \frac{\sum_{s=1}^{i} m_i \bar{r}_i}{\sum_{s=1}^{i} m_s} \right) \qquad (1.68)$$

DONDE $\bar{\xi}_i$ ES PROPORCIONAL A LA COORDENADA RELATIVA DE LA PARTICULA $i+1$ RESPECTO AL CENTRO DE MASA DE LAS (i) ANTERIORES; $\bar{R}$ ES LA COORDENADA DEL CENTRO DE MASA DEL SISTEMA.

OBSERVESE QUE POR EXISTIR MUCHAS MANERAS DE NUMERAR A LAS PARTICULAS DEL SISTEMA, DEBEMOS TENER DISTINTOS CONJUNTOS DE COORDENADAS DE JACOBI EQUIVALENTES ENTRE SI. EVIDENTEMENTE SIEMPRE PODREMOS ENCONTRAR UNA RELACION ENTRE TALES CONJUNTOS, A CONTINUACION ENCONTRAREMOS TAL - TRANSFORMACION.

SEAN $\bar{\xi}_i$ Y $\bar{\mu}_k$ DOS CONJUNTOS EQUIVALENTES DEFINIDOS POR LA ECUACION 1.68, LA TRANSFORMACION ENTRE ELLOS SE PUEDE ESCRIBIR COMO:

$$\begin{pmatrix} \bar{\xi}_1 \\ \bar{\xi}_2 \\ \vdots \\ \bar{\xi}_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1(N-1)} \\ g_{21} & g_{22} & \cdots & g_{2(N-1)} \\ \vdots & & & \\ g_{(N-1)1} & g_{(N-1)2} & \cdots & g_{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\mu}_1 \\ \bar{\mu}_2 \\ \vdots \\ \bar{\mu}_{N-1} \end{pmatrix} \qquad (1.69)$$

LA MATRIZ DE TRANSFORMACION DEBE CUMPLIR CON LA PROPIEDAD DE ORTOGONALIDAD:

$$\sum_{i=1}^{N-1} q_{ij} q_{ij} = 1 \qquad y \qquad \sum_{i=1}^{N-1} q_{ij} q_{ik} = 0 \quad (j \neq k)$$

VOLVIENDO AL HAMILTONIANO (1.67), MEDIANTE LAS NUEVAS COORDENADAS DEFINIDAS (EC. 1.68), LA SEPARACION DEL MOVIMIENTO DEL CENTRO DE MASA SE OBTIENE DE FORMA NATURAL. EL HAMILTONIANO QUEDA COMO SIGUE:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2_{C.M.} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \nabla^2_{s_i} + \sum_{i<j}^{N} V(r_{ij}) \tag{1.70}$$

COMO NOS INTERESA EL MOVIMIENTO INTERNO, NOS ENCARGAREMOS DE LA PARTE INTERNA DE ESTE HAMILTONIANO, ES DECIR:

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \nabla^2_{s_i} + \sum_{i<j}^{N} V(r_{ij}) \tag{1.71}$$

DEBIDO A LA SEPARACION HECHA DEL MOVIMIENTO DEL CENTRO DE MASA ES POSIBLE TRABAJAR EXCLUSIVAMENTE CON LAS 3(N-1) COORDENADAS DE JACOBI RESTANTES. ESTAS COORDENADAS TIENEN LA PROPIEDAD:

$$\sum_{i=1}^{N-1} s_i^2 = \sum_{k=1}^{N-1} \mu_k^2 = \text{invariante} \equiv \rho^2 \tag{1.72}$$

ESTA ULTIMA EXPRESION REPRESENTA UNA ESFERA EN 3(N-1) DIMENSIONES DETERMINADA POR UN HIPERRADIO ρ. LAS OTRAS COORDENADAS SON LOS ANGULOS QUE DEFINEN LA POSICION DE UN PUNTO SOBRE LA SUPERFICIE HIPERESFERICA. MANTENIENDO PARA CADA VECTOR LOS ANGULOS POLAR Y AZIMUTAL TRIDIMENSIONALES θ_i, φ_i Y DEFINIENDO UN NUEVO ANGULO α_i QUE RELACIONE LA LONGITUD DE CADA VECTOR CON EL HIPERRADIO ρ, LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS EN

GENERAL TIENEN LA SIGUIENTE EXPRESION:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \rho \operatorname{sen} \alpha_{N-1} \cdots \operatorname{sen} \alpha_3 \operatorname{sen} \alpha_2 \\ \xi_2 &= \rho \operatorname{sen} \alpha_{N-1} \ldots \operatorname{sen} \alpha_3 \cos \alpha_2 \\ &\vdots \\ \xi_i &= \rho \operatorname{sen} \alpha_{N-1} \cdots \operatorname{sen} \alpha_{i+1} \cos \alpha_i \\ \xi_{N-1} &= \rho \cos \alpha_{N-1} \end{aligned} \tag{1.73}$$

EN FORMA ABREVIADA, LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS PARA ESTE CASO LAS PODEMOS ESCRIBIR COMO:

$$\rho \,,\; (\alpha_2, .., \alpha_{N-1};\, \hat{\xi}_1, .., \hat{\xi}_{N-1}) \equiv \Omega_i \tag{1.74}$$

EN ESTA ULTIMA EXPRESION $2(N-1)$ COORDENADAS CORRESPONDEN A LOS ANGULOS POLAR Y AZIMUTAL, $N-2$ COORDENADAS PARA LOS ANGULOS α_i Y UNA COORDENADA RADIAL; EN TOTAL TENEMOS LAS $3(N-1)$ COORDENADAS HIPERESFERICAS.

PUEDE COMPROBARSE QUE LAS CANTIDADES DE LA EXPRESION (1.73) CUMPLEN LA CONDICION:

$$\sum_{i=1}^{N-1} \xi_i^2 = \rho^2$$

EN TERMINOS DE LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS, LA PARTE CINETICA DEL HAMILTONIANO INTERNO DADO POR LA ECUACION 1.73, PUEDE EXPRESARSE COMO:

$$\hat{T}_{int} = -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{3N-4}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\hat{K}^2_{N-1}(\Omega)}{\rho^2} \right\} \tag{1.75}$$

DONDE EL OPERADOR $\hat{K}^2_{N-1}(\Omega)$ CORRESPONDE A LA PARTE HIPERANGULAR Y TIENE LA SIGUIENTE ESTRUCTURA:

$$\hat{K}^2_{N-1}(\Omega) = -\frac{\partial^2}{\partial \alpha_{N-1}} - \left[3(N-3) \cot \alpha_{N-1} + 2 (\cot \alpha_{N-1} - \tan \alpha_{N-1}) \right] \frac{\partial}{\partial \alpha_{N-1}} + \frac{\hat{l}^2_{N-1}}{\cos^2 \alpha_{N-1}} + \frac{\hat{K}^2_{N-2}(\Omega)}{\operatorname{sen}^2 \alpha_{N-1}} \tag{1.76}$$

Comparense estas expresiones con las obtenidas en la seccion anterior para el caso $N=3$.

Las eigenfunciones del operador (1.76) son los armonicos hiperesfericos:

$$\hat{K}^2 \cdot \mathcal{W}_K^{(l_1,\dots,l_{N-1};m_1,\dots,m_{N-1};n_2,\dots,n_{N-1})}(\Omega) = K(K+3N-5)\,\mathcal{W}_K^{(l_1,\dots,l_{N-1};m_1,\dots,m_{N-1};n_2,\dots,n_{N-1})}(\Omega) \qquad (1.77)$$

La expresion explicita para los armonicos hiperesfericos es (1):

$$\mathcal{W}_K^{(l_1,\dots,l_{N-1};m_1,\dots,m_{N-1};n_2,\dots,n_{N-1})}(\Omega) = \prod_{i=1}^{N-1}\left[\frac{2\Gamma(\epsilon_i+n_i)\,\Gamma(\gamma_i+n_i)\,(\epsilon_i+2n_i)}{n!\,\Gamma(\epsilon_i+n_i-\gamma_i+1)}\right]^{1/2}\cdot\frac{1}{\Gamma(\gamma_i)}$$

$$\cdot(\cos\alpha_i)^{l_i}(\operatorname{sen}\alpha_i)^{K_{i-1}}\;{}_2F_1(-n_i,\epsilon_i+n_i,\gamma_i;\operatorname{sen}^2\alpha_i)\;Y_{l_i}^{m_i}(\hat{\xi}_i) \qquad (1.78)$$

con ${}_2F_1(-n_i,\epsilon_i+n_i,\gamma_i;\operatorname{sen}^2\alpha_i)$ polinomio de Jacobi y:

$$\epsilon_i = K_{i-1}+l_i+\frac{3i}{2}-1$$

$$\gamma_i = K_{i-1}+\frac{3i-3}{2}$$

$$K_i = l_1+\sum_{i=2}^{N-1}(2n_i+l_i)$$

El eigenvalor depende de un numero cuantico hiperorbital K que es la suma de los numeros cuanticos orbitales l_i y de nuevos numeros cuanticos n_i que surgen de la parte hiperangular (ec. 1.76).

En ocasiones es conveniente expresar a los armonicos hiperesfericos en terminos de un numero cuantico orbital total, es decir:

$$\mathcal{W}_K^{(l_1,\dots,l_{N-1};m_1,\dots,m_{N-1};n_2,\dots,n_{N-1})}(\Omega) \longrightarrow \mathcal{W}_K^{(l_1,\dots,l_{N-1};m_1,\dots,m_{N-1};L,M;\nu_3,\dots,\nu_{N-1})}$$

Observese que del lado derecho aparecen nuevos numeros cuanticos $\nu_3,..,\nu_{N-1}$,con el objeto de que el numero de grados de libertad en la nueva representacion sea el mismo que anteriormente. En este caso los numeros $\nu_3,..,\nu_{N-1}$ tienen que ver con la simetria del sistema y con la forma en que se lleva a cabo el acoplamiento vectorial:

$$\bar{l}_1 + \bar{l}_2 + \cdots + \bar{l}_{N-1} = \bar{L}$$

Antes de seguir adelante haremos la siguiente convencion en la notacion:

$$(l_1,..,l_{N-1}; m_1,..,m_{N-1}; n_2,..,n_{N-1}) \longleftrightarrow (n_i\, l_i\, m_i)$$

$$(l_1,..,l_{N-1}; m_1,..,m_{N-1}; L, M; \nu_3,..\nu_{N-1}) \longleftrightarrow (n_i\, l_i\, L M\, \nu) \qquad (1.79)$$

Los armonicos hiperesfericos constituyen una base completa, por lo que es posible expresar el potencial $\sum V(r_{ij})$ en terminos de dicha base, reduciendose el problema al calculo de los coeficientes que determinan el desarrollo, de la misma forma que se hizo en el caso de tres cuerpos es decir:

$$\sum_{i<j}^{N-1} V[r_{ij}(\rho,\Omega_i)] = \sum_{K,(n_i l_i m_i)} V_K^{(n_i l_i m_i)}(\rho)\, W_K^{(n_i l_i L M \nu)}(\Omega) \qquad (1.80)$$

DONDE:

$$V_K^{(n_i l_i m_i)}(\rho) = \int W_K^{(n_i l_i L M \nu)*}(\Omega) \left\{ \sum_{i<j}^{N-1} V[r_{ij}(\rho,\Omega_i)] \right\} d\Omega \qquad (1.81)$$

El calculo de esta ultima integral se puede llevar a cabo de forma directa, o bien empleando una transformacion unitaria entre los armonicos hiperesfericos correspondientes a distintos conjuntos de coordenadas de Jacobi, como en el caso de tres cuerpos, reduciendose el problema al calculo de los coeficientes que definen dicha transformacion. Estos parentesis de transformacion son una generalizacion de los mencionados en el problema de tres cuerpos (ec. 1.51) y su estudio es aun problema abierto a la investigacion.

AHORA, REDUCIREMOS LA ECUACION DIFERNCIAL PARCIAL DE SCHROEDINGER A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS MEDIANTE LA BASE QUE FORMAN LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS, EMPLEANDO EL DESARROLLO DEL POTENCIAL COMO DE LA FUNCION DE ONDA EN TERMINOS DE DICHA BASE.

ESCRIBAMOS LA ECUACION DE SCHROEDINGER PARA EL MOVIMIENTO INTERNO DEL SISTEMA (ECS. 1.71, 1.75 Y 1.76):

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{3N-4}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\hat{K}^2_{N-1}(\Omega)}{\rho^2}\right]+\sum_{i<j}^{N-1}V[r_{ij}(\rho,\Omega_i)]\right\}\Psi(\rho,\Omega)=E\,\Psi(\rho,\Omega) \tag{1.82}$$

APROVECHANDO LA COMPLETEZ DE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS, LA FUNCION DE ONDA PUEDE EXPRESARSE TAMBIEN COMO:

$$\Psi(\rho,\Omega_i)=\sum_{k',(n_i'l_i'm_i')}R_{k'}(\rho)\,\mathcal{W}_{k'}^{(n_i'l_i'L'M'\nu')}(\Omega) \tag{1.83}$$

POR LO QUE, SUBSTITUYENDO LOS DESARROLLOS 1.80 Y 1.83 EN LA ECUACION 1.82 Y RECORDANDO QUE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS SATISFACEN LA ECUACION DE EIGENVALORES ASOCIADA AL OPERADOR $\hat{K}^2_{N-1}(\Omega)$ (EC. 1.77), LA ECUACION 1.82 SE REDUCE A :

$$\sum_{k'(n_i'l_i'm_i')}\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{3N-4}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{k'(k'+3N-5)}{\rho^2}\right]-E\right\}\cdot$$

$$\cdot\,R_{k'}(\rho)\,\mathcal{W}_{k'}^{(n_i'l_i'L'M'\nu')}(\Omega)+\sum_{k,(n_il_im_i)}\ \sum_{k',(n_i'l_i'm_i')}V_k^{(n_il_im_i)}(\rho)\,R_{k'}(\rho)\,\cdot$$

$$\cdot\,\mathcal{W}_k^{(n_il_iLM\nu)}(\Omega)\,\mathcal{W}_{k'}^{(n_i'l_i'L'M'\nu')}(\Omega)=0 \tag{1.84}$$

EMPLEANDO LA ORTONORMALIDAD DE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS, MULTI-

PLIQUEMOS ESTA ULTIMA ECUACION POR $W_{K''}^{(n_i'' l_i'' L'' M'' \nu'')*}(\Omega)$ E INTEGREMOS SOBRE TODOS LOS ANGULOS, OBTENIENDO EL SIGUIENTE SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{3N-4}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{K''(K''+3N-5)}{\rho^2}\right)-E\right\} R_{K''}(\rho) +$$

$$+\sum_{K,(n_i l_i m_i)} \sum_{K',(n_i' l_i' m_i')} V_K^{(n_i l_i m_i)}(\rho)\, R_{K'}(\rho) \,\cdot$$

$$\cdot \left\langle W_{K''}^{(n_i'' l_i'' L'' M'' \nu'')}(\Omega) \middle| W_K^{(n_i l_i L M \nu)}(\Omega) \middle| W_K^{(n_i' l_i' L' M' \nu')}(\Omega) \right\rangle = 0$$

(1.85)

NUEVAMENTE, COMO EN EL CASO DE TRES CUERPOS, CONSIDERANDO EL CASO "MONOPOLAR" ($K=0$) ES POSIBLE ENCONTRAR UNA BASE PARA LAS FUNCIONES RADIALES. EN ESTE CASO ($K=0$) LA EXPRESION (1.85) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$\hat{\mathcal{H}}_N^{(0)} R_{n_\rho'' K''}^{(0)}(\rho) = E_{n_\rho'' K''}^{(0)} R_{n_\rho'' K''}^{(0)}(\rho) \qquad (1.86)$$

CON

$$\hat{\mathcal{H}}_N^{(0)} \equiv -\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{3N-4}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{K''(K''+3N-5)}{\rho^2}\right)+V_0^{(0)}(\rho)\, W_0^{(0)}(\Omega) \qquad (1.87)$$

SI LA ECUACION 1.86 OFRECE UNA SOLUCION ANALITICA PARA $R_{n_\rho'' K''}^{(0)}(\rho)$, ENTONCES LAS FUNCIONES $R_{n_\rho'' K''}^{(0)}$ CONSTITUYEN UNA BASE COMPLETA PARA FUNCIONES RADIALES, POR LO QUE ES POSIBLE ESCRIBIR EL SIGUIENTE DESARROLLO PARA $\Psi(\rho,\Omega_i)$ DEFINIDA EN LA ECUACION (1.83):

$$\Psi(\rho,\Omega_i) = \sum_{\substack{n_\rho', K' \\ (n_i' l_i' m_i')}} a_{n_\rho' K'}^{(n_i' l_i' m_i')} R_{n_\rho' K'}^{(0)}(\rho)\, W_{K'}^{(n_i' l_i' L' M' \nu')}(\Omega)$$

(1.88)

SIGUIENDO ESENCIALMENTE LOS MISMOS PASOS QUE EN LA SECCION ANTERIOR

SI SUBSTITUIMOS ESTE ULTIMO DESARROLLO EN LA ECUACION 1.82 Y HACEMOS USO DE LAS PROPIEDADES (1.86) Y (1.87) OBTENEMOS:

$$\sum_{\substack{n_\rho' K' \\ (n_i' l_i' m_i')}} \left(E^{(0)}_{n_\rho' K'} - E \right) a^{(n_i' l_i' m_i')}_{n_\rho' K'} R^{(0)}_{n_\rho' K'}(\rho)\, W^{(n_i' l_i' L' M' \nu')}_{K'}(\Omega) +$$

$$+ \sum_{\substack{K \neq 0 \\ (n_i l_i m_i)}} \sum_{\substack{K' n_\rho' \\ (n_i' l_i' m_i')}} V^{(n_i l_i m_i)}_{K}(\rho)\, a^{(n_i' l_i' m_i')}_{n_\rho' K'} R^{(0)}_{n_\rho' K'}(\rho) \cdot$$

$$\cdot W^{(n_i l_i L M \nu)}_{K}(\Omega)\, W^{(n_i' l_i' L' M' \nu')}_{K'}(\Omega) = 0$$

(1.89)

NOTESE QUE SE HA ESCRITO EXPLICITAMENTE EL TERMINO $K=0$ POR ELLO SE HA EXCLUIDO DE LA SEGUNDA SUMA.

FINALMENTE, APROVECHANDO LA ORTONORMALIDAD DE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS, ASI COMO DE LA BASE RADIAL, MULTIPLIQUEMOS LA ECUACION 1.89 POR $\left(R^{(0)}_{n_\rho'' K''}(\rho)\, W^{(n_i'' l_i'' L'' M'' \nu'')}_{K''}\right)^*$ E INTEGREMOS SOBRE TODO EL ESPACIO DE $3(N-1)$ DIMENSIONES, OBTENIENDO EL SIGUIENTE SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES HOMOGENEAS:

$$\left(E^{(0)}_{n_\rho'' K''} - E \right) a^{(n_i'' l_i'' m_i'')}_{n_\rho'' K''} +$$

$$+ \sum_{\substack{K \neq 0 \\ (n_i l_i m_i)}} \sum_{\substack{K', n_\rho' \\ (n_i' l_i' m_i')}} a^{(n_i' l_i' m_i')}_{n_\rho' K'} \left\langle R^{(0)}_{n_\rho'' K''}(\rho) \middle| V^{(n_i l_i m_i)}_{K}(\rho) \middle| R^{(0)}_{n_\rho' K'}(\rho) \right\rangle \cdot$$

$$\cdot \left\langle W^{(n_i'' l_i'' L'' M'' \nu'')}_{K''}(\Omega) \middle| W^{(n_i l_i L M \nu)}_{K}(\Omega) \middle| W^{(n_i' l_i' L' M' \nu')}_{K'}(\Omega) \right\rangle = 0$$

(1.90)

COMO PUEDE OBSERVARSE, RESOLVIENDO LA ECUACION SECULAR CORRESPONDIENTE, PODEMOS CONOCER EL VALOR DE E Y LOS COEFICIENTES $a_{n_\ell K}^{(n_i l_i m_i)}$.

EN ESTE CASO GENERAL, EL CALCULO DE LAS INTEGRALES DE TRASLAPE:

$$\left\langle W_{K''}^{(n_i'' \ell_i'' L'' M'' \nu'')}(\Omega) \middle| W_K^{(n_i \ell_i L M \nu)}(\Omega) \middle| W_{K'}^{(n_i' \ell_i' L' M' \nu')}(\Omega) \right\rangle$$

ES AUN TEMA DE INVESTIGACION; LO MISMO PUEDE DECIRSE ACERCA DE LAS INTEGRALES:

$$\left\langle R_{n_\ell'' K''}^{(0)}(\rho) \middle| V_K^{(n_i \ell_i m_i)}(\rho) \middle| R_{n_\ell' K'}^{(0)}(\rho) \right\rangle$$

EN ESTA ULTIMA SECCION NO SE HAN INCLUIDO CONCEPTOS NUEVOS, PERO ES CONVENIENTE DISCUTIR EL CASO GENERAL PARA PODER APRECIAR EL ALCANCE DEL METODO Y SUS POSIBLES VENTAJAS. AUNQUE LA CONVERGENCIA DEL METODO ES TODAVIA MOTIVO DE INVESTIGACION, EVIDENTEMENTE SI ESTA RESULTA RAZONABLE, SE POSEERA UNA MANERA MAS SISTEMATICA PARA ESTUDIAR LOS SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS.

CAPITULO 2.

SISTEMAS ATOMICOS .

INTRODUCCION.

LA EXPLICACION DE LA ESTRUCTURA ATOMICA HA SIDO UNO DE LOS PRIMEROS PROBLEMAS DE MUCHOS CUERPOS CON LOS QUE SE HA ENCONTRADO LA FISICA MODERNA. POR NO EXISTIR UNA SOLUCION EXACTA DE ESTE, SE HAN FORMULADO VARIAS TECNICAS DE APROXIMACION COMO LO SON EL METODO VARIACIONAL Y EL MODELO DE PARTICULA INDEPENDIENTE, ENTRE OTROS. EN ESTE CAPITULO ESTUDIAREMOS LOS SISTEMAS ATOMICOS DESDE EL PUNTO DE VISTA DEL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS, ESTABLECIDO EN EL CAPITULO ANTERIOR.

CON EL FIN DE APROVECHAR LOS RESULTADOS OBTENIDOS EXPLICITAMENTE PARA EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS MEDIANTE EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS, AQUI DESARROLLAREMOS DE UNA MANERA DETALLADA EL ESTUDIO DE SISTEMAS ATOMICOS DE DOS ELECTRONES, OBTENIENDO ALGUNOS RESULTADOS PARA EL CASO PARTICULAR DEL ATOMO DE HELIO. EL CAMINO SEGUIDO PARA EL CASO DE ATOMOS DE DOS ELECTRONES, ES FACILMENTE GENERALIZABLE PARA SISTEMAS DE MAS ELECTRONES, AUNQUE DESDE LUEGO LAS EXPRESIONES OBTENIDAS SE COMPLICAN UN POCO MAS.

LA DIVISION DEL CAPITULO RESULTA, PUES, NATURAL: EN LA PRIMERA SECCION SE ESTUDIAN LOS SISTEMAS ATOMICOS DE DOS ELECTRONES. LA SEGUNDA SECCION CONSISTE EN LA GENERALIZACION DE LOS PASOS SEGUIDOS EN EL PRIMER CASO, PARA ATOMOS DE MUCHOS ELECTRONES; AUNQUE NO SE TRATA TAN DETALLADAMENTE .

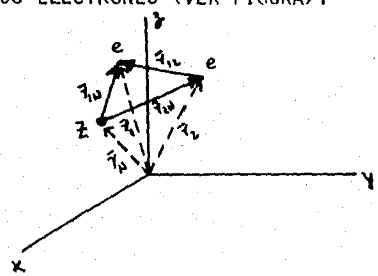
2.A. ATOMOS DE DOS ELECTRONES.

UN SISTEMA ATOMICO DE DOS ELECTRONES ES UN PROBLEMA DE TRES CUERPOS QUE INTERACCIONAN BAJO UNA FUERZA CENTRAL DE ORIGEN COULOMBIANO.

En este caso, el potencial que define a la interaccion es el siguiente:

$$\sum_{i<j}^{3} V(r_{ij}) = -\frac{Ze^2}{r_{1N}} - \frac{Ze^2}{r_{2N}} + \frac{e^2}{r_{12}} \qquad (2.1)$$

Donde Z es la carga del nucleo, $\bar{r}_{1N}$ y $\bar{r}_{2N}$ son los vectores relativos de cada electron respecto al nucleo y $\bar{r}_{12}$ el vector relativo entre ambos electrones (ver figura):



$$\begin{aligned} \bar{r}_{1N} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_N \\ \bar{r}_{2N} &= \bar{r}_2 - \bar{r}_N \\ \bar{r}_{12} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \end{aligned} \qquad (2.2)$$

El Hamiltoniano cuantico para este sistema de tres particulas es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{3}\frac{\nabla_i^2}{m_i} - \frac{Ze^2}{r_{1N}} - \frac{Ze^2}{r_{2N}} + \frac{e^2}{r_{12}} \qquad (2.3)$$

La ecuacion de Schroedinger correspondiente es la siguiente:

$$\hat{H}\,\Psi(\bar{r}_{1N}, \bar{r}_{2N}, \bar{r}_{12}) = E\,\Psi(\bar{r}_{1N}, \bar{r}_{2N}, \bar{r}_{12}) \qquad (2.4)$$

De acuerdo al Metodo de Coordenadas Hiperesfericas estudiado en el capitulo anterior, la parte cinetica del Hamiltoniano (2.3) puede separarse en una parte correspondiente al movimiento del centro de masa y otra al movimiento interno, empleando una transformacion lineal de las coordenadas de cada particula a un nuevo conjunto de coordenadas que in

CLUYEN AL CENTRO DE MASA. EN PARTICULAR, COMO NUEVO CONJUNTO SE ELIGIERON LAS COORDENADAS DE JACOBI, DEFINIDAS POR LA ECUACION 1.15, QUE PARA EL ATOMO DE DOS ELECTRONES TOMA LA FORMA:

$$\bar{\xi} = \left(\frac{m_e m_N}{m_e + m_N}\right)^{1/2} (\bar{r}_2 - \bar{r}_N)$$

$$\bar{\eta} = \left[\frac{m_e(m_e + m_N)}{2m_e + m_N}\right]^{1/2} \left(\bar{r}_1 - \frac{m_e \bar{r}_2 + m_N \bar{r}_N}{m_e + m_N}\right) \tag{2.5}$$

DONDE m_e ES LA MASA DEL ELECTRON Y m_N LA MASA DEL NUCLEO. AHORA BIEN, LA MASA DEL ELECTRON EN GENERAL ES MUCHO MENOR QUE LA DEL NUCLEO; ENTONCES, SI $m_e << m_N$ LAS ECUACIONES (2.5) SE REDUCEN A :

$$\bar{\xi} \doteq \sqrt{m_e}\ \bar{r}_{2N}$$

$$\bar{\eta} \doteq \sqrt{m_e}\ \bar{r}_{1N} \tag{2.6}$$

$$\text{Y} \qquad \bar{R} \doteq \bar{r}_N$$

COMBINANDO LAS DOS PRIMERAS EXPRESIONES DE (2.6) SE OBTIENE:

$$\bar{r}_{12} = \bar{r}_{1N} - \bar{r}_{2N} = \frac{1}{\sqrt{m_e}} (\bar{\eta} - \bar{\xi}) \tag{2.7}$$

LA TERCERA RELACION DE (2.6) NOS INDICA LA VALIDEZ DE CONSIDERAR EL CENTRO DE MASA FIJO EN EL NUCLEO, SUPOSICION HECHA EN OTROS METODOS DE APROXIMACION.

EMPLEANDO LAS SIMPLIFICACIONES INDICADAS ARRIBA (ECS. 2.6 Y 2.7) Y DE ACUERDO A LA EXPRESION 1.24B PARA $\mathcal{H}_{int}$, EL HAMILTONIANO INTERNO DEL

SISTEMA RESULTA:

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = -\frac{1}{2}\left(\nabla_\xi^2 + \nabla_\eta^2\right) - \frac{Ze^2\sqrt{m_e}}{\xi} - \frac{Ze^2\sqrt{m_e}}{\eta} + \frac{e^2\sqrt{m_e}}{|\bar{\xi}-\bar{\eta}|}$$

(2.8)

CONSECUENTEMENTE LA ECUACION DE SCHROEDINGER (2.4) TOMA LA FORMA:

$$\hat{\mathcal{H}}_{int}\,\Psi(\bar{\xi},\bar{\eta}) = E\,\Psi(\bar{\xi},\bar{\eta}) \qquad (2.9)$$

PARA EL TRATAMIENTO DEL PROBLEMA POR EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS, EXPRESEMOS LA ECUACION (2.8) EN TERMINOS DE ESTAS, QUE, PARA EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS ESTAN DADAS POR (EC. 1.26):

$$\xi = \rho \cos \alpha$$

$$\eta = \rho \operatorname{sen} \alpha$$

PARA LA PARTE CINETICA DEL HAMILTONIANO (2.8) LA TRANSFORMACION HA SIDO HECHA EN EL CAPITULO ANTERIOR Y ESTA DADA POR LAS EXPRESIONES (1.33) Y (1.34). AHORA ESCRIBIREMOS EL OPERADOR ASOCIADO A LA ENERGIA POTENCIAL (VER EC. 2.8):

$$V(\xi,\eta) = -\frac{Ze^2\sqrt{m_e}}{\xi} - \frac{Ze^2\sqrt{m_e}}{\eta} + \frac{e^2\sqrt{m_e}}{|\bar{\xi}-\bar{\eta}|},$$

(2.10)

EN FUNCION DE LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS.

PRIMERAMENTE, EXPRESEMOS EL COCIENTE

$$\frac{1}{|\bar{\xi}-\bar{\eta}|} = \left(\xi^2 + \eta^2 - 2\hat{\xi}\cdot\hat{\eta}\right)^{-\frac{1}{2}} \qquad (2.11)$$

COMO UN DESARROLLO MULTIPOLAR, ES DECIR:

$$\left(\xi^2+\eta^2-2\,\hat{\xi}\cdot\hat{\eta}\right)^{-\frac{1}{2}}= \sum_{\ell} \left(\frac{\xi_<^{\ell}}{\xi_>^{\ell+1}}\right) P_\ell\,(\hat{\xi}\cdot\hat{\eta})$$

(2.12)

ESTO ULTIMO EN TERMINOS DE LAS COORDENADAS HIPEPESFERICAS QUEDA:

$$\frac{1}{|\bar{\xi}-\bar{\eta}|}= \frac{1}{\rho} \sum_{\lambda} \left[\left.\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^{\ell}}{(\cos\alpha)_>^{\ell+1}}\right|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}} + \left.\frac{(\cos\alpha)_<^{\ell}}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{\ell+1}}\right|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}} \right]\cdot P_\ell\,(\hat{\xi}\cdot\hat{\eta}) \tag{2.13}$$

POR LO QUE, LA EXPRESION PARA EL POTENCIAL (EC.2.10), SE REDUCE A - LO SIGUIENTE:

$$V(\rho,\Omega) = -\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho}\left\{ \frac{Z}{\cos\alpha} + \frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha} - \right.$$

$$\left. - \sum_{\ell} \left[\left.\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^{\ell}}{(\cos\alpha)_>^{\ell+1}}\right|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}} + \left.\frac{(\cos\alpha)_<^{\ell}}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{\ell+1}}\right|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}} \right]\cdot P_\ell\,(\hat{\xi}\cdot\hat{\eta}) \right\} \tag{2.14}$$

OBSERVESE EN ESTA ULTIMA ECUACION LA SEPARABILIDAD DEL POTENCIAL EN UNA PARTE RADIAL Y OTRA ANGULAR. ESTO ES CARACTERISTICO DE LA INTERACCION COULOMBIANA ENTRE LAS PARTICULAS QUE CONSTITUYEN EL SISTEMA.

YA QUE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS SON SOLUCION DE LA PARTE ANGULAR DE LA ECUACION CORRESPONDIENTE AL OPERADOR LAPLACIANO HEXADIMENSIONAL Y FORMAN UNA BASE COMPLETA, ES POSIBLE EFECTUAR UNA EXPANSION DE LA PARTE ANGULAR DE LA ECUACION(2.14) PARA EL POTENCIAL EN TERMINOS DE DICHA BASE, ES DECIR:

$$\frac{Z}{\cos\alpha}+\frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha}-\sum_{l}\left[\left.\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^l}{(\cos\alpha)_>^{l+1}}\right|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}}+\left.\frac{(\cos\alpha)_<^l}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{l+1}}\right|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}}\right]\cdot P_l(\hat{\xi}\cdot\hat{\eta})=$$

$$=\sum_{\substack{k,l_3,l_4\\ m_3,m_4}} V_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}\, \mathcal{W}_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}(\Omega) \qquad (2.15)$$

DONDE $\mathcal{W}_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}(\Omega)$ ESTA DADO POR LA ECUACION (1.45) Y $V_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}$ ES LO SIGUIENTE:

$$V_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}=\int \mathcal{W}_k^{l_3 l_4 m_3 m_4 *}(\Omega)\left\{\frac{Z}{\cos\alpha}+\frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha}-\right.$$

$$\left.-\sum_{l}\left[\left.\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^l}{(\cos\alpha)_>^{l+1}}\right|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}}+\left.\frac{(\cos\alpha)_<^l}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{l+1}}\right|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}}\right]\cdot P_l(\hat{\xi}\cdot\hat{\eta})\right\} d\Omega \qquad (2.16)$$

LO CUAL PUEDE OBSERVARSE DIRECTAMENTE DE LA ECUACION (2.15.)

ENTONCES, LA POSIBILIDAD DE EXPANDER EL POTENCIAL (2.4) COMO LA SUMA:

$$V(\rho,\Omega)=-\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho}\sum_{\substack{k,l_3,l_4\\ m_3,m_4}} V_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}\, \mathcal{W}_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}(\Omega), \qquad (2.17)$$

SE REDUCE A LA OBTENCION EXPLICITA DE LOS COEFICIENTES $V_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}$ DE DICHA EXPANSION DADOS POR (2.16).

ANTES DE ESCRIBIR LA ECUACION DE SCHROEDINGER (2.9) EN COORDENADAS HIPERESFERICAS, ES OPORTUNO OBSERVAR QUE DEL ANALISIS DE LA EXPRESION 2.16 SE PUEDEN OBTENER ALGUNAS RESTRICCIONES PARA EL VALOR DE LOS INDICE DE LA SUMA (2.17): n, l_3, l_4 y $K (=2n+l_3+l_4)$ A CONTINUACION SE OBTENDRAN DICHAS RESTRICCIONES EN FORMA EXPLICITA.

GRACIAS AL TEOREMA DE ADICION PARA LOS ARMONICOS ESFERICOS (2):

$$P_l(\hat{\xi}\cdot\hat{\eta})=\sum_{l,m}\frac{4\pi}{2l+1}\,Y_l^{m *}(\hat{\xi})\,Y_l^{m}(\hat{\eta}) \qquad (2.18)$$

LA INTEGRAL DADA EN (2.16) SE REDUCE, ENTONCES, A LA SIGUIENTE EXPRESION:

$$V_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta} = \int W_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta *}(\Omega) \left\{ \frac{Z}{\cos\alpha} + \frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha} - \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \cdot \left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^l}{(\cos\alpha)_>^{l+1}}\Bigg|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}} + \frac{(\cos\alpha)_<^l}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{l+1}}\Bigg|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}} \right] \cdot Y_l^{m*}(\hat{\xi})\, Y_l^m(\hat{\eta}) \right\} d\Omega \tag{2.19}$$

ESCRIBAMOS EXPLICITAMENTE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS (EC.1.45) Y SABIENDO QUE EL ELEMENTO DE ANGULO SOLIDO HEXADIMENSIONAL ES (+):

$$d\Omega = (\operatorname{sen}^2\alpha \cos^2\alpha \, d\alpha) \cdot (d\Omega_\xi)(d\Omega_\eta) \tag{2.20}$$

CON $(d\Omega_a)$ EL ELEMENTO DE ANGULO SOLIDO TRIDIMENSIONAL USUAL. ENTONCES, LA INTEGRAL (2.19) QUEDA:

$$V_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta} = N_K^{l_\xi l_\eta} \int (\cos\alpha)^{l_\xi+2} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta+2} P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2}, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, Y_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{\xi})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{\eta}) \cdot \left\{ \frac{Z}{\cos\alpha} + \frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha} - \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \cdot \left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^l}{(\cos\alpha)_>^{l+1}}\Bigg|_{0<\alpha<\pi/4} + \frac{(\cos\alpha)_<^l}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{l+1}}\Bigg|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}} \right] Y_l^{m*}(\hat{\xi})\, Y_l^m(\hat{\eta}) \right\} \cdot d\alpha \, d\Omega_\xi \, d\Omega_\eta \tag{2.21}$$

ESTA ULTIMA EXPRESION ES EQUIVALENTE A LA SIGUIENTE:

$$V_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta} = N_K^{ll} \int \left\{ \frac{Z}{\cos\alpha} + \frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha} \right\} (\cos\alpha)^{l_\xi+2} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta+2} P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2}, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, d\alpha \cdot \int Y_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{\xi})\, d\Omega_\xi \cdot \int Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{\eta})\, d\Omega_\eta - N_K^{l_\xi l_\eta} \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \cdot \int (\cos\alpha)^{l_\xi+2} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta+2} \cdot P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2}, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) \left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^l}{(\cos\alpha)_>^{l+1}}\Bigg|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}} + \frac{(\cos\alpha)_<^l}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{l+1}}\Bigg|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}} \right] d\alpha \cdot \int Y_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{\xi})\, Y_l^{m*}(\hat{\xi})\, d\Omega_\xi \cdot \int Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{\eta})\, Y_l^m(\hat{\eta})\, d\Omega_\eta \tag{2.22}$$

(+) Ver Apendice 1 (B)

LLEVANDO A CABO LA INTEGRACION SOBRE LOS ARMONICOS ESFERICOS Y HACIENDO USO DE LAS PROPIEDADES:

$$\int Y_l^m(\theta,\varphi)\, d\Omega = \sqrt{4\pi}\int Y_l^m(\theta,\varphi)\, Y_0^0(\theta,\varphi)\, d\Omega = \sqrt{4\pi}\,\delta_{l,0}\,\delta_{m,0} \quad (2.23)$$

$$Y_l^{m*}(\theta,\varphi) = (-1)^m\, Y_l^{-m}(\theta,\varphi) \quad (2.24)$$

$$\int Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\, Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)\, d\Omega = \delta_{l,l'}\,\delta_{m,m'} \quad (2.25)$$

LA EXPRESION (2.22) SE REDUCE ENTONCES A LO SIGUIENTE:

$$V_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta} = N_K^{l_\xi l_\eta}(4\pi)\int_0^{\pi/2}(\cos\alpha)^{l_\xi+2}(\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta+2}\, P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\,\cdot$$

$$\cdot\left\{\left(\frac{Z}{\cos\alpha}+\frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha}\right)\delta_{l_\xi,0}\,\delta_{m_\xi,0}\,\delta_{l_\eta,0}\,\delta_{m_\eta,0} - \sum_{l,m}\frac{1}{2l+1}\cdot\left[\left.\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^l}{(\cos\alpha)_>^{l+1}}\right|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}} + \left.\frac{(\cos\alpha)_<^l}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{l+1}}\right|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}}\right]\cdot\right.$$

$$\left.\cdot(-1)^{m_\xi}\,\delta_{m_\eta,-m_\xi}\,\delta_{l_\eta,l}\,\delta_{l_\xi,l}\right\}d\alpha$$

(2.26)

DE ESTA ULTIMA RELACION SE OBTIENE UNA CONDICION SOBRE EL VALOR DE l_ξ Y l_η :

$$l_\xi = l_\eta = l \quad (2.27)$$

POR LO QUE, LA ECUACION (2.26) SE REDUCE A:

$$V_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta} = V_K^{l\,l\,m\,-m} = N_K^{ll}(4\pi)\int_0^{\pi/2}(\cos\alpha)^{l+2}(\operatorname{sen}\alpha)^{l+2}\, P_n^{(l+\frac{1}{2},\, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\,\cdot$$

$$\cdot\left\{\left(\frac{Z}{\cos\alpha}+\frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha}\right)\delta_{l,0}\,\delta_{m,0} - \sum_{l,m}\frac{1}{2l+1}\left[\left.\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^l}{(\cos\alpha)_>^{l+1}}\right|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}} + \left.\frac{(\cos\alpha)_<^l}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{l+1}}\right|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}}\right]\cdot\right. \quad (2.28)$$

$$\left.\cdot(-1)^{m_\xi}\,\delta_{m_\eta,-m_\xi}\,\delta_{l_\eta,l}\,\delta_{l_\xi,l}\right\}d\alpha$$

EXPLICITAMENTE, LA ECUACION ANTERIOR SE PUEDE ESCRIBIR COMO:

$$V_K^{\ell\ell m-m} = N_K^{00}(4\pi)\int_0^{\pi/2}(\cos\alpha)^2(\operatorname{sen}\alpha)^2 P_n^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\left(\frac{z}{\cos\alpha}+\frac{z}{\operatorname{sen}\alpha}\right)d\alpha -$$

$$-N_K^{\ell\ell}\cdot\frac{4\pi}{(2\ell+1)^{1/2}}\cdot\frac{(-1)^{2\ell}}{(2\ell+1)^{1/2}}\int_0^{\pi/2}(\cos\alpha)^{\ell+2}(\operatorname{sen}\alpha)^{\ell+2}P_n^{(\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^{\ell}}{(\cos\alpha)_>^{\ell+1}}\bigg|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}}+\frac{(\cos\alpha)_<^{\ell}}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{\ell+1}}\bigg|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}}\right]\cdot$$

$$\cdot(-1)^{m_\xi}\,\delta_{m_\eta,-m_\xi}\cdot d\alpha \qquad (2.29)$$

EMPLEANDO LA PROPIEDAD DE LOS COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN(2):

$$\left(\ell m_i\, \ell m_j \,|\, 0 0\right) = (-1)^{\ell-m_i}(2\ell+1)^{-\frac{1}{2}}\,\delta_{m_i,-m_j} \qquad (2.30)$$

LA ECUACION (2.29) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$V_K^{\ell\ell m-m} = (\ell m\, \ell\text{-}m\,|\,00)\left(\frac{4\pi}{\sqrt{2\ell+1}}\right)(-1)^{\ell}N_K^{\ell\ell}\cdot$$

$$\cdot\int_0^{\pi/2}(\cos\alpha)^{\ell+2}(\operatorname{sen}\alpha)^{\ell+2}P_n^{(\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\cdot\left\{\left(\frac{z}{\cos\alpha}+\frac{z}{\operatorname{sen}\alpha}\right)\delta_{\ell,0}\,\delta_{m,0}\,-\right.$$

$$\left.-\left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^{\ell}}{(\cos\alpha)_>^{\ell+1}}\bigg|_{\alpha}+\frac{(\cos\alpha)_<^{\ell}}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{\ell+1}}\bigg|_{\alpha}\right]\right\}\cdot d\alpha \qquad (2.31)$$

INTRODUZCAMOS ESTO ULTIMO EN LA ECUACION 2.17, SABIENDO QUE $\ell_\xi=\ell_\eta$, $m_\xi=-m_\eta$, OBTENEMOS ENTONCES:

$$V(\rho,\Omega) = -\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho}\sum_{K,\ell,m}V_K^{\ell\ell m-m}\,W_K^{\ell\ell m-m}(\Omega)$$

$$= -\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho}\sum_{K,\ell}\left(\frac{4\pi}{\sqrt{2\ell+1}}\right)(-1)^{\ell}N_K^{\ell\ell}\cdot\int_0^{\pi/2}(\cos\alpha)^{\ell+2}(\operatorname{sen}\alpha)^{\ell+2}P_n^{(\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\cdot$$

$$\cdot\left\{\left(\frac{z}{\cos\alpha}+\frac{z}{\operatorname{sen}\alpha}\right)\delta_{\ell,0}\,\delta_{m,0}-\left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^{\ell}}{(\cos\alpha)_>^{\ell+1}}\bigg|_{\alpha}+\frac{(\cos\alpha)_<^{\ell}}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{\ell+1}}\bigg|_{\alpha}\right]\right\}\cdot d\alpha\cdot\sum_m(\ell m\,\ell\text{-}m\,|\,00)\,W_K^{\ell\ell m-m}(\Omega) \qquad (2.32)$$

El acoplamiento vectorial indicado por el ultimo factor en la expresion (2.32) equivale a considerar unicamente aquellos armonicos hiperesfericos de momento angular total cero ($L=0$; $M=0$), es decir:

$$\sum_{m} (\ell\, m\, \ell\text{-}m \,|\, 0\, 0)\; W_{k}^{\ell\ell m -m}(\Omega) = W_{k}^{\ell\ell L=0\, M=0}(\Omega) \qquad (2.33)$$

Si definimos a $V_{k}^{\ell\ell m -m} \equiv V_{k}^{\ell}$ como:

$$V_{k}^{\ell} = \frac{4\pi}{\sqrt{2\ell+1}} \cdot (-1)^{\ell} N_{k}^{\ell\ell} \int_{0}^{\pi/2} (\cos\alpha)^{\ell+2} (\operatorname{sen}\alpha)^{\ell+2} P_{n}^{(\ell+\frac{1}{2},\, \ell+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, \cdot$$
$$\cdot \left\{ \left(\frac{Z}{\cos\alpha} + \frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha} \right) \delta_{\ell,0}\, \delta_{m,0} - \left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha)_{<}^{\ell}}{(\cos\alpha)_{>}^{\ell+1}} + \frac{(\cos\alpha)_{<}^{\ell}}{(\operatorname{sen}\alpha)_{>}^{\ell+1}} \right] \right\} d\alpha \quad . (2.34)$$

Entonces, el potencial $V(\rho,\Omega)$ se representa por la siguiente expansion (ver ec. 2.17):

$$V(\rho,\Omega) = -\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho} \sum_{k,\ell} V_{k}^{\ell}\; W_{k}^{\ell\ell\, L=0\, M=0}(\Omega) \qquad (2.35)$$

El hecho de que podamos expander el potencial en terminos de armonicos hiperesfericos con momento angular total cero, unicamente refleja la simetria rotacional del sistema, que en todo instante hemos supuesto aislado. Esto es debido exclusivamente a la forma del potencial para el sistema atomico de dos electrones. En este caso $L=0$ y $M=0$ simplifica considerablemente el calculo de elementos de matriz.

Es interesante observar que los unicos terminos que contribuyen al desarrollo (2.35) son aquellos que tienen k par, lo cual se puede ver facilmente de la expresion explicita para k:

$$k = 2n + l_3 + l_4 \;=\; 2n + 2\ell \;=\; 2(n+\ell) = \text{par}$$

Hasta ahora sabemos solamente que n es un numero entero, pero nos preguntamos si existe alguna otra restriccion a su valor. Para contestar a esta pregunta, consideremos la integral que define a V_{k}^{ℓ} en la ecuacion (2.34):

$$V_k^l = \frac{4\pi}{\sqrt{2l+1}} (-1)^l N_k^{ll} \int_0^{\pi/2} (\cos\alpha)^{l+2} (\operatorname{sen}\alpha)^{l+2} P_n^{(l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) \cdot$$

$$\cdot \left\{ \left(\frac{Z}{\cos\alpha} + \frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha} \right) \delta_{l,0}\, \delta_{m,0} - \left[\left. \frac{(\operatorname{sen}\alpha)_<^l}{(\cos\alpha)_>^{l+1}} \right|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}} + \left. \frac{(\cos\alpha)_<^l}{(\operatorname{sen}\alpha)_>^{l+1}} \right|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}} \right] \right\} d\alpha$$

HACIENDO EL CAMBIO DE VARIABLE DE INTEGRACION:

$$\beta = \frac{\pi}{2} - \alpha$$

QUE EQUIVALE A INTERCAMBIAR DE POSICION LOS ELECTRONES, COMO PUEDE APRECIARSE DE LA ECUACION (1.26):

$$\xi = \rho \cos\alpha$$

$$\eta = \rho \operatorname{sen}\alpha$$

LA SUBSTITUCION $\beta = \frac{\pi}{2} - \alpha$ EQUIVALE AL CAMBIO $\bar{\xi} \rightarrow \bar{\eta}$.

EN TERMINOS DE LO ANTERIOR SE VE FACILMENTE QUE LA EXPRESION (2.34) RESULTA SER:

$$V_k^l = \frac{4\pi}{\sqrt{2l+1}} (-1)^l N_k^{ll} \int_{\frac{\pi}{2}}^{0} (\operatorname{sen}\beta)^{l+2} (\cos\beta)^{l+2} P_n^{(l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2})}(-\cos 2\beta) \cdot$$

$$\cdot \left\{ \left(\frac{Z}{\operatorname{sen}\beta} + \frac{Z}{\cos\beta} \right) \delta_{l,0}\, \delta_{m,0} - \left[\left. \frac{(\cos\beta)_<^l}{(\operatorname{sen}\beta)_>^{l+1}} \right|_{\frac{\pi}{4}<\beta<\frac{\pi}{2}} + \left. \frac{(\operatorname{sen}\beta)_<^l}{(\cos\beta)_>^{l+1}} \right|_{0<\beta<\frac{\pi}{4}} \right] \right\} \cdot (-d\beta) \qquad (2.36)$$

LOS POLINOMIOS DE JACOBI TIENEN LA SIGUIENTE PROPIEDAD DE SIMETRIA:

$$P_n^{(a,b)}(-\gamma) = (-1)^n P_n^{(b,a)}(\gamma) \qquad (2.37)$$

QUE EN ESTE CASO PARTICULAR TIENE LA FORMA

$$P_n^{(l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2})}(-\cos 2\beta) = (-1)^n P_n^{(l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\beta)$$

POR LO TANTO, LA ECUACION (2.36) SE REDUCE A:

$$V_k^l = (-1)^n \frac{4\pi}{\sqrt{2l+1}} (-1)^l N_k^{ll} \int_0^{\pi/2} (\cos\beta)^{l+2} (\operatorname{sen}\beta)^{l+2} P_n^{(l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\beta) \cdot$$

$$\cdot \left\{ \left(\frac{Z}{\cos\beta} + \frac{Z}{\operatorname{sen}\beta} \right) \delta_{l,0}\, \delta_{m,0} - \left[\left. \frac{(\operatorname{sen}\beta)_<^l}{(\cos\beta)_>^{l+1}} \right|_{0<\beta<\frac{\pi}{4}} + \left. \frac{(\cos\beta)_<^l}{(\operatorname{sen}\beta)_>^{l+1}} \right|_{\frac{\pi}{4}<\beta<\frac{\pi}{2}} \right] \right\} \cdot d\beta \qquad (2.38)$$

OBSERVESE QUE EL VALOR DE LA INTEGRAL EN LA ECUACION(2.38)ES EL MISMO QUE EN LA ECUACION(2.34),POR LO QUE,PARA QUE V_k^ℓ SEA LA MISMA EN AMBAS EXPRESIONES,ES NECESARIO QUE:

$$n = par \tag{2.39}$$

HEMOS ENCONTRADO,PUES,LAS RESTRICCIONES PARA EL VALOR DE LOS INDICES l_ξ, l_η Y n ,QUE DETERMINAN LAS CONTRIBUCIONES A LA EXPANSION -- (2.35) Y EL HECHO DE QUE l_ξ Y l_η SEAN IGUALES,ASI COMO n PAR,REFLEJA LA SIMETRIA ESPACIAL DEL PROBLEMA BAJO EL INTERCAMBIO DE LOS DOS ELECTRONES QUE,DESPUES DE TODO,SON PARTICULAS IDENTICAS (NO HEMOS CONSIDERADO AUN EL SPIN DE CADA PARTICULA).LOS VALORES DE V_k^ℓ DADOS POR LA EXPRESION(2.34),PUEDEN SER CALCULADOS DE ACUERDO A LAS RESTRICCIONES ENCONTRADAS.EN EL CASO PARTICULAR DEL ATOMO DE HELIO ($Z=2$) SE HAN OBTENIDO LOS SIGUIENTES VALORES:

$$\begin{aligned}
V_0^0 &= \frac{8\pi^{1/2}}{3}\left(8-\sqrt{2}\right) & V_4^0 &= -\frac{32}{35}\pi^{1/2}\left(6+\frac{\sqrt{2}}{4}\right) \\
V_2^0 &= 0 & V_4^1 &= 0 \\
V_2^1 &= \frac{16\sqrt{2}}{15}\pi^{1/2} & V_4^2 &= -\frac{32}{35}\pi^{1/2}
\end{aligned} \tag{2.40}$$

ESCRIBAMOS LA ECUACION DE SCHROEDINGER PARA EL ATOMO DE DOS ELECTRONES EN COORDENADAS HIPERESFERICAS COMO SIGUE:

$$\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\hat{K}^2(\Omega)}{\rho^2}\right)-E\right\}\Psi(\rho,\Omega)-\left\{\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho}\sum_{k,\ell}V_k^\ell\, W_k^{\ell\ell 00}(\Omega)\right\}\Psi(\rho,\Omega)=0, \tag{2.41}$$

DONDE SE HA EMPLEADO LA EXPANSION (2.35)PARA EL POTENCIAL Y LA RELACION (1.34) PARA LA PARTE CINETICA DEL HAMILTONIANO EN COORDENADAS HIPERESFERICAS.

DESDE LUEGO, LA RELACION ANTERIOR PUEDE RESOLVERSE ESCRIBIENDO EXPLICITAMENTE LA FORMA DEL POTENCIAL DADA POR (EC. 2.14):

$$V(\rho,\Omega) = -\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho}\left(\frac{Z}{\cos\alpha}+\frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha}-\sum_{\ell}\left[\left.\frac{(\operatorname{sen}\alpha)^{\ell}_{<}}{(\cos\alpha)^{\ell+1}_{>}}\right|_{0<\alpha<\frac{\pi}{4}}+\left.\frac{(\cos\alpha)^{\ell}_{<}}{(\operatorname{sen}\alpha)^{\ell+1}_{>}}\right|_{\frac{\pi}{4}<\alpha<\frac{\pi}{2}}\right]\cdot P_\ell(\hat{\xi}\cdot\hat{\eta})\right)$$

ENTONCES, LA ECUACION DE SCHROEDINGER TOMA LA FORMA:

$$\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\hat{K}^2(\Omega)}{\rho^2}\right)-E\right\}\Psi(\rho,\Omega)\ -$$

$$-\left\{\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho}\left(\frac{Z}{\cos\alpha}+\frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha}-\sum_{\ell}\left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha)^{\ell}_{<}}{(\cos\alpha)^{\ell+1}_{>}}+\frac{(\cos\alpha)^{\ell}_{<}}{(\operatorname{sen}\alpha)^{\ell+1}_{>}}\right]P_\ell(\hat{\xi}\cdot\hat{\eta})\right)\right\}\Psi(\rho,\Omega)=0 \qquad (2.42)$$

LAS ECUACIONES (2.41) Y (2.42) SON EQUIVALENTES. EL TRABAJAR CON LA ECUACION (2.41) NOS PROPORCIONA LA VENTAJA DE OBTENER LAS INTEGRALES DE TRASLAPE DEL TIPO:

$$\left\langle W^{\ell''\ell''L''M''}_{k''}(\Omega)\ \middle|\ W^{\lambda\lambda 00}_{k}(\Omega)\ \middle|\ W^{\ell'\ell'L'M'}_{k'}(\Omega)\right\rangle$$

QUE NOS PERMITEN SEÑALAR ALGUNAS REGLAS DE SELECCION PARA EL VALOR DE ℓ'', λ Y ℓ', ASI COMO UNA MANERA SISTEMATICA DE APLICACION DEL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS AL CALCULARSE UNA EXPRESION EXPLICITA DE DICHAS INTEGRALES DE TRASLAPE. LA SOLUCION DE LA ECUACION (2.42) NOS LLEVA AL MISMO RESULTADO Y LA DIFICULTAD MATEMATICA ES MENOR, PERO NO PRESENTA RESULTADOS GENERALIZABLES ASI COMO INFORMACION, COMO LO HACE LA (2.41).

EN LA SOLUCION DE AMBAS VERSIONES DE LA ECUACION DE SCHROEDINGER, SE HACE USO DEL HECHO DE QUE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS CONSTITUYEN UNA BASE COMPLETA, PARA ASI EXPRESAR LA FUNCION DE ONDA COMO LA EXPANSION SIGUIENTE:

$$\Psi(\rho,\Omega)=\sum_{k',\ell'_\xi,\ell'_\eta} R_{k'}(\rho)\, W^{\ell'_\xi\ell'_\eta L'M'}_{k'}(\Omega) \qquad (2.43)$$

CON EL OBJETO DE ILUSTRAR LO MAS DETALLADAMENTE POSIBLE EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS DISCUTIDO EN EL CAPITULO ANTERIOR, TRABAJAREMOS CON LA ECUACION 2.41, POR PROPORCIONAR RESULTADOS MAS GENERALES Y

LAS VENTAJAS MENCIONADAS ANTERIORMENTE.

SUBSTITUYAMOS, PUES, EL DESARROLLO (2.43) EN LA ECUACION (2.41) Y RECORDANDO QUE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS SON EIGENFUNCIONES DEL OPERADOR $\hat{K}^2(\Omega)$ OBTENEMOS:

$$\sum_{k',l_3',l_4'} \left\{ -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{k'(k'+4)}{\rho^2} \right) - E \right\} R_{k'}(\rho)\, \mathcal{W}_{k'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) -$$

$$- \frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho} \sum_{k,l} \sum_{k',l_3',l_4'} V_k^l\, R_{k'}(\rho)\, \mathcal{W}_{k}^{ll00}(\Omega)\, \mathcal{W}_{k'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) = 0$$

(2.44)

MULTIPLIQUEMOS AHORA POR $\mathcal{W}_{k''}^{l_3'' l_4'' L'' M'' *}(\Omega)$ E INTEGREMOS SOBRE TODOS LOS ANGULOS, ENTONCES (2.44) SE REDUCE AL SIGUIENTE SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{k''(k''+4)}{\rho^2} \right) - E \right\} R_{k''}(\rho) -$$

$$- \frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho} \sum_{k,l} \sum_{k',l_3',l_4'} V_k^l\, R_{k'}(\rho) \left\langle \mathcal{W}_{k''}^{l_3'' l_4'' L'' M''}(\Omega) \middle| \mathcal{W}_{k}^{ll00}(\Omega) \middle| \mathcal{W}_{k'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) \right\rangle = 0$$

(2.45)

ENCONTREMOS AHORA UNA BASE PARA LAS FUNCIONES RADIALES COMO SIGUE. COMO SE DISCUTIO EN EL CAPITULO ANTERIOR, EN EL CASO $K=0$ LAS ECUACIONES EN (2.45) SE DESACOPLAN, OBTENIENDOSE LO SIGUIENTE:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{k''(k''+4)}{\rho^2} \right) - \frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho} V_0^0\, \mathcal{W}_0^{0000} \right\} R_{n_\rho'' k''}(\rho) = E^{(0)}_{n_\rho'' k''}\, R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho)$$

(2.46)

DONDE V_0^0 Y $\mathcal{W}_0^{0000}$ SON COSTANTES, COMO PUEDE VERIFICARSE DE (2.40) Y (1.45).

LLAMEMOS $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ AL HAMILTONIANO ASOCIADO A LA ECUACION (2.46), ES DECIR:

$$\hat{\mathcal{H}}^{(0)} R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho) = E^{(0)}_{n_\rho'' k''} R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho)$$

(2.47)

CON

$$\hat{\mathcal{H}}^{(0)} \equiv -\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{k''(k''+4)}{\rho^2} \right) - \frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho} V_0^0 W_0^{0000}$$

OBSERVESE QUE EL HAMILTONIANO CORRESPONDIENTE A ESTA APROXIMACION ES INDEPENDIENTE DE LAS VARIABLES ANGULARES, Y ADEMAS ES DEL TIPO DEL ATOMO DE HIDROGENO. ES ENTONCES DE ESPERARSE QUE LA FUNCION DE ONDA $R^{(0)}_{n_\rho'' k''}$ SEA PARECIDA A LA DEL ATOMO DE HIDROGENO, PERO GENERALIZADA.

PARA COMPROBAR ESTO ULTIMO, TRATEMOS POR EJEMPLO EL CASO ESPECIFICO DEL ATOMO DE HELIO, ENCONTRANDO EXPLICITAMENTE LA FORMA DE $R^{(0)}_{n_\rho'' k''}$ PARA ESTE SISTEMA. DE LAS RELACIONES (2.40) Y (1.45), PARA EL ATOMO DE HELIO:

$$V_0^0 = \frac{8\pi^{1/2}}{3}(8-\sqrt{2}) \qquad W_0^{0000} = \pi^{-\frac{3}{2}}$$

LA ECUACION (2.46) TOMA ENTONCES LA FORMA:

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{d}{d\rho} + \left[2E + \frac{32 e^2\sqrt{m_e}}{3\pi\rho}\left(4 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) - \frac{k''(k''+4)}{\rho^2} \right] \right\} R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho) = 0$$

(2.48)

HACIENDO EL CAMBIO DE VARIABLE

$$\mu = \alpha_n \rho \quad ; \quad \alpha_n \equiv \sqrt{-2E},$$

LA EXPRESION (2.48) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$\left\{ \frac{d^2}{d\mu^2} + \frac{5}{\mu}\frac{d}{d\mu} + \left(\frac{\nu}{\mu} - 1 - \frac{k''(k''+4)}{\rho^2} \right) \right\} R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\mu) = 0$$

(2.49)

CON

$$\nu \equiv \frac{32 e^2 \sqrt{m_e}}{3\pi\,\alpha_n}\left(4 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$$

EL COMPORTAMIENTO DE $R^{(0)}_{n_\rho'' k''}$ CUANDO $\mu \to \infty$ ES DE LA FORMA:

$$R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\mu) \sim e^{-\mu}$$

DE MANERA QUE:

$$R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\mu) = e^{-\mu} f(\mu) \tag{2.50}$$

DONDE $f(\mu)$ SATISFACE LA ECUACION:

$$f''(\mu) + \left(\frac{5}{\mu} - 2\right) f'(\mu) + \left[\frac{\nu - 5}{\mu} - \frac{k''(k''+4)}{\mu^2} \right] f(\mu) = 0 \tag{2.51}$$

ESTA ULTIMA RELACION ES SINGULAR EN $\mu = 0$, POR LO QUE EL COMPORTAMIENTO DE $f(\mu)$ CERCA DEL ORIGEN ES

$$f(\mu) \sim \mu^a$$

DONDE SE PUEDE DEMOSTRAR QUE $a = k''$ POR LO QUE PODEMOS ESCRIBIR:

$$f(\mu) = \mu^{k''} S(\mu) \tag{2.52}$$

CON $S(\mu)$ UNA FUNCION CONTINUA QUE SATISFACE LA ECUACION

$$S''(\mu) + \left[\frac{2k''+5}{\mu} - 2 \right] S'(\mu) + \left[\frac{\nu - 5 - 2k''}{\mu} \right] S(\mu) = 0 \tag{2.53}$$

SI AHORA, HACEMOS EL CAMBIO DE VARIABLE

$$\sigma = 2\mu$$

(2.53) QUEDA COMO SIGUE:

$$S''(\sigma) + (2k''+5-\sigma) S'(\sigma) + \left(\frac{\nu - 5 - 2k''}{2} \right) S(\sigma) = 0 \tag{2.54}$$

ESTA ULTIMA RELACION ES SATISFECHA POR LOS POLINOMIOS DE LAGUERRE(3):

$$S(\mu) = S(\sigma) = L^{2k''+4}_{n_\rho''}(\sigma) = L^{2k''+4}_{n_\rho''}(2\mu) \tag{2.55}$$

CON n_ρ DADO POR LA SIGUIENTE EXPRESION:

$$n''_\rho = \frac{\nu - 5 - 2K''}{2} \tag{2.56}$$

ENTONCES, LA FORMA EXPLICITA DE $R^{(0)}_{n''_\rho K''}$ PARA EL ATOMO DE HELIO, ESTA DADA POR LA COMBINACION DE LAS EXPRESIONES (2.50)(2.52) Y (2.55):

$$R^{(0)}_{n''_\rho K''}(\rho) = N_{n''_\rho}\, e^{-\alpha_n \rho} \left(\alpha_n \rho\right)^{K''} L^{2K''+4}_{n''_\rho}\left(2\alpha_n \rho\right) \tag{2.57}$$

DONDE

$$\alpha_n = \sqrt{-2\, E^{(0)}_{n''_\rho K''}}$$

Y $N_{n''_\rho}$ ES LA CONSTANTE DE NORMALIZACION DADA POR:

$$N_{n''_\rho} = \left[\frac{\left(2\alpha_n\right)^6 \; n''_\rho!}{\left(2K''+4+n''_\rho\right)!\,\left(2K''+5+2n''_\rho\right)}\right]^{1/2} \tag{2.57A}$$

EL VALOR DE LA ENERGIA $E^{(0)}_{n''_\rho K''}$ ESTA DADO POR (2.56) JUNTO CON LA DEFINICION DE ν EN (2.49):

$$E^{(0)}_{n''_\rho K''} = -\frac{\left[\frac{32}{3\pi}\left(4 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right]^2}{2\left(2K''+2n''_\rho+5\right)^2} \quad ; \; n''_\rho = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.58}$$

EN UNIDADES DE $\dfrac{m e^4}{\hbar^2}$.

EN LA TABLA 2-1 SE MUESTRA EL NUMERO DE ESTADOS QUE, DE ACUERDO A LA ECUACION (2.58) CORRESPONDEN A LA MISMA ENERGIA, ES DECIR: LA DEGENERACION. EN DICHA TABLA SE HACE USO DEL HECHO DE QUE LA FUNCION DE ONDA -- QUE DESCRIBE AL SISTEMA DEBE SER ANTISIMETRICA; POR ELLO APARECEN LOS ESTADOS SINGULETE ($S=0$) (FUNCION DE SPIN ANTISIMETRICA) Y TRIPLETE - ($S=1$) (FUNCION DE SPIN SIMETRICA), COMBINADOS CON LAS FUNCIONES DE ONDA ESPACIALES SIMETRICA Y ANTISIMETRICA RESPECTIVAMENTE. POR ESTA UL-

				2	1	3_s	(7)	0_A	(1)	
				1	2	3_A	(7)	1_s	(3)	
						2_s	(5)	0_A	(1)	
						2_A	(5)	1_s	(3)	
						1_s	(3)	0_A	(1)	
						1_A	(3)	1_s	(3)	
			1_A	1	0	1_s	(3)	1_s	(3)	
				0	1	1_A	(3)	0_s	(1)	
	4	0	0	0	0	0_s	(1)	0_A	(1)	
	3	1	0	1	0	1_s	(3)	0_A	(1)	
				0	1	1_A	(3)	1_s	(3)	
	2	2	0	2	0	2_s	(5)	0_A	(1)	
				0	2	2_A	(5)	1_s	(3)	
				1	1	2_s	(5)	0_A	(1)	
						1_A	(3)	1_s	(3)	
						0_s	(1)	0_A	(1)	
			1_A	0	0	0_s	(1)	1_s	(3)	
	1	3	0	3	0	3_s	(7)	0_A	(1)	
				0	3	3_A	(7)	1_s	(3)	
				2	1	3_s	(7)	0_A	(1)	
				1	2	3_A	(7)	1_s	(3)	
						2_s	(5)	0_A	(1)	
						2_A	(5)	1_s	(3)	
						1_s	(3)	0_A	(1)	
						1_A	(3)	1_s	(3)	
			1_A	1	0	1_s	(3)	1_s	(3)	
4				0	1	1_A	(3)	0_A	(1)	356
	0	4	0	4	0	4_s	(9)	0_A	(1)	
				0	4	4_A	(9)	1_s	(3)	
				3	1	4_s	(9)	0_A	(1)	
				1	3	4_A	(9)	1_s	(3)	
						3_s	(7)	0_A	(1)	
						3_A	(7)	1_s	(3)	
						2_s	(5)	0_A	(1)	
						2_A	(5)	1_s	(3)	
				2	2	4_s	(9)	0_A	(1)	
						3_A	(7)	1_s	(3)	
						2_s	(5)	0_A	(1)	
						1_A	(3)	1_s	(3)	
						0_s	(1)	0_A	(1)	
			1_A	2	0	2_s	(5)	1_s	(3)	
				0	2	2_A	(5)	0_s	(1)	
				1	1	2_s	(5)	1_A	(3)	
						1_A	(3)	0_s	(1)	
						0_s	(1)	1_A	(3)	
			2	0	0	0_s	(1)	0_A	(1)	

TIMA PROPIEDAD SE PUEDEN DETERMINAR LOS ESTADOS CORRESPONDIENTES AL -- PARAHELIO ($S=0$) Y ORTOHELIO ($S=1$) .

TABLA 2-1

$N=n_\rho''+K''$	n_ρ''	K''	n''	l_ξ''	l_η''	L	$(2L+1)$	S	$(2S+1)$	DEG.
0	0	0	0	0	0	0_S	(1)	0_A	(1)	1
	1	0	0	0	0	0_S	(1)	0_A	(1)	
1	0	1	0	1	0	1_S	(3)	0_A	(1)	13
				0	1	1_A	(3)	1_S	(3)	
	2	0	0	0	0	0_S	(1)	0_A	(1)	
	1	1	0	1	0	1_S	(3)	0_A	(1)	
				0	1	1_A	(3)	1_S	(3)	
2	0	2	0	2	0	2_S	(5)	0_A	(1)	51
				0	2	2_A	(5)	1_S	(3)	
				1	1	2_S	(5)	0_A	(1)	
						1_A	(3)	1_S	(3)	
						0_S	(1)	0_A	(1)	
			1_A	0	0	0_S	(1)	1_S	(3)	
	3	0	0	0	0	0_S	(1)	0_A	(1)	
	2	1	0	1	0	1_S	(3)	0_A	(1)	
				0	1	1_A	(3)	1_S	(3)	
	1	2	0	2	0	2_S	(5)	0_A	(1)	
				0	2	2_A	(5)	1_S	(3)	
				1	1	2_S	(5)	0_A	(1)	
						1_A	(3)	1_S	(3)	
						0_S	(1)	0_A	(1)	
			1_A	0	0	0_S	(1)	1_S	(3)	
3	0	3	0	3	0	3_S	(7)	0_A	(1)	151
				0	3	3_A	(7)	1_S	(3)	
				2	1	3_S	(7)	0_A	(1)	
				1	2	3_A	(7)	1_S	(3)	
						2_S	(5)	0_A	(1)	
						2_A	(5)	1_S	(3)	
						1_S	(3)	0_A	(1)	
						1_A	(3)	1_S	(3)	
			1_A	1	0	1_S	(3)	1_S	(3)	
				0	1	1_A	(3)	0_S	(1)	
	4	0	0	0	0	0_S	(1)	0_A	(1)	

SE PUEDE APRECIAR QUE, EN GENERAL, LA APROXIMACION $k=0$ (EC. 2.46) - SIEMPRE PROPORCIONARA SOLUCIONES DEL TIPO (2.57) PARA SISTEMAS ATOMICOS DE DOS ELECTRONES. PARA EL ESTADO BASE DEL ATOMO DE HELIO, ESTA APROXIMACION DA UN VALOR DE $E_{00}^{(0)} = -2.50$, QUE, COMPARADA CON EL VALOR OBSERVADO DE $E_{exp}^{(0)} = -2.90$ NO ES MUY BUENA, PERO RECUERDESE QUE ESTA ES LA APROXIMACION DE ORDEN CERO.

VOLVIENDO A NUESTRO TRATAMIENTO GENERAL PARA SISTEMAS ATOMICOS DE DOS ELECTRONES, EL CONJUNTO DE FUNCIONES $R_{n_\rho' k'}^{(0)}$ QUE SATISFACEN (2.47), -- CONSTITUYE UNA BASE COMPLETA, POR LO QUE PODEMOS EXPRESAR LA FUNCION DE ONDA COMO SIGUE:

$$\Psi(\rho, \Omega) = \sum_{k', l_\xi', l_\eta', n_\rho'} a_{n_\rho' k'}^{l_\xi' l_\eta'} R_{n_\rho' k'}^{(0)}(\rho) \, W_{k'}^{l_\xi' l_\eta' L' M'}(\Omega) \tag{2.59}$$

DONDE LA SUMA SOBRE n_ρ' INCLUYE AL ESPECTRO DISCRETO Y CONTINUO. TODO EL ESTUDIO HECHO HASTA AHORA ES COMPLETAMENTE GENERAL, ES DECIR, NO HEMOS DICHO NADA ACERCA DE LA SIMETRIA O ANTISIMETRIA DE LA FUNCION DE ONDA RESPECTO AL INTERCAMBIO DE LOS ELECTRONES; AHORA NOS ENCARGAREMOS DE ELLO CON CIERTO DETALLE.

COMO PUEDE OBSERVARSE DE LA ECUACION (2.59), LA PARTE RADIAL DE LA FUNCION DE ONDA ES TOTALMENTE SIMETRICA RESPECTO AL INTERCAMBIO DE LAS PARTICULAS; ESTO SE VE DE LA FORMA EXPLICITA DE $\rho = (\xi^2 + \eta^2)^{1/2}$. POR TANTO, LA SIMETRIA O ANTISIMETRIA DE INTERCAMBIO DE LA FUNCION DE ONDA ESTARA DETERMINADA POR LA PARTE ANGULAR, ES DECIR, LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS.- ESTUDIEMOS ENTONCES LAS PROPIEDADES DE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS RESPECTO AL INTERCAMBIO DE LAS DOS PARTICULAS (ELECTRONES).

CONSIDERESE EL SIGUIENTE ARMONICO HIPERESFERICO:

$$W_{k'}^{l_\xi' l_\eta' L' M'}(\alpha, \hat{\xi}, \hat{\eta}) = N_{k'}^{l_\xi' l_\eta'} (\cos\alpha)^{l_\xi'} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta'} P_{n'}^{(l_\eta'+\frac{1}{2}, l_\xi'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) \cdot \sum_{m_\xi', m_\eta'} (l_\xi' m_\xi' l_\eta' m_\eta' | L' M') \, Y_{l_\xi'}^{m_\xi'}(\hat{\xi}) \, Y_{l_\eta'}^{m_\eta'}(\hat{\eta}) \tag{2.60}$$

SI AHORA INTERCAMBIAMOS LOS ELECTRONES, ESTO CORRESPONDE AL CAMBIO (VER PAG. 45):

$$\alpha \longrightarrow \frac{\pi}{2} - \alpha \; ; \quad \bar{\eta} \longrightarrow \bar{\xi}$$

POR LO QUE LA EXPRESION PARA (2.60) CORRESPONDIENTE A ESTO ES:

$$\mathcal{W}_{K'}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}\left(\frac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}\right) = N_{K'}^{l'_\xi l'_\eta} (\operatorname{sen}\alpha)^{l'_\xi} (\cos\alpha)^{l'_\eta} P_{n'}^{(l'_\eta+\frac{1}{2},\, l'_\xi+\frac{1}{2})}(-\cos 2\alpha)\ \cdot$$

$$\cdot \sum_{m'_\xi, m'_\eta} (l'_\xi m'_\xi l'_\eta m'_\eta | L'M')\, Y_{l'_\xi}^{m'_\xi}(\hat{\eta})\, Y_{l'_\eta}^{m'_\eta}(\hat{\xi}) \tag{2.61}$$

HACIENDO USO DE LA PROPIEDAD DE SIMETRIA DE LOS POLINOMIOS DE JACOBI:

$$P_n^{(a,b)}(-\gamma) = (-1)^n P_n^{(b,c)}(\gamma),$$

ASI COMO DE LA PROPIEDAD DE LOS COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN(2):

$$(l_1 m_1 l_2 m_2 | LM) = (-1)^{l_1+l_2-L} (l_2 m_2 l_1 m_1 | LM),$$

LA EXPRESION (2.61) SE REDUCE FINALMENTE A LO SIGUIENTE:

$$\mathcal{W}_{K'}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}\left(\frac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}\right) = (-1)^{\frac{1}{2}(K'+l'_\xi+l'_\eta)-L'}\, \mathcal{W}_{K'}^{l'_\eta l'_\xi L'M'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \tag{2.62}$$

LA FUNCION DE ONDA ESPACIAL SIMETRICA O ANTISIMETRICA CORRESPONDE AL - ARMONICO HIPERESFERICO S-METRICO O ANTISIMETRICO DE ACUERDO A LO DIS-- CUTIDO ANTERIORMENTE, POR LO QUE LA EXPRESION DE SIMETRIZACION O ANTISI METRIZACION RESPECTO AL INTERCAMBIO DE LOS ELECTRONES ES LA SIGUIENTE COMBINACION:

$${}^{S}_{A}\mathcal{W}_{K'}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) = \frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{l'_\xi l'_\eta})}}\left[\mathcal{W}_{K'}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \pm \mathcal{W}_{K'}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}\left(\frac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}\right)\right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{l'_\xi l'_\eta})}}\left[\mathcal{W}_{K'}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \pm (-1)^{\frac{1}{2}(K'+l'_\xi+l'_\eta)-L}\, \mathcal{W}_{K'}^{l'_\eta l'_\xi L'M'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta})\right] \tag{2.63}$$

DONDE EL SIGNO POSITIVO CORRESPONDE A LA FUNCION DE ONDA ESPACIAL SIME TRICA Y EL NEGATIVO A LA ANTISIMETRICA. EN CONSECUENCIA, LAS FUNCIONES DE SPIN ASOCIADAS SON REPECTIVAMENTE: ANTISIMETRICA ($S=0$; SINGULETE) Y SIME TRICA ($S=1$; TRIPLETE).

EN EL CASO PARTICULAR $l'_\xi = l'_\eta = l'$,SE PUEDE DEMOSTRAR QUE LA SIMETRIA O ANTISIMETRIA ESPACIAL DE LA FUNCION DE ONDA ESTA DETERMINADA POR EL VALOR DE L' Y n' .ES UTIL REALIZAR ESTO ULTIMO COMO SIGUE.

CONSIDEREMOS LAS EXPRESIONES PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS EN (2.63):

$$\mathcal{W}_{k'}^{l'l'L'M'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) = \sum_{m'_\xi,m'_\eta} (l'm'_\xi\, l'm'_\eta|L'M')\, N_k^{l'l'} (\cos\alpha)^{l'} (\operatorname{sen}\alpha)^{l'} P_n^{(l'+\frac{1}{2},l'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, Y_{l'}^{m'_\xi}(\hat{\xi})\, Y_{l'}^{m'_\eta}(\hat{\eta}) \tag{2.63A}$$

$$\mathcal{W}_{k'}^{l'l'L'M'}(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}) = \sum_{m'_\xi,m'_\eta} (l'm'_\xi\, l'm'_\eta|L'M')\, N_{k'}^{l'l'} (\operatorname{sen}\alpha)^{l'} (\cos\alpha)^{l'} P_{n'}^{(l'+\frac{1}{2},l'+\frac{1}{2})}(-\cos 2\alpha)\, Y_{l'}^{m'_\xi}(\hat{\eta})\, Y_{l'}^{m'_\eta}(\hat{\xi}) \tag{2.63B}$$

TRATAREMOS AHORA DE ENCONTRAR UNA RELACION ENTRE AMBAS EXPRESIONES.LOS INDICES DE SUMA EN (2.63B)PUEDEN INTERCAMBIARSE (SON INDICES MUDOS);POR LO QUE LA EXPRESION (2.63B)RESULTA:

$$\mathcal{W}_{k'}^{l'l'L'M'}(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}) = \sum_{m'_\eta m'_\xi} (l'm_\eta\, l'm_\xi|L'M')\, N_k^{l'l'} (\cos\alpha)^{l'} (\operatorname{sen}\alpha)^{l'} P_{n'}^{(l'+\frac{1}{2},l'+\frac{1}{2})}(-\cos 2\alpha)\,\cdot$$

$$\cdot\, Y_{l'}^{m'_\eta}(\hat{\eta})\, Y_{l'}^{m'_\xi}(\hat{\xi}) \tag{2.63C}$$

APROVECHANDO LA PROPIEDAD DE SIMETRIA DE LOS COEFICIENTES DE CLEBSCH--GORDAN (2):

$$(l_1 m_1 l_2 m_2|LM) = (-1)^{l_1+l_2-L}\,(l_2 m_2 l_1 m_1|LM)$$

Y ADEMAS EMPLEANDO LA RELACION DE SIMETRIA PARA LOS POLINOMIOS DE JACOBI:

$$P_n^{(a,b)}(-\gamma) = (-1)^n\, P_n^{(b,a)}(\gamma)$$

LA ECUACION 2.66 RESULTA:

$$\mathcal{W}_{k'}^{l'l'L'M'}\left(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}\right) = (-1)^{2l'-L'+n'} \sum_{m'_\xi, m'_\eta} (l' m'_\xi l' m'_\eta | L'M') \cdot$$

$$\cdot N_{k'}^{l'l'} (\cos\alpha)^{l'} (\operatorname{sen}\alpha)^{l'} P_{n'}^{(l'+\frac{1}{2}, l'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, Y_{l'}^{m'_\xi}(\hat{\xi})\, Y_{l'}^{m'_\eta}(\hat{\eta})$$

COMPARANDO ESTA ULTIMA EXPRESION CON (2.64), SE CONCLUYE QUE:

$$\mathcal{W}_{k'}^{l'l'L'M'}\left(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}\right) = (-1)^{2l'-L'+n'}\, \mathcal{W}_{k'}^{l'l'L'M'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \tag{2.63D}$$

DE AQUI, LA ECUACION (2.63) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$ {}^{S}_{A}\mathcal{W}_{k'}^{l'l'L'M'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) = \mathcal{W}_{k'}^{l'l'L'M'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 \pm (-1)^{n'-L'}\right)$$

DE DONDE SE CONCLUYE QUE LA FUNCION DE ONDA ESPACIAL (CON $l'_\xi = l'_\eta$) TIENE SIMETRIA O ANTISIMETRIA SI:

$n' - L' =$ PAR _____ SIMETRICA

$n' - L' =$ NON ______ ANTISIMETRICA

DESDE LUEGO, COMO SE DEMOSTRO CON ANTERIORIDAD (EC. 2.39), SI $L = 0$, n ES PAR, SIENDO EL POTENCIAL SIMETRICO BAJO EL INTERCAMBIO DE LAS PARTICULAS.

EN EL CASO EN QUE $l'_\xi \neq l'_\eta$, EL ANALISIS DEBE HACERSE EMPLEANDO LA EXPRESION (2.63). ENTONCES LA FUNCION DE ONDA ESPACIAL SIMETRICA O ANTISIMETRICA (2.59) SE ESCRIBE COMO SIGUE:

$$ {}^{S}_{A}\Psi(\rho,\Omega) = \sum_{\substack{k'\, l'_\xi l'_\eta \\ n'_\rho}} a_{n'_\rho k'}^{l'_\xi l'_\eta}\, R_{n'_\rho k'}^{(0)}(\rho)\; {}^{S}_{A}\mathcal{W}_{k'}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}(\Omega) \tag{2.64}$$

SUBSTITUYENDO ESTE DESARROLLO EN LA ECUACION 2.41 SE OBTIENE (+):

(+) $\mathcal{W}_k^{ll00}$ es simétrica por lo discutido anteriormente.

$$\sum_{\substack{k',l_s',l_\eta' \\ n_\rho'}} \left\{ -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{k'(k'+4)}{\rho^2} \right) - E \right\} a^{l_s' l_\eta'}_{n_\rho' k'} R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) \, {}^{A}_{S}W^{l_s' l_\eta' L' M'}_{k'}(\Omega) -$$

$$- \frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho} \sum_{k,l} \sum_{\substack{k',l_s',l_\eta' \\ n_\rho'}} a^{l_s' l_\eta'}_{n_\rho' k'} V^l_k R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) \, \mathcal{W}^{ll00}_{k}(\Omega) \, {}^{S}_{A}W^{l_s' l_\eta' L' M'}_{k}(\Omega) = 0$$

(2.65)

ESCRIBIENDO EXPLICITAMENTE EL TERMINO $k=0$ Y HACIENDO USO DE (2.47) LA RELACION ANTERIOR SE REDUCE A:

$$\sum_{\substack{k',l_s',l_\eta' \\ n_\rho'}} \left(E^{(0)}_{n_\rho' k'} - E \right) a^{l_s' l_\eta'}_{n_\rho' k'} R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) \, {}^{S}_{A}W^{l_s' l_\eta' L' M'}_{k'}(\Omega) -$$

$$- \frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho} \sum_{\substack{k\neq 0 \\ l}} \sum_{\substack{k',l_s',l_\eta' \\ n_\rho'}} a^{l_s' l_\eta'}_{n_\rho' k'} V^l_k R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) \, \mathcal{W}^{ll00}_{k}(\Omega) \, {}^{S}_{A}W^{l_s' l_\eta' L' M'}_{k'}(\Omega) = 0$$

(2.66)

OBSERVESE QUE LA FUNCION $\mathcal{W}^{ll00}_{k}(\Omega)$ ES SIMETRICA. APROVECHANDO LA ORTONORMALIDAD DE LA BASE HIPERESFERICA ASI COMO DE LA BASE RADIAL, LO CUAL SE DISCUTIO CON ANTERIORIDAD, MULTIPLIQUEMOS (2.66) POR $\left(R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho) \, {}^{S}_{A}W^{l_s'' l_\eta'' L'' M''}_{k''}(\Omega) \right)^{*}$ E INTEGREMOS SOBRE TODO EL ESPACIO, DE DONDE EL SIGUIENTE SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES HOMOGENEAS SE OBTIENE:

$$\left(E^{(0)}_{n_\rho'' k''} - E \right) a^{l_s'' l_\eta''}_{n_\rho'' k''} - e^2\sqrt{m_e} \sum_{\substack{k\neq 0 \\ l}} \sum_{\substack{k',l_s',l_\eta' \\ n_\rho'}} a^{l_s' l_\eta'}_{n_\rho' k'} V^l_k \, \cdot$$

$$\cdot \left\langle R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho) \middle| \frac{1}{\rho} \middle| R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) \right\rangle \cdot \left\langle {}^{S}_{A}W^{l_s'' l_\eta'' L'' M''}_{k''}(\Omega) \middle| \mathcal{W}^{ll00}_{k}(\Omega) \middle| {}^{S}_{A}W^{l_s' l_\eta' L' M'}_{k'}(\Omega) \right\rangle$$

$$= 0 \qquad (2.67)$$

COMO SE HA MENCIONADO EN EL CAPITULO 1 ,ESTE SISTEMA TIENE SOLUCION NO TRIVIAL SI SU DETERMINANTE ES NULO,LO QUE EQUIVALE A RESOLVER LA ECUACION SECULAR CORRESPONDIENTE.DE ESTA MANERA,EL VALOR DE E PUEDE SER CONOCIDO ASI COMO LOS COEFICIENTES $a_{n_\rho K}^{l_3 l_4}$.

LAS INTEGRALES DEL TIPO

$$\left\langle R_{n_\rho'' K''}^{(0)}(\rho) \right| \frac{1}{\rho} \left| R_{n_\rho' K'}^{(0)}(\rho) \right\rangle = \int_0^\infty R_{n_\rho'' K''}^{(0)}(\rho)^* \left(\frac{1}{\rho}\right) R_{n_\rho'' K''}^{(0)}(\rho)\, \rho^5\, d\rho \tag{2.68}$$

PUEDEN SER CALCULADAS UNA VEZ QUE SE CONOCE LA FORMA EXPLICITA DE $R_{n_\rho'' K''}^{(0)}$. EN EL CASO PARTICULAR DEL ATOMO DE HELIO $R_{n_\rho'' K''}^{(0)}$ ESTA DADA POR (2.57) Y SI EN GENERAL $n_\rho'' \neq n_\rho'$ ENTONCES:

$$\left\langle R_{n_\rho'' K''}^{(0)}(\rho) \right| \frac{1}{\rho} \left| R_{n_\rho' K'}^{(0)}(\rho) \right\rangle =$$

$$= \int N_1 N_2\, e^{-(\alpha_{n_\rho''}+\alpha_{n_\rho'})\rho}\, \alpha_{n_\rho''}^{K''} \alpha_{n_\rho'}^{K'}\, \rho^{K''+K'+5}\, L_{n_\rho''}^{2K''+4}(2\alpha_{n_\rho''}\rho)\, L_{n_\rho'}^{2K'+4}(2\alpha_{n_\rho'}\rho)\, d\rho \tag{2.69}$$

CON N DADA POR (2.57A).

ANALOGAMENTE, EL CALCULO DE INTEGRALES:

$$\left\langle {}^{s}_{A}W_{K''}^{l_3'' l_4'' L'' M''}(\Omega) \right| W_{K}^{\lambda\lambda 00}(\Omega) \left| {}^{s}_{A}W_{K'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega) \right\rangle =$$

$$= \int {}^{s}_{A}W_{K''}^{l_3'' l_4'' L'' M''}(\Omega)^*\, W_{K}^{\lambda\lambda 00}(\Omega)\, W_{K'}^{l_3' l_4' L' M'}(\Omega)\, d\Omega \tag{2.70}$$

PERMITIRA OBTENER LAS REGLAS DE SELECCION PARA LOS VALORES DE l_3', l_4', l_3'', l_4'' y λ. A CONTINUACION ANALIZAREMOS CON DETALLE LA INTEGRAL ANGULAR (2.70).

ESCRIBAMOS LA INTEGRAL (2.70) CON ${}^{s}_{A}\mathcal{W}^{l_\xi l_\eta LM}_{K}(\Omega)$ DADO POR (2.63):

$$\left\langle {}^{s}_{A}\mathcal{W}^{l''_\xi l''_\eta L''M''}_{K''}(\Omega) \middle| \mathcal{W}^{ll00}_{K}(\Omega) \middle| {}^{s}_{A}\mathcal{W}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}_{K'}(\Omega) \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{2} \int \left(\mathcal{W}^{l''_\xi l''_\eta L''M''}_{K''}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \pm \mathcal{W}^{l''_\xi l''_\eta L''M''}_{K''}(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}) \right)^{*} \left(\mathcal{W}^{ll00}_{K}(\Omega) \right) \cdot$$

$$\cdot \left(\mathcal{W}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}_{K'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \pm \mathcal{W}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}_{K'}(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}) \right) \cdot d\Omega$$

(2.71)

DE AQUI OBTENEMOS UN TERMINO DIRECTO D Y OTRO DE INTERCAMBIO I CUYAS - EXPRESIONES SON:

$$D = \frac{1}{2} \int \mathcal{W}^{ll00}_{K}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \left(\mathcal{W}^{l''_\xi l''_\eta L''M''\,*}_{K''}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta})\, \mathcal{W}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}_{K'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) + \mathcal{W}^{l''_\xi l''_\eta L''M''\,*}_{K''}(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi})\, \mathcal{W}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}_{K'}(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}) \right) d\Omega$$

(2.72)

$$I = \frac{1}{2} \int \mathcal{W}^{ll00}_{K}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \left(\mathcal{W}^{l''_\xi l''_\eta L''M''\,*}_{K''}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta})\, \mathcal{W}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}_{K'}(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi}) + \mathcal{W}^{l''_\xi l''_\eta L''M''\,*}_{K''}(\tfrac{\pi}{2}-\alpha,\hat{\eta},\hat{\xi})\, \mathcal{W}^{l'_\xi l'_\eta L'M'}_{K'}(\alpha,\hat{\xi},\hat{\eta}) \right) d\Omega$$

(2.73)

SE PUEDE DEMOSTRAR QUE LOS UNICOS TERMINOS QUE CONTRIBUYEN A LA INTEGRAL (2.71) SON AQUELLOS DONDE SE CUMPLEN LAS SIGUIENTES CONDICIONES O REGLAS DE SELECCION:

$$\begin{aligned} l''_\xi + l + l'_\xi &= \text{PAR} \\ l''_\eta + l + l'_\eta &= \text{PAR} \\ l'_\xi + l + l''_\eta &= \text{PAR} \\ l'_\eta + l + l''_\xi &= \text{PAR} \end{aligned} \qquad (2.74)$$

ESTO ULTIMO SE OBTIENE HACIENDO USO EXPLICITO DE LOS ARMONICOS -- HIPERESFERICOS, ASI COMO DE LA PROPIEDAD (2):

$$\langle l_\xi'' l_\eta'' L'' M'' \,|\, l l 0 0 \,|\, l_\xi' l_\eta' L' M' \rangle = \frac{4\pi}{\sqrt{2l+1}} \langle l_\xi'' l_\eta'' L'' M'' \,|\, P_l(\hat{\xi}\cdot\hat{\eta}) \,|\, l_\xi' l_\eta' L' M' \rangle$$

$$= \frac{4\pi}{\sqrt{2l+1}} (-1)^{l_\xi' + L + l_\eta''} \delta_{L''L}\, \delta_{M''M} \,.$$

$$\cdot \begin{Bmatrix} L' & l_\eta'' & l_\xi'' \\ l & l_\xi' & l_\eta' \end{Bmatrix} \left[(2l_\xi'+1)(2l_\xi''+1)(2l_\eta'+1)(2l_\eta''+1) \right]^{1/2} \cdot \begin{pmatrix} l_\xi' & l & l_\xi'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_\eta' & l & l_\eta'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(2.75)

DONDE

$$|\, l_\xi l_\eta L M \rangle = \sum_{m_\xi, m_\eta} (l_\xi m_\xi l_\eta m_\eta | L M)\, Y_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{\xi})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{\eta})$$

DE LA EXPRESION (2.75) SE VE INMEDIATAMENTE QUE LA CONDICION (2.74) SE DEBE CUMPLIR PARA QUE LA INTEGRAL $\langle l_\xi'' l_\eta'' L'' M'' | l l 0 0 | l_\xi' l_\eta' L' M' \rangle$ SEA NO NULA.

EN TERMINOS DE ESTO DISCUTIDO, LAS INTEGRALES DIRECTA Y DE INTER-- CAMBIO TOMAN LA SIGUIENTE FORMA EXPLICITA:

$$D = \frac{1}{2} \langle l_\xi'' l_\eta'' L'' M'' \,|\, l l 0 0 \,|\, l_\xi' l_\eta' L' M' \rangle \cdot N_{K''}^{l_\xi'' l_\eta''} \cdot N_K^{l l} \cdot N_{K'}^{l_\xi' l_\eta'} \,.$$

$$\cdot \Bigg\{ \int_0^{\pi/2} P_{n''}^{(l_\eta''+\frac{1}{2},\, l_\xi''+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_n^{(l+\frac{1}{2},\, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_{n'}^{(l_\eta'+\frac{1}{2},\, l_\xi'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, (\cos\alpha)^{l_\xi'+l+l_\xi''+2} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta'+l+l_\eta''+2}\, d\alpha \,+$$

$$+ (-1)^{n'+n''} \int_0^{\pi/2} P_{n''}^{(l_\xi''+\frac{1}{2},\, l_\eta''+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_n^{(l+\frac{1}{2},\, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_{n'}^{(l_\xi'+\frac{1}{2},\, l_\eta'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\xi'+l+l_\xi''+2} (\cos\alpha)^{l_\eta'+l+l_\eta''+2}\, d\alpha \Bigg\}$$

(2.76)

$$I = \frac{1}{2} \langle l_5'' l_4'' L'' M'' | l l 0 0 | l_5' l_4' L' M' \rangle \cdot N_{k''}^{l_5'' l_4''} \cdot N_k^{l l} \cdot N_{k'}^{l_5' l_4'} \cdot$$

$$\cdot \left\{ (-1)^{n''} \int_0^{\pi/2} P_{n''}^{(l_5''+\frac{1}{2}, l_4''+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_n^{(l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_{n'}^{(l_4'+\frac{1}{2}, l_5'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, (\operatorname{sen}\alpha)^{l_5''+l+l_4'+2} (\cos\alpha)^{l_4''+l+l_5'+2}\, d\alpha + \right.$$

$$\left. + (-1)^{n'} \int_0^{\pi/2} P_{n''}^{(l_4''+\frac{1}{2}, l_5''+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_n^{(l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_{n'}^{(l_5'+\frac{1}{2}, l_4'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, (\operatorname{sen}\alpha)^{l_4''+l+l_5'+2} (\cos\alpha)^{l_5''+l+l_4'+2}\, d\alpha \right\}$$

(2.77)

EN LA EXPRESION(2.76), EL VALOR DE LAS INTEGRALES QUE APARECEN -- DENTRO DEL PARENTESIS ANGULAR,ES EXACTAMENTE EL MISMO;ESTO SE PUEDE VER FACILMENTE SI EN UNA DE DICHAS INTEGRALES HACEMOS EL CAMBIO DE VARIABLE DE INTEGRACION:

$$\beta = \frac{\pi}{2} - \alpha ,$$

Y EMPLEAMOS LA PROPIEDAD DE SIMETRIA DE LOS POLINOMIOS DE JACOBI(EC.-- 2.37).GRACIAS A ESTO,LA ECUACION(2.76)SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$D = \frac{1}{2} \langle l_5'' l_4'' L'' M'' | l l 0 0 | l_5' l_4' L' M' \rangle \cdot \left[1 + (-1)^{2n''+2n'+n} \right] \cdot$$

$$\cdot \int_0^{\pi/2} P_{n''}^{(l_4''+\frac{1}{2}, l_5''+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_n^{(l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_{n'}^{(l_4'+\frac{1}{2}, l_5'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, (\cos\alpha)^{l_5'+l+l_5''+2} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_4'+l+l_4''+2}\, d\alpha$$

(2.78)

FINALMENTE,COMO SE HA DEMOSTRADO QUE n ES UN NUMERO PAR (EC.2.39), CONCLUIMOS QUE LA EXPRESION(2.78)ES:

$$D = \langle l_5'' l_4'' L'' M'' | l l 0 0 | l_5' l_4' L' M' \rangle \cdot$$

$$\cdot \int_0^{\pi/2} P_{n''}^{(l_4''+\frac{1}{2}, l_5''+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_n^{(l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_{n'}^{(l_4'+\frac{1}{2}, l_5'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, (\cos\alpha)^{l_5'+l+l_5''+2} \cdot$$

$$\cdot (\operatorname{sen}\alpha)^{l_4'+l+l_4''+2}\, d\alpha \qquad (2.79)$$

DE MANERA ANALOGA, LA INTEGRAL DE INTERCAMBIO (2.77) RESULTA SER:

$$I = (-1)^{n''} \langle l_\xi'' l_\eta'' L'' M'' \mid l l 0 0 \mid l_\xi' l_\eta' L' M' \rangle \cdot$$

$$\cdot \int_0^{\pi/2} P_{n''}^{(l_\xi''+\frac{1}{2},\, l_\eta''+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_n^{(l+\frac{1}{2},\, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_{n'}^{(l_\eta'+\frac{1}{2},\, l_\xi'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, (\cos\alpha)^{l_\xi'+l+l_\eta''+2} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta'+l+l_\xi''+2}\, d\alpha$$

(2.80)

EMPLEANDO ESTOS ULTIMOS RESULTADOS PARA EL VALOR DE D E I, LA INTEGRAL DE TRASLAPE (2.71) SE REDUCE FINALMENTE A LA SIGUIENTE EXPRESION:

$$\left\langle {}^S_A W_{k''}^{l_\xi'' l_\eta'' L'' M''}(\Omega) \;\middle|\; W_k^{l l 0 0}(\Omega) \;\middle|\; {}^S_A W_{k'}^{l_\xi' l_\eta' L' M'}(\Omega) \right\rangle =$$

$$= N_{k''}^{l_\xi'' l_\eta''} \cdot N_k^{l l} \cdot N_{k'}^{l_\xi' l_\eta'} \langle l_\xi'' l_\eta'' L'' M'' \mid l l 0 0 \mid l_\xi' l_\eta' L' M' \rangle \cdot$$

$$\cdot \int_0^{\pi/2} P_n^{(l+\frac{1}{2},\, l+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_{n'}^{(l_\eta'+\frac{1}{2},\, l_\xi'+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, (\cos\alpha)^{l_\xi'+l+2} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta'+l+2} \cdot$$

$$\cdot \left[(\cos\alpha)^{l_\xi''} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta''} P_{n''}^{(l_\eta''+\frac{1}{2},\, l_\xi''+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) \pm (-1)^{n''} (\cos\alpha)^{l_\eta''} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\xi''} P_{n''}^{(l_\xi''+\frac{1}{2},\, l_\eta''+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) \right] d\alpha$$

(2.81)

HEMOS PUES, OBTENIDO UNA EXPRESION PARA LA INTEGRAL DE TRASLAPE -- (2.70) Y ESTE ANALISIS NOS HA PERMITIDO EXPRESAR REGLAS DE SELECCION - PARA EL VALOR DE LOS NUMEROS $l_\xi'', l_\eta'', l_\xi', l_\eta', l$; COMO PUEDE APRECIARSE EN (2.74). ES OPORTUNO OBSERVAR QUE NO HAY RESTRICCIONES ADICIONALES PARA EL VALOR DE n' Y n'', EXCEPTO QUE SEAN NUMEROS ENTEROS POSITIVOS.

2.B SISTEMAS ATOMICOS EN GENERAL.

EL ESTUDIO DE ATOMOS DE MUCHOS ELECTRONES POR EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS SIGUE FUNDAMENTALMENTE EL CAMINO SEÑALADO EN LA SECCION ANTERIOR, AUNQUE LAS EXPRESIONES OBTENIDAS SE COMPLICAN, COMO PODRA APRECIARSE. SIN EMBARGO LA VENTAJA QUE OFRECE ESTE METODO, ES DECIR: SU TRATAMIENTO EXACTO, SIGUE SIENDO MUY VALIOSA. ALGUNOS DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS EN EL CAPITULO ANTERIOR PARA EL CASO GENERAL, SERAN UTILIZADOS AQUI.

EL HAMILTONIANO PARA UN ATOMO DE N ELECTRONES Y CARGA NUCLEAR Z ES EL SIGUIENTE:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hbar^2 \sum_{i=1}^{N} \frac{\nabla_i^2}{2m_i} - \sum_{i=1}^{N} \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} \tag{2.82}$$

DONDE LA PRIMERA SUMA CORRESPONDE A LA ENERGIA CINETICA DEL SISTEMA, LA SEGUNDA REPRESENTA LA ATRACCION NUCLEO-ELECTRON Y LA TERCERA A LA ENERGIA REPULSIVA INTERELECTRONICA.

SEPARANDO LA PARTE CORRESPONDIENTE AL CENTRO DE MASA MEDIANTE LAS COORDENADAS DE JACOBI (VER CAPITULO 1), LA PARTE DEL HAMILTONIANO (2.82) ASOCIADA AL MOVIMIENTO INTERNO RESULTA:

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \nabla_{S_i}^2 - \sum_{i=1}^{N} \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} \tag{2.83}$$

YA QUE LA MASA DEL NUCLEO ES MUCHO MAYOR QUE LA DE LOS ELECTRONES

$$m_N \gg \sum_{i=1}^{N-1} (m_e)_i$$

SE PUEDE OBTENER CON BUENA APROXIMACION LA SIGUIENTE EXPRESION PARA LAS

COORDENADAS DE JACOBI (VER EC.1.68)

$$\bar{\xi}_i \doteq \sqrt{m_e}\ \bar{r}_{i+1} \quad ; \quad \bar{R} \doteq \bar{r}_N \quad ; \quad \bar{r}_{ij} = \frac{1}{\sqrt{m_e}} (\bar{\xi}_i - \bar{\xi}_j)$$

(2.84)

DE ACUERDO A ESTO, EL HAMILTONIANO (2.83) PUEDE ESCRIBIRSE COMO :

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \nabla^2_{\xi_i} - \sum_{i=1}^{N-1} \frac{Ze^2\sqrt{m_e}}{\xi_i} + \sum_{i<j}^{N-1} \frac{e^2\sqrt{m_e}}{|\bar{\xi}_i - \bar{\xi}_j|}$$

(2.85)

INTRODUZCAMOS LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS, EN SU EXPRESION GENERAL - (EC.1.73):

$$\xi_i = \rho \operatorname{sen} \alpha_{N-1} \cdots \operatorname{sen} \alpha_{i+1} \cos \alpha_i$$

(2.86)

Y REALICEMOS EL DESARROLLO MULTIPOLAR:

$$\frac{1}{|\bar{\xi}_i - \bar{\xi}_j|} = \left(\xi_i^2 + \xi_j^2 - 2\hat{\xi}_i \cdot \hat{\xi}_j \right)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l} \left(\frac{\xi_{i<}^{l}}{\xi_{j>}^{l+1}} \right) P_l(\hat{\xi}_i \cdot \hat{\xi}_j)$$

(2.87)

EMPLEANDO (2.86) EL ANTERIOR DESARROLLO (2.87) PUEDE ESCRIBIRSE EN TERMINOS DE COORDENADAS HIPERESFERICAS COMO:

$$\frac{1}{|\bar{\xi}_i - \bar{\xi}_j|} = \frac{1}{\rho} \sum_{l} \left[\frac{(\operatorname{sen} \alpha_{N-1} \cdots \operatorname{sen} \alpha_{i+1} \cos \alpha_i)_<^{l}}{(\operatorname{sen} \alpha_{N-1} \cdots \operatorname{sen} \alpha_{j+1} \cos \alpha_j)_>^{l+1}} \right] P_l(\hat{\xi}_i \cdot \hat{\xi}_j)$$

DE MANERA QUE EL POTENCIAL PARA ESTE SISTEMA PUEDE EXPRESARSE COMO:

$$V(\rho,\Omega) = -\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho}\left\{\sum_{i=1}^{N-1}\left(\frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha_{N-1}\cdots\operatorname{sen}\alpha_{i+1}\cos\alpha_i}\right) - \right.$$

$$\left. -\sum_{\ell}\sum_{i<j}\left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha_{N-1}\cdots\operatorname{sen}\alpha_{i+1}\cos\alpha_i)^{\ell}_{<}}{(\operatorname{sen}\alpha_{N-1}\cdots\operatorname{sen}\alpha_{j+1}\cos\alpha_j)^{\ell+1}_{>}}\right]\cdot P_\ell(\hat{\xi}_i\cdot\hat{\xi}_j)\right\}$$

(2.88)

AQUI NUEVAMENTE, SE PUEDE APRECIAR LA SEPARABILIDAD EN UNA PARTE RADIAL Y OTRA ANGULAR DE ESTA EXPRESION. COMO SE HIZO EN EL ATOMO DE DOS ELECTRONES, EXPRESEMOS LA PARTE ANGULAR DEL POTENCIAL EN TERMINOS DE ARMONICOS HIPERESFERICOS:

$$\sum_{i=1}^{N-1}\left(\frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha_{N-1}\cdots\operatorname{sen}_{i+1}\cos\alpha_i}\right) - \sum_{\ell}\sum_{i<j}\left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha_{N-1}\cdots\operatorname{sen}\alpha_{i+1}\cos\alpha_i)^{\ell}_{<}}{(\operatorname{sen}\alpha_{N-1}\cdots\operatorname{sen}\alpha_{j+1}\cos\alpha_j)^{\ell+1}_{>}}\right]\cdot$$

$$\cdot\ P_\ell(\hat{\xi}_i\cdot\hat{\xi}_j) = \sum_{k,\ell_i} V_k^{\ell_i}\ W_k^{(n_i\ell_i LM\nu)}(\Omega)$$

DONDE LOS COEFICIENTES QUE DEFINEN EL DESARROLLO ESTAN DADOS POR:

$$V_k^{\ell_i} = \int W_k^{(n_i\ell_i LM\nu)^*}(\Omega)\left\{\sum_{i=1}^{N-1}\left(\frac{Z}{\operatorname{sen}\alpha_{N-1}\cdots\operatorname{sen}\alpha_{i+1}\cos\alpha_i}\right) - \right.$$

$$\left. -\sum_{\ell}\sum_{i<j}\left[\frac{(\operatorname{sen}\alpha_{N-1}\cdots\operatorname{sen}\alpha_{i+1}\cos\alpha_i)^{\ell}_{<}}{(\operatorname{sen}\alpha_{N-1}\cdots\operatorname{sen}\alpha_{j+1}\cos\alpha_j)^{\ell+1}_{>}}\right] P_\ell(\hat{\xi}_i\cdot\hat{\xi}_j)\right\} d\Omega \qquad (2.89)$$

OBSERVESE QUE EL CALCULO DE INTEGRALES DEL TIPO (2.89) ES BASTANTE MAS COMPLICADO QUE PARA EL CASO DE TRES CUERPOS. LAS RESTRICCIONES POSIBLES PARA EL VALOR DE ℓ_i, n_i Y k, PUEDEN HALLARSE ANALIZANDO LA INTEGRAL (2.89); DICHO ANALISIS ES TEMA ABIERTO A LA INVESTIGACION.

SIGUIENDO LOS MISMOS PASOS QUE EN EL CASO DEL ATOMO DE DOS ELECTRONES Y BASANDONOS EN LO EXPUESTO EN EL CAPITULO 1 RESPECTO A SISTEMAS DE MUCHOS CUERPOS, LA ECUACION DE SCHROEDINGER EN GENERAL ES LA ---

SIGUIENTE:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{3N-4}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\hat{K}^2(\Omega)}{\rho^2}\right]-E\right\}\Psi(\rho,\Omega) + + \frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho}\sum_{k,l_i} V_k^{l_i}\, W_k^{(n_i l_i L M \nu)}(\Omega) = 0 \qquad (2.90)$$

CON $V_k^{l_i}$ DADO POR (2.89).

SUBSTITUYENDO LA EXPANSION DE LA FUNCION DE ONDA EN TERMINOS DE ARMONICOS HIPERESFERICOS (EC. 1.83) Y APROVECHANDO LA PROPIEDAD DE ORTONORMALIDAD DE ESTOS ULTIMOS, LA EXPPESION (2.90) SE REDUCE A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS EN LA VARIABLE RADIAL ρ :

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{3N-4}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{K''(K''+3N-5)}{\rho^2}\right]-E\right\}R_{K''}(\rho) +$$

$$+ e^2\sqrt{m_e}\sum_{K,l_i}\sum_{K' l_i'} V_k^{l_i}\, R_{K'}(\rho)\cdot\frac{1}{\rho}\,\cdot$$

$$\cdot\left\langle W_{K''}^{(n_i'' l_i'' L'' M'' \nu'')}(\Omega)\middle| W_K^{(n_i l_i L M \nu)}(\Omega)\middle| W_{K'}^{(n_i' l_i' L' M' \nu')}(\Omega)\right\rangle = 0 \qquad (2.91)$$

COMO DE HA HECHO EN EL CASO DE TRES CUERPOS, EL CASO $K=0$ DESACOPLA LAS ECUACIONES, LO QUE NOS PROPORCIONA UNA BASE PAPA LA PARTE RADIAL EN EL DESARROLLO DE LA FUNCION DE ONDA (EC. 1.83). HACIENDO USO DE ESTA BASE RADIAL ASI COMO DE LA BASE ANGULAR LA FUNCION DE ONDA PUEDE EXPRESARSE EN TERMINOS DEL PRODUCTO DE DICHAS BASES Y NUEVAMENTE HACIENDO USO DE LA PROPIEDAD DE ORTONORMALIDAD, LA ECUACION DE SCHROEDINGER (2.90) SE REDUCE A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES ALGEBRAICAS ACOPLADAS --

HOMOGENEAS:

$$\left(E^{(0)}_{n_\rho'' k''} - E\right) a^{l_i''}_{n_\rho'' k''} + e^2 \sqrt{\mu_e} \sum_{\substack{k \neq 0 \\ l_i}} \sum_{\substack{k', l_i' \\ n_\rho'}} V^{l_i}_{k}\, a^{l_i'}_{n_\rho' k'} \cdot$$

$$\cdot \left\langle R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho) \left| \frac{1}{\rho} \right| R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) \right\rangle \left\langle W^{(n_i'' l_i'' L'' M'' \nu'')}_{k''}(\Omega) \left| W^{(n_i l_i L M \nu)}_{k}(\Omega) \right| W^{(n_i' l_i' L' M' \nu')}_{k'} \right\rangle$$

$$= 0 \tag{2.92}$$

DE DONDE E Y LOS COEFICIENTES $a^{l_i}_{n_\rho k}$ PUEDEN SER CALCULADOS.

ES IMPORTANTE OBSERVAR QUE LA EXPRESION (2.92) PUDO SER OBTENIDA - GRACIAS A LA EXISTENCIA DE LA BASE RADIAL $R^{(0)}_{n_\rho'' k''}$, QUE EN TODO EL TRATAMIENTO SE HA SUPUESTO CONOCIDA, ES DECIR, EN CASO DE QUE NO SE DISPONGA DE DICHA BASE RADIAL EN FORMA ANALITICA, ENTONCES NOS CONCRETAREMOS A TRABAJAR CON EL SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS (2.91).

EL ANALISIS DE LAS INTEGRALES DE TRASLAPE

$$\left\langle W^{(n_i'' l_i'' L'' M'' \nu'')}_{k''}(\Omega) \left| W^{(n_i l_i L M \nu)}_{k}(\Omega) \right| W^{(n_i' l_i' L' M' \nu')}_{k'}(\Omega) \right\rangle$$

ES AHORA MAS COMPLICADO QUE EL QUE SE HIZO EN EL CASO DE ATOMOS DE DOS ELECTRONES. LO MISMO SE CONCLUYE RESPECTO AL ESTUDIO DE LOS ELEMENTOS - DE MATRIZ:

$$\left\langle R^{(0)}_{n_\rho'' k''}(\rho) \left| \frac{1}{\rho} \right| R^{(0)}_{n_\rho' k'}(\rho) \right\rangle$$

ESTOS DOS PUNTOS SON MOTIVO AUN DE INVESTIGACION.

CAPITULO 3.

PARENTESIS DE TRANSFORMACION EN EL ESTUDIO DEL PROBLEMA DE TRES CUERPOS POR EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS.

INTRODUCCION.

COMO PUEDE APRECIARSE, EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS --- OFRECE LA VENTAJA DE SER UN TRATAMIENTO, EN PRINCIPIO EXACTO, PARA EL PROBLEMA DE MUCHOS CUERPOS Y AUNQUE PRACTICAMENTE NO PODEMOS RESOLVER UN NUMERO INFINITO DE ECUACIONES, LA APROXIMACION SE INTRODUCE AL LIMITAR EL NUMERO DE ELLAS.

EN EL TRATAMIENTO DEL PROBLEMA DE TRES CUERPOS POR EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS GENERALMENTE APARECEN INTEGRALES QUE MEZCLAN FUNCIONES DEPENDIENTES DE DISTINTOS CONJUNTOS DE COORDENADAS DE JACOBI, ES DECIR, DEL TIPO:

$$\int W_k^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} LM *}(\Omega_i)\; V(\xi_k)\, d\Omega$$

EN ESTE CAPITULO SE ENCONTRARA UNA TRANSFORMACION QUE RELACIONE A FUNCIONES DE UN CONJUNTO DE COORDENADAS DE JACOBI CON FUNCIONES QUE CORRESPONDEN A OTRO CONJUNTO DE COORDENADAS DE JACOBI

$$W_k^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} LM}(\Omega_i) \longrightarrow W_k^{l_{\xi_k} l_{\eta_k} LM}(\Omega_k)\,,$$

ENCONTRANDOSE EXPLICITAMENTE LOS COEFICIENTES QUE DEFINEN TAL TRANSFORMACION, LO CUAL PERMITE CALCULAR DE UNA MANERA MAS SIMPLE LAS INTEGRALES ARRIBA SEÑALADAS. ESENCIALMENTE SE SEGUIRA EL TRABAJO REALIZADO POR J.-REVAI Y J. RAYNAL (4) QUE TRATA SOBRE LA OBTENCION DE LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION.

COMO SE VERA EN EL CAPITULO,EXISTE UNA RELACION ENTRE ESTOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION Y LOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY-TALMI (5),- QUE RELACIONAN LAS FUNCIONES DE ONDA DE DOS PARTICULAS DENTRO DE UN POTENCIAL COMUN DE OSCILADOR ARMONICO CON LA S FUNCIONES DE ONDA DE AMBAS PARTICULAS DADAS EN TERMINOS DE LA COORDENADA RELATIVA Y DEL CENTRO DE MASA.

PARA SEÑALAR CON CLARIDAD LA VENTAJA DEL USO DE LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION DE REVAI-RAYNAL,SE HARA TAMBIEN UN TRATAMIENTO DE LOS SISTEMAS ATOMICOS DE DOS ELECTRONES ESTUDIADOS EN EL CAPITULO ANTERIOR. ESTO TIENE EL FIN DE COMPARAR CON EL CAMINO DIRECTO EMPLEADO AHI MISMO.

CON EL OBJETO DE PRESENTAR DE LA MANERA MAS DETALLADA POSIBLE LA OBTENCION DE LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL,EN ESTE CAPITULO MUCHOS DESARROLLOS MATEMATICOS SE HACEN DE FORMA EXPLICITA Y ALGUNOS OTROS SE HAN REMITIDO A UN APENDICE.EN LA PRIMERA SECCION SE ESTUDIA LA TRANSFORMACION DE MOSHINSKY-TALMI PARA PRESENTAR ALGUNOS RESULTADOS QUE SERAN EMPLEADOS MAS ADELANTE;LOS COEFICIENTES RESPECTIVOS NO SE OBTIENEN EXPLICITAMENTE.LA SEGUNDA SECCION TRATA SOBRE LA TRANSFORMACION DE REVAI RAYNAL,DONDE SE ENCUENTRA UNA EXPRESION CERRADA PARA LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION RESPECTIVOS.EN LA TERCERA SECCION SE ENCUENTRA UNA - RELACION ENTRE LOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY-TALMI Y LOS DE REVAI-RAYNAL.POR ULTIMO,EN LA CUARTA SECCION,SE APLICAN LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL AL ESTUDIO DE SISTEMAS ATOMICOS DE DOS ELECTRONES.

CABE MENCINAR QUE AUN NO SE HA OBTENIDO UNA EXPRESION CERRADA PARA EL ANALOGO DE ESTOS COEFICIENTES EN EL CASO DE N CUERPOS.

3.1. LA TRANSFORMACION DE MOSHINSKY-TALMI. (5)

UNA SUPOSICION INICIAL EN EL MODELO NUCLEAR DE CAPAS ES QUE LAS - INTERACCIONES ENTRE NUCLEONES SE PUEDEN PROMEDIAR DE TAL FORMA QUE UN NUCLEON SE MUEVE EN UN POTENCIAL COMUN. ESTA SUPOSICION SE DEBE ESENCIAL MENTE AL HECHO DE QUE NO SE CONOCE BIEN LA FORMA DE LAS FUERZAS NUCLEARES COMO POR EJEMPLO EN EL CASO ATOMICO.

DEBIDO A QUE NO EXISTE UNA SEGURIDAD DEFINITIVA SOBRE LA FORMA -- DEL POTENCIAL COMUN DENTRO DEL QUE SE MUEVEN LOS NUCLEONES, VARIOS MODELOS PARA EL MISMO HAN SIDO ESTUDIADOS.

SI SE SUPONE UN POTENCIAL DEL TIPO DE OSCILADOR ARMONICO, EL CALCULO DE ELEMENTOS DE MATRIZ SE SIMPLIFICA Y TAL APROXIMACION PARA EL POTENCIAL RESULTA BUENA PARA EL ESTADO BASE Y LOS PRIMEROS ESTADOS EXCITADOS, NO SIENDO ASI PARA ESTADOS MAYORMENTE EXCITADOS.

APROVECHANDO LAS PROPIEDADES DE SIMETRIA DEL OSCILADOR ARMONICO,- M. MOSHINSKY DEFINIO UNA TRANSFORMACION QUE RELACIONA A LAS FUNCIONES DE ONDA DE DOS PARTICULAS DENTRO DE UN POTENCIAL COMUN DE OSCILADOR ARMONICO, CUYAS COORDENADAS SE EXPRESAN RESPECTO AL CENTRO DEL POZO DE POTENCIAL, CON LAS FUNCIONES DE ONDA CUYA REPRESENTACION ESTA DADA EN TERMINOS DE LA COORDENADA RELATIVA Y DEL CENTRO DE MASA DE LAS DOS PARTICULAS; LOS COEFICIENTES QUE DEFINEN A LA TRANSFORMACION SON LOS LLAMADOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY-TALMI.(+)

LOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY SURGEN AL TRATAR EL SIGUIENTE PROBLEMA. CONSIDERESE UN SISTEMA FORMADO POR DOS PARTICULAS DE MASAS DISTINTAS DENTRO DE UN POTENCIAL COMUN DE OSCILADOR ARMONICO. EL HAMILTONIANO DE ESTE SISTEMA ES:

$$\mathcal{H} = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2} m_1 \omega^2 r_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \omega^2 r_2^2 \qquad (3.1)$$

(+) En lo sucesivo cuando se hable de coeficientes de Moshinsky nos referimos al mismo problema.

CON $\bar{r}_1$ Y $\bar{r}_2$ LAS COORDENADAS DE LAS PARTICULAS RESPECTO AL CENTRO DEL POZO.

HACIENDO USO DE LOS OPERADORES ASOCIADOS A LAS CANTIDADES DINAMICAS CORRESPONDIENTES:

$$\bar{P}_i \longleftrightarrow -i\hbar\nabla_i \quad ; \quad \bar{r}_i \longleftrightarrow \hat{r}_i ,$$

EL HAMILTONIANO CUANTICO QUEDA COMO:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}m_1 w r_1^2 + \frac{1}{2}m_2 w r_2^2 \tag{3.2}$$

NOS INTERESA OBTENER UNA REPRESENTACION EN TERMINOS DE LAS COORDENADAS DE LAS PARTICULAS REFERIDAS AL POZO DE POTENCIAL Y OTRA EN FUNCION DE LA COORDENADA RELATIVA Y DEL CENTRO DE MASA. ADEMAS, POR LA SIMETRIA DEL HAMILTONIANO (3.2), RESULTA TENTATIVO BUSCAR UNA TRANSFORMACION LINEAL PARA CADA SISTEMA DE COORDENADAS, DE TAL MANERA QUE LA EXPRESION (3.2) TENGA LA MISMA FORMA TANTO PARA EL SISTEMA REFERIDO AL CENTRO DEL POZO COMO PARA EL FORMADO POR LA COORDENADA RELATIVA Y DEL CENTRO DE MASA DE LAS DOS PARTICULAS, GARANTIZANDO ASI MISMO QUE LAS FUNCIONES DE ONDA TENGAN LA MISMA ESTRUCTURA EN AMBOS SISTEMAS DE COORDENADAS.

EN EFECTO, SI INTRODUCIMOS LA SIGUIENTE TRANSFORMACION:

$$\left.\begin{aligned} \bar{x} &\equiv \left(\frac{m_1 \omega}{\hbar}\right)^{1/2} \bar{r}_1 \\ \bar{y} &\equiv \left(\frac{m_2 \omega}{\hbar}\right)^{1/2} \bar{r}_2 \end{aligned}\right\}, \tag{3.3}$$

PARA LAS COORDENADAS REFERIDAS AL CENTRO DEL POZO DE POTENCIAL Y:

$$\left.\begin{aligned} \bar{X} &\equiv \left[\frac{m_1 m_2 \omega}{\hbar(m_1+m_2)}\right]^{1/2} (\bar{r}_1-\bar{r}_2) \\ \bar{Y} &\equiv \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{m_1\bar{r}_1 + m_2\bar{r}_2}{M}\right) \end{aligned}\right\}, \tag{3.4}$$

PARA LAS COORDENADAS RELATIVA Y DEL CENTRO DE MASA, ENTONCES PODEMOS OBTENER LO DESEADO, ES DECIR, EMPLEANDO LAS DEFINICIONES (3.3) SE PUEDE VER INMEDIATAMENTE QUE:

$$\nabla_1^2 = \frac{m_1 \omega}{\hbar} \nabla_x^2 \qquad ; \quad \frac{1}{2} m_1 \omega r_1^2 = \frac{\hbar \omega}{2} x^2$$

$$\nabla_2^2 = \frac{m_2 \omega}{\hbar} \nabla_y^2 \qquad ; \quad \frac{1}{2} m_2 \omega r_2^2 = \frac{\hbar \omega}{2} y^2$$

POR LO QUE EL HAMILTONIANO (3.2) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \left(\nabla_x^2 + \nabla_y^2 - x^2 - y^2 \right) \tag{3.5}$$

EN UNIDADES DE $\hbar\omega$.

ANALOGAMENTE, MEDIANTE LAS DEFINICIONES (3.4), APLICANDO LA REGLA DE LA CADENA Y EN GENERAL SIGUIENDO EL MISMO RAZONAMIENTO QUE NOS LLEVO A LA OBTENCION DE LA EXPRESION (1.21) (VER CAP. 1), SE TIENE:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \left(\nabla_X^2 + \nabla_Y^2 - X^2 - Y^2 \right) \tag{3.6}$$

EN UNIDADES DE $\hbar\omega$.

COMO PUEDE APRECIARSE, LA ESTRUCTURA DE LAS EXPRESIONES (3.5) Y (3.6) ES LA MISMA, OBTENIENDO LO QUE SE DESEABA EN UN PRINCIPIO POR RAZON DE COMODIDAD EN EL TRATAMIENTO A SEGUIR.

PODEMOS ENCONTRAR UNA TRANSFORMACION ENTRE LOS DISTINTOS CONJUNTOS (3.3) Y (3.4). CONSIDERANDO LOS SISTEMAS QUE EN ESTAS DOS EXPRESIONES ES FACIL OBTENER LA SIGUIENTE RELACION ENTRE ELLOS:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \left(\frac{m_2}{M}\right)^{1/2} \bar{X} + \left(\frac{m_1}{M}\right)^{1/2} \bar{Y} \\ \bar{y} &= -\left(\frac{m_1}{M}\right)^{1/2} \bar{X} + \left(\frac{m_2}{M}\right) \bar{Y} \end{aligned} \tag{3.7}$$

SI LLAMAMOS

$$K \equiv \left(\frac{m_1}{M}\right)^{1/2} \quad ; \quad L \equiv \left(\frac{m_2}{M}\right)^{1/2}$$

SE PUEDE VER INMEDIATAMENTE QUE

$$K^2 + L^2 = 1$$

POR LO QUE PODEMOS HACER LA SIGUIENTE IDENTIFICACION:

$$K \equiv \cos\varphi$$

$$L \equiv \operatorname{sen}\varphi$$

DE MODO QUE LA RELACION ENTRE LOS DOS CONJUNTOS DE COORDENADAS (3.3) Y (3.4) ES:

$$\begin{pmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \operatorname{sen}\varphi \\ -\operatorname{sen}\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{X} \\ \bar{Y} \end{pmatrix} \qquad (3.8)$$

DONDE

$$\varphi = \arctan\left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{1/2}$$

A CONTINUACION ENCONTRAREMOS EXPLICITAMENTE LA SOLUCION A LA ECUACION DE SCHROEDINGER CORRESPONDIENTE A LA EXPRESION (3.5) (+):

$$\hat{H}\,\Psi(\bar{x},\bar{y}) = E\,\Psi(\bar{x},\bar{y}) \qquad (3.9)$$

EXPLICITAMENTE:

$$-\frac{1}{2}\left(\nabla_x^2 + \nabla_y^2 - x^2 - y^2\right)\Psi(x,y;\hat{x},\hat{y}) = E\,\Psi(x,y;\hat{x},\hat{y}) \qquad (3.10)$$

ESTA ECUACION ES DE VARIABLES SEPARABLES, POR LO QUE LA FUNCION DE ONDA PUEDE ESCRIBIRSE COMO EL PRODUCTO:

$$\Psi(x,y;\hat{x},\hat{y}) = \Psi_x(x,\hat{x}) \cdot \Psi_y(y,\hat{y}) \qquad (3.11)$$

(+) En adelante, como la estructura de (3.5) y (3.6) es la misma, lo que se diga para una será igualmente válido para la otra.

ESCRIBIENDO EL OPERADOR LAPLACANO EN COORDENADAS ESFERICAS Y LLEVANDO A CABO LA SEPARACION DE VARIABLES, SE EOBTIENE EL SIGUIENTE PAR DE ECUACIONES:

$$\left[\frac{1}{x^2}\frac{\partial}{\partial x}\left(x^2\frac{\partial}{\partial x}\right) - \frac{\hat{l}_x^2}{x^2} - x^2\right]\Psi_x(x,\hat{x}) = E_{n_x l_x}\Psi_x(x,\hat{x}) \tag{3.12}$$

$$\left[\frac{1}{y^2}\frac{\partial}{\partial y}\left(y^2\frac{\partial}{\partial y}\right) - \frac{\hat{l}_y^2}{y^2} - y^2\right]\Psi_y(y,\hat{y}) = E_{n_y l_y}\Psi_y(y,\hat{y}) \tag{3.13}$$

CON
$$E = E_{n_x l_x} + E_{n_y l_y} \tag{3.14}$$
Y $\hat{l}^2$ ES EL OPERADOR ASOCIADO AL CUADRADO DEL MOMENTO ANGULAR TOTAL(VER EC.1.7).

CADA UNA DE LAS ECUACIONES ANTERIORES ES SEPARABLE, POR LO QUE:

$$\Psi_x(x,\hat{x}) = \mathcal{X}(x)\, Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) \tag{3.15A}$$

$$\Psi_y(y,\hat{y}) = \mathcal{Y}(y)\, Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \tag{3.15B}$$

SABIENDO QUE $\hat{l}^2 \cdot Y_l^m(\hat{z}) = l(l+1)Y_l^m(\hat{z})$ CON $\hbar \equiv 1$, LAS ECUACIONES (3.12) Y (3.13) SE REDUCEN A LO SIGUIENTE:

$$\frac{d^2\mathcal{X}}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d\mathcal{X}}{dx} - \frac{l_x(l_x+1)}{x^2}\mathcal{X} + \left(2E_{n_x l_x} - x^2\right)\mathcal{X} = 0 \tag{3.16}$$

$$\frac{d^2 y}{dy^2} + \frac{2}{y}\frac{dy}{dy} - \frac{l_y(l_y+1)}{y^2} y + (2E_{n_y l_y} - y^2) y = 0$$

(3.17)

LA ESTRUCTURA DE ESTAS ECUACIONES ES LA MISMA, LO QUE SE DIGA PARA UNA ES VALIDO PARA LA OTRA. ANALICEMOS POR EJEMPLO LA ECUACION (3.16).

CUANDO $x \to \infty$, LA ECUACION (3.16) SE COMPORTA COMO:

$$\frac{d^2 \chi}{dx^2} - x^2 \chi = 0 \tag{3.18}$$

LAS SOLUCIONES DE ESTA ECUACION SON DE LA FORMA:

$$e^{\frac{x^2}{2}} \quad , \quad e^{-\frac{x^2}{2}}$$

DE ESTAS DOS SOLUCIONES ELEGIMOS LA QUE CUMPLA CON EL ACOTAMIENTO CUANDO $x \to \infty$, ENTONCES ELIMINAMOS LA DE EXPONENTE POSITIVO Y ESCRIBIMOS $\chi(x)$ DE LA FORMA:

$$\chi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} f(x) \tag{3.19}$$

DONDE $f(x)$ ES UN POLINOMIO. SUBSTITUYENDO LA ECUACION (3.19) EN (3.16) SE ENCUENTRA QUE $f(x)$ SATISFACE LA ECUACION DIFERENCIAL:

$$f''(x) + 2\left(\frac{1}{x} - x\right) f'(x) + \left[2E_{n_x l_x} - \frac{l_x(l_x+1)}{x^2} - x^2 - 2\right] f(x) = 0$$

(3.20)

ESTA ULTIMA ECUACION TIENE UNA SINGULARIDAD EN $x = 0$ POR LO QUE PROPONEMOS UNA SOLUCION EN SERIES DE POTENCIAS DE x:

$$f(x) = x^k \sum_n a_n x^n = x^k S(x) \tag{3.21}$$

CON

$$S(x) \equiv \sum_n a_n x^n \tag{3.22}$$

SUBSTITUYENDO LA EXPRESION (3.21) EN LA ECUACION (3.20) SE PUEDE VER FACILMENTE QUE EL VALOR DE k ES :

$$k = l_x \, , \tag{3.23}$$

Y LA ECUACION QUE SATISFACE $S(x)$ ES:

$$S''(x) + \frac{2}{x}\left(l_x + 1 - x^2\right) S'(x) + \left(2E_{n_x l_x} - 3 - 2l_x\right) S(x) = 0 \tag{3.24}$$

HACIENDO EL CAMBIO DE VARIABLE:

$$u \equiv x^2 \, ,$$

Y APLICANDO LA REGLA DE LA CADENA, LA ECUACION ANTERIOR SE REDUCE A:

$$u S''(u) + \left(l_x + \frac{3}{2} - u\right) S'(u) + \left(E_{n_x l_x} - \frac{l_x}{2} - \frac{3}{4}\right) S(u) = 0 \tag{3.25}$$

ESTA ULTIMA ECUACION ES PRECISAMENTE LA QUE SATISFACEN LOS POLINOMIOS DE LAGUERRE:

$$S(u) = S(x^2) = L_{n_x}^{l_x + \frac{1}{2}}(x^2) \tag{3.26}$$

CON

$$E_{n_x l_x} = 2n_x + l_x + \frac{3}{2}$$

POR LO QUE COMBINANDO LAS ECUACIONES (3.19, 21, 23 Y 27), LA SOLUCION DE LA ECUACION (3.16) RESULTA:

$$\chi(x) = A_{n_x l_x} \, x^{l_x} \, e^{-\frac{x^2}{2}} \, L_{n_x}^{l_x + \frac{1}{2}}(x^2) \tag{3.27}$$

DONDE $A_{n_x l_x}$ ES LA CONSTANTE DE NORMALIZACION QUE SE OBTIENE POR LA CONDICION:

$$\int_0^\infty \chi(x)^* \, \chi(x) \, x^2 \, dx = 1$$

EXPLICITAMENTE LA INTEGRAL ES:

$$A^2_{n_x l_x} \int_0^\infty x^{2l_x} e^{-x^2} \left[L_{n_x}^{l_x+\frac{1}{2}}(x^2)\right]^2 x^2 dx = 1$$

LA CUAL SE PUEDE ESCRIBIR COMO:

$$A^2_{n_x l_x} \int_0^\infty x^{2(l_x+\frac{1}{2})} e^{-x^2} \left[L_{n_x}^{l_x+\frac{1}{2}}(x^2)\right]^2 x\, dx = 1$$

Y FINALMENTE, SI HACEMOS $u \equiv x^2$ LO ANTERIOR SE REDUCE A:

$$A^2_{n_x l_x} \int_0^\infty u^{(l_x+\frac{1}{2})} e^{-u} \left[L_{n_x}^{l_x+\frac{1}{2}}(x^2)\right]^2 \left(\frac{du}{2}\right) \tag{3.28}$$

DE AQUI QUE EL VALOR DE $A_{n_x l_x}$ ES (3):

$$A_{n_x l_x} = \left[\frac{2\,(n_x!)}{\Gamma(n_x+l_x+\frac{3}{2})}\right]^{1/2} \tag{3.29}$$

LA SOLUCION DE LA ECUACION (3.17) TIENE LA MISMA ESTRUCTURA QUE LA EXPRESION 3.27:

$$\mathcal{Y}(y) = A_{n_y l_y}\, y^l\, e^{-\frac{y^2}{2}}\, L_{n_y}^{l_y+\frac{1}{2}}(y^2)$$

$$A_{n_y l_y} = \left[\frac{2\,(n_y!)}{\Gamma(n_y+l_y+\frac{3}{2})}\right]^{1/2} \quad ; \; E_{n_y l_y} = 2n_y + l_y + \frac{3}{2} \tag{3.30}$$

EN VIRTUD DE LA RELACION (3.15), LA FUNCION DE ONDA $\Psi(x,y;\hat{x},\hat{y})$ QUE SATISFACE A LA ECUACION (3.10) RESULTA TENER LA SIGUIENTE FORMA:

$$\Psi^{n_x l_x n_y l_y m_x m_y}_{(x,y;\hat{x},\hat{y})} = \mathcal{X}(x)\, \mathcal{Y}(y)\, Y^{m_x}_{l_x}(\hat{x})\, Y^{m_y}_{l_y}(\hat{y}) \tag{3.31}$$

DONDE $\chi(x)$, $\mathcal{Y}(y)$ ESTAN DADAS POR LAS EXPRESIONES 3.27 Y 3.30 REPECTIVAMENTE.

COMO SE MENCIONO ANTERIORMENTE, POR TENER EL HAMILTONIANO (3.6) LA MISMA ESTRUCTURA QUE (3.5), LAS FUNCIONES DE ONDA QUE SATISFACEN LAS CORRESPONDIENTES ECUACIONES DE SCHROEDINGER SON TOTALMENTE ANALOGAS, ES DECIR, LA FUNCION DE ONDA EN LA REPRESENTACION DE COORDENADA RELATIVA Y DEL CENTRO DE MASA TIENE EXACTAMENTE LA MISMA ESTRUCTURA QUE LA EXPRESION 3.32 QUE REPRESENTA A LA FUNCION DE ONDA EN TERMINOS DE LAS COORDENADAS DE LAS PARTICULAS REFERIDAS AL CENTRO DEL POZO DE POTENCIAL.

ENTONCES $\Psi(\mathfrak{x},\mathfrak{y};\hat{\mathfrak{x}},\hat{\mathfrak{y}})$ TIENE LA FORMA:

$$\Psi^{n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}} m_{\mathfrak{x}} m_{\mathfrak{y}}}_{(\mathfrak{x},\mathfrak{y};\hat{\mathfrak{x}},\hat{\mathfrak{y}})} = \chi(\mathfrak{x})\, \mathcal{Y}(\mathfrak{y})\, Y^{m_{\mathfrak{x}}}_{l_{\mathfrak{x}}}(\hat{\mathfrak{x}})\, Y^{m_{\mathfrak{y}}}_{l_{\mathfrak{y}}}(\hat{\mathfrak{y}}) \tag{3.32}$$

DONDE $\chi(\mathfrak{x})$, $\mathcal{Y}(\mathfrak{y})$ TIENEN LA MISMA ESTRUCTURA QUE (3.27) Y (3.30).

AHORA BIEN, SE PUEDE DEMOSTRAR FACILMENTE MEDIANTE LAS RELACIONES (3.3) Y (3.4), QUE (+):

$$\bar{l}_x + \bar{l}_y = \bar{l}_{\mathfrak{x}} + \bar{l}_{\mathfrak{y}} = \bar{L} \tag{3.33}$$

DONDE $\bar{l}_x, \bar{l}_y ; \bar{l}_{\mathfrak{x}}, \bar{l}_{\mathfrak{y}}$ SON LOS MOMENTOS ANGULARES DE CADA PARTICULA EN UNO Y OTRO SISTEMAS DE COORDENADAS, SIENDO $\bar{L}$ EL MOMENTO ANGULAR TOTAL.

EMPLEANDO LA PROPIEDAD (3.33), LA FUNCION DE ONDA PARA UN MOMENTO ANGULAR TOTAL L BIEN DEFINIDO ES:

(+) De (3.3) y (3.4) se obtiene: $\bar{P}_x = \left(\frac{m_1 \omega}{\hbar}\right)^{1/2} \bar{p}_1$; $\bar{P}_y = \left(\frac{m_2 \omega}{\hbar}\right)^{1/2} \bar{p}_2$; $\bar{P}_{\mathfrak{x}} = \left(\frac{m_1 m_2 \omega}{\hbar (m_1+m_2)}\right)^{1/2} (\bar{p}_1 - \bar{p}_2)$ $\bar{P}_{\mathfrak{y}} = \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{m_1 \bar{p}_1 + m_2 \bar{p}_2}{M}\right)$. Escribiendo directamente el producto: $(\bar{x} \times \bar{P}_x) + (\bar{y} \times P_y) = \bar{l}_x + \bar{l}_y$ y también $(\bar{\mathfrak{x}} \times \bar{P}_{\mathfrak{x}}) + (\bar{\mathfrak{y}} \times \bar{P}_{\mathfrak{y}}) = \bar{l}_{\mathfrak{x}} + \bar{l}_{\mathfrak{y}}$; aprovechando la propiedad $\bar{P}_i \times \bar{P}_i = 0$ se obtiene directamente que $\bar{l}_x + \bar{l}_y = \bar{l}_{\mathfrak{x}} + \bar{l}_{\mathfrak{y}}$.

$$\Psi^{n_x l_x n_y l_y LM}_{(x,y;\hat{x},\hat{y})} = \sum_{m_x, m_y} (l_x m_x l_y m_y | LM) \cdot \cdot \chi(x) \mathcal{Y}(y) Y^{m_x}_{l_x}(\hat{x}) Y^{m_y}_{l_y}(\hat{y}) \quad (3.34)$$

$$\Psi^{n_\mathfrak{x} l_\mathfrak{x} n_\mathfrak{y} l_\mathfrak{y} LM}_{(\mathfrak{x},\mathfrak{y};\hat{\mathfrak{x}},\hat{\mathfrak{y}})} = \sum_{m_\mathfrak{x}, m_\mathfrak{y}} (l_\mathfrak{x} m_\mathfrak{x} l_\mathfrak{y} m_\mathfrak{y} | LM) \cdot \cdot \chi(\mathfrak{x}) \mathcal{Y}(\mathfrak{y}) Y^{m_\mathfrak{x}}_{l_\mathfrak{x}}(\hat{\mathfrak{x}}) Y^{m_\mathfrak{y}}_{l_\mathfrak{y}}(\hat{\mathfrak{y}}) \quad (3.35)$$

ESTAS DOS ULTIMAS EXPRESIONES NOS REPRESENTAN DOS CONJUNTOS DE - EIGENFUNCIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DE DOS PARTICULAS EN UN POZO DE POTENCIAL DE OSCILADOR ARMONICO, EN UN SISTEMA DE COORDENADAS - REFERIDO AL CENTRO DEL POZO Y OTRO CORRESPONDIENTE A LA COORDENADA RELA TIVA Y DEL CENTRO DE MASA.

LA TRANSFORMACION DE MOSHINSKY TIENE EL OBJETO DE RELACIONAR AM-- BAS REPRESENTACIONES, ES DECIR, LA TRANSFORMACION ES LA SIGUIENTE:

$$\Psi^{n_x l_x n_y l_y LM}_{(x,y;\hat{x},\hat{y})} = \sum_{\substack{n_\mathfrak{x} l_\mathfrak{x} \\ n_\mathfrak{y} l_\mathfrak{y}}} \langle n_\mathfrak{x} l_\mathfrak{x}\, n_\mathfrak{y} l_\mathfrak{y}\, L | n_x l_x\, n_y l_y\, L \rangle \cdot \cdot \Psi^{n_\mathfrak{x} l_\mathfrak{x} n_\mathfrak{y} l_\mathfrak{y} LM}_{(\mathfrak{x},\mathfrak{y};\hat{\mathfrak{x}},\hat{\mathfrak{y}})} \quad (3.36)$$

LOS COEFICIENTES

$$\langle n_\mathfrak{x} l_\mathfrak{x}\, n_\mathfrak{y} l_\mathfrak{y}\, L | n_x l_x\, n_y l_y\, L \rangle, \quad (3.37)$$

SON LOS LLAMADOS COEFICIENTES O PARENTESIS DE TRANSFORMACION DE MOSHINS KY-TALMI. OBSERVESE QUE ESTE PARENTESIS DE TRANSFORMACION NO DEPENDE DEL NUMERO CUANTICO MAGNETICO M. (VER REF. 5).

El sistema de dos particulas se ha supuesto no perturbado sin interaccion entre ellas, por lo tanto la conservacion de la energia nos restringe los valores de $n_x l_x n_y l_y$; $n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}}$. De la condiciones (3.14,26,30 y 32) se obtiene:

$$2n_x + l_x + 2n_y + l_y = 2n_{\mathfrak{x}} + l_{\mathfrak{x}} + 2n_{\mathfrak{y}} + l_{\mathfrak{y}} \tag{3.38}$$

Esto ultimo nos restringe la suma en (3.36), asi mismo nos garantiza la conservacion de paridad:

$$(-1)^L = (-1)^{l_x + l_y} = (-1)^{l_{\mathfrak{x}} + l_{\mathfrak{y}}} = (-1)^L, \tag{3.39}$$

por la condicion (3.33).

Los coeficientes de transformacion (3.37) han sido calculados y tabulados por M. Moshinsky y T. Brody (6) y pueden ser empleados en el calculo de elementos de matriz para distintos tipos de fuerzas nucleares simplificando el calculo considerablemente.

3.B. La Transformacion de Revai-Raynal.

En la seccion anterior se menciono la utilidad de los coeficientes de transformacion de Moshinsky en el calculo de elementos de matriz. En esta seccion estudiaremos una transformacion que sera de utilidad en el tratamiento del problema de tres cuerpos y como se vera adelante, es el analogo hexadimensional de la transformacion de Moshinsky, esta transformacion fue primeramente estudiada por J. Revai y J. Raynal (4), por lo que le asignamos el nombre de los autores.

En el tratamiento del problema de tres cuerpos por el Metodo de Coordenadas Hiperesfericas, como se planteo en el capitulo 1, el potencial se expresa como un desarrollo en terminos de armonicos hiperesfe-

RICOS (EC. 1.50):

$$\sum_{i<j}^{3} V(r_{ij}) = \sum_{k=1}^{3} V(\xi_k) = \sum_{K,l_{\xi_i},l_{\eta_i}} V_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i}}(\rho)\, W_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} LM}(\Omega_i)$$

EN DONDE:

$$V_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i}}(\rho) = \sum_{k=1}^{3} \int W_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} LM^*}(\Omega_i)\, V(\xi_k)\, d\Omega \tag{3.40}$$

EL CALCULO DE LAS INTEGRALES DE LA FORMA (3.40) EN GENERAL PUEDE LLEVARSE A CABO EN FORMA DIRECTA COMO YA SE HA HECHO EN EL CAPITULO 2, PERO EXISTE UNA FORMA MAS SIMPLE QUE CONSISTE BASICAMENTE EN EL USO DE UNA TRANSFORMACION QUE RELACIONE ARMONICOS HIPERESFERICOS CORRESPONDIENTES A DISTINTOS CONJUNTOS DE COORDENADAS DE JACOBI:

$$W_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} LM}(\Omega_i) \longrightarrow W_K^{l_{\xi_k} l_{\eta_k} LM}(\Omega_k), \tag{3.41}$$

DE MANERA QUE LA INTEGRAL (3.40) QUEDE CALCULABLE DE FORMA MAS SIMPLE Y DIRECTA:

$$\int W_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} LM^*}(\Omega_i)\, V(\xi_i)\, d\Omega \tag{3.41A}$$

LA TRANSFORMACION QUE PERMITE EL PASO INDICADO EN (3.41), ES LA SIGUIENTE:

$$W_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} LM}(\Omega_i) = \sum_{l_{\xi_k}, l_{\eta_k}} \langle l_{\xi_k} l_{\eta_k} | l_{\xi_i} l_{\eta_i} \rangle_{KL}\, W_K^{l_{\xi_k} l_{\eta_k} LM}(\Omega_k) \tag{3.42}$$

DONDE K, L, M SE CONSERVAN POR SER LA TRANSFORMACION ENTRE LOS CONJUNTOS $(\bar{\xi}_i, \bar{\eta}_i) \longrightarrow (\bar{\xi}_k, \bar{\eta}_k)$ UNA ROTACION EN SEIS DIMENSIONES (7)

LOS COEFICIENTES QUE DEFINEN LA TRANSFORMACION (3.42), SON LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL:

$$\langle l_{\xi_k} l_{\eta_k} | l_{\xi_i} l_{\eta_i} \rangle_{KL} \tag{3.43}$$

SUBSTITUYAMOS LA EXPRESION (3.42) EN LA INTEGRAL (3.40), OBTENIENDO:

$$\sum_{k=1}^{3} \int \mathcal{W}_{k\,(\Omega_i)}^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} LM^*} V(\xi_k)\, d\Omega =$$

$$= \sum_{k=1}^{3} \sum_{l_{\xi_k}, l_{\eta_k}} \langle l_{\xi_i} l_{\eta_i} | l_{\xi_k} l_{\eta_k} \rangle_{KL} \int \mathcal{W}_{k\,(\Omega_k)}^{l_{\xi_k} l_{\eta_k} LM^*} V(\xi_k)\, d\Omega \tag{3.44}$$

OBSERVESE QUE LA INTEGRAL QUE APARECE EN EL SEGUNDO MIEMBRO EN ESTA ULTIMA ECUACION, ES DEL MISMO TIPO QUE LA EXPRESION (3.41A) POR LO QUE SU CALCULO ES DIRECTO. VEMOS PUES, QUE SI LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION SON DISPONIBLES, EL CALCULO DE LAS INTEGRALES (3.40) SE SIMPLIFICA. EL PROBLEMA AHORA SE REDUCE A ENCONTRAR UNA EXPRESION EXPLICITA PARA DICHOS COEFICIENTES.

A PARTIR DE ESTE MOMENTO ENFOCAREMOS NUESTRA ATENCION EN LA OBTENCION DE LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL DE FORMA DETALLADA, LO CUAL ES EL PRINCIPAL OBJETIVO DE ESTA SECCION. CON LA INTENCION DE QUE EL CAMINO SEGUIDO EN ESTE CALCULO SEA LO MAS CLARO POSIBLE, HE CONSIDERADO CONVENIENTE PRESENTAR LOS PASOS FUNDAMENTALES DE MANERA DETALLADA, REMITIENDO ALGUNOS DESARROLLOS A UN APENDICE CON EL OBJETO DE NO OSCURECER DEMASIADO EL TRATAMIENTO.

LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION SE OBTIENEN A PARTIR DE LA FUNCION GENERATRIZ PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS. DE LA EXPRESION (3.42) SE PUEDE VER INMEDIATAMENTE QUE :

$$\langle l_{s_i} l_{\eta_i} | l_{s_k} l_{\eta_k} \rangle_{KL} =$$

$$= \sum_{\substack{m_{s_i} m_{\eta_i} \\ m_{s_k} m_{\eta_k}}} (l_{s_i} m_{s_i} l_{\eta_i} m_{\eta_i} | LM)(l_{s_k} m_{s_k} l_{\eta_k} m_{\eta_k} | LM) \cdot \int W_K^{l_{s_i} l_{\eta_i} m_{s_i} m_{\eta_i} *}(\Omega_i)\, W_K^{l_{s_k} l_{\eta_k} m_{s_k} m_{\eta_k}}(\Omega_k)\, d\Omega$$

(3.45)

DONDE $(l_i m_i l_j m_j | LM)$ SON COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN (VER EC. 1.49).

COMO SE PUEDE VER, EL PROBLEMA AHORA ES EL CALCULO DE LA INTEGRAL DE TRASLAPE:

$$\int W_K^{l_{s_i} l_{\eta_i} m_{s_i} m_{\eta_i} *}(\Omega_i)\, W_K^{l_{s_k} l_{\eta_k} m_{s_k} m_{\eta_k}}(\Omega_k)\, d\Omega$$

(3.46)

CON $d\Omega$ DADO POR LA EXPRESION (2.20):

PARA LA OBTENCION DE LA INTEGRAL (3.46), HAREMOS USO ESENCIALMENTE DE LA FUNCION GENERATRIZ PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS(+):

$$\rho^K W_K^{l_{s_i} l_{\eta_i} m_{s_i} m_{\eta_i}}(\Omega_i) =$$

$$= \left(A_K^{l_{s_i} l_{\eta_i}} \right)^{-1} \cdot \frac{1}{K!} \frac{\partial^K}{\partial s_i^K} \left[\int \exp(2i \bar{p}_i \cdot \bar{\xi}_i - 2\bar{q}_i \cdot \bar{\eta}_i)\, Y_{l_{s_i}}^{m_{s_i}}(\hat{p}_i)\, Y_{l_{\eta_i}}^{m_{\eta_i}}(\hat{q}_i)\, d\hat{p}_i\, d\hat{q}_i \right]_{s_i=0}$$

(3.47)

(+) Ver Apendice 2 (C)

Este resultado se encuentra a partir del desarrollo de la onda plana en seis dimensiones(+):

$$\exp\left[i(\bar{k}_1\cdot\bar{\xi} + \bar{k}_2\cdot\bar{\eta}) \right] =$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{(\varkappa\rho)^2} \sum_{\substack{K \\ l_\xi, m_\xi \\ l_\eta, m_\eta}} i^K \, \mathcal{W}_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta *}(\Omega_k) \, \mathcal{W}_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega_i) \, J_{K+2}(\varkappa\rho) \tag{3.48}$$

Siendo así:

$$A_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i}} = (i)^{K+l_{\eta_i}} \left[\frac{8\pi^6}{n!\,\Gamma(n+l_{\xi_i}+\frac{3}{2})\,\Gamma(n+l_{\eta_i}+\frac{3}{2})\,(n+l_{\xi_i}+l_{\eta_i}+1)!\,(K+2)} \right]^{1/2} \tag{3.49}$$

Y ademas:

$$\bar{k}_1 = 2\bar{p} \quad ; \quad \bar{k}_2 = 2i\bar{q}$$

Calculemos, entonces, el valor de (3.46) mediante la funcion generatriz (3.47). Escribamos la funcion generatriz para $\mathcal{W}_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} m_{\xi_i} m_{\eta_i}}(\Omega_i)$ y $\mathcal{W}_K^{l_{\xi_k} l_{\eta_k} m_{\xi_k} m_{\eta_k}}(\Omega_k)$ respectivamente, introduciendo previamente, por conveniencia, un factor

$$e^{-\frac{\rho^2}{2}} ,$$

en ambos lados de (3.47), entonces:

$$e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^K \, \mathcal{W}_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i} m_{\xi_i} m_{\eta_i} *}(\Omega_i) =$$

$$= e^{-\frac{\rho^2}{2}} \left(A_K^{l_{\xi_i} l_{\eta_i}} \right)^{-1} \cdot \frac{1}{K!} \cdot \frac{\partial^K}{\partial S_i^K} \left[\int \exp(-2i\,\bar{p}_i\cdot\bar{\xi}_i - 2\bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_i) \cdot \right.$$

$$\left. \cdot\, Y_{l_{\xi_i}}^{m_{\xi_i} *}(\hat{p}_i)\, Y_{l_{\eta_i}}^{m_{\eta_i} *}(\hat{q}_i)\, d\hat{p}_i\, d\hat{q}_i \right]_{S_i=0} \tag{3.50}$$

(+) Ver Apendice 2 (B) para la obtención de este desarrollo.

$$e^{-\frac{\rho^2}{2}}\rho^{K}\,\mathcal{W}_K^{l_{s_k} l_{\eta_k} m_{s_k} m_{\eta_k}}(\Omega_k) =$$

$$= e^{-\frac{\rho^2}{2}}\left(A_K^{l_{s_k} l_{\eta_k}}\right)^{-1}\cdot\frac{1}{K!}\cdot\frac{\partial^K}{\partial s_k^K}\left[\int \exp\left(2i\bar{p}_k\cdot\bar{\xi}_k-2\bar{q}_k\cdot\bar{\eta}_k\right)\cdot\right.$$

$$\left.\cdot Y_{l_{s_k}}^{m_{s_k}}(\hat{p}_k)\,Y_{l_{\eta_k}}^{m_{\eta_k}}(\hat{q}_k)\,d\hat{p}_k\,d\hat{q}_k\right]_{s_k=0}$$

(3.51)

MULTIPLICANDO ENTRE SI LAS EXPRESIONES ANTERIORES E INTEGRANDO SOBRE TODO EL ESPACIO CONFIGURACIONAL (SEIS DIMENSIONES), OBTENEMOS PARA LA INTEGRAL (3.46) (+):

$$\int_0^\infty e^{-\frac{\rho^2}{2}}\rho^{2K+5}\,d\rho\cdot\int \mathcal{W}_K^{l_{s_i} l_{\eta_i} m_{s_i} m_{\eta_i}*}(\Omega_i)\,\mathcal{W}_K^{l_{s_k} l_{\eta_k} m_{s_k} m_{\eta_k}}(\Omega_k)\,d\Omega =$$

$$=\left[A_K^{l_{s_i} l_{\eta_i}}\cdot A_K^{l_{s_k} l_{\eta_k}}\right]^{-1}\cdot\frac{1}{(K!)^2}\cdot$$

$$\cdot\left\{\frac{\partial^K}{\partial s_k^K}\frac{\partial^K}{\partial s_i^K}\int\left[\left[\int \exp\left(-\rho^2-2i\bar{p}_i\cdot\bar{\xi}_i-2\bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_i+2i\bar{p}_k\cdot\bar{\xi}_k-2\bar{q}_k\cdot\bar{\eta}_k\right)\cdot\right.\right.\right.$$

$$\left.\left.\cdot\, d\xi_k\,d\eta_k\right]\cdot Y_{l_{s_i}}^{m_{s_i}*}(\hat{p}_i)\,Y_{l_{\eta_i}}^{m_{\eta_i}*}(\hat{q}_i)\,Y_{l_{s_k}}^{m_{s_k}}(\hat{p}_k)\,Y_{l_{\eta_k}}^{m_{\eta_k}}(\hat{q}_k)\cdot d\hat{p}_i\,d\hat{q}_i\,d\hat{p}_k\,d\hat{q}_k\right\}_{\substack{s_i=0\\ s_k=0}}$$

(3.52)

(+) En este caso el elemento de hiper-volumen es:

$(d^3\tau)_6=(\rho^5 d\rho)(d\Omega)$; con $d\Omega$ dado por (2.20).

LA PRIMER INTEGRAL A LA IZQUIERDA EN (3.52) ES LA FUNCION GAMMA[3]

$$\int_0^\infty e^{-\frac{\rho^2}{2}}\, \rho^{2k+5}\, d\rho = \frac{(k+2)!}{2} \tag{3.53}$$

POR LO QUE, DE (3.52) OBTENEMOS EL VALOR DE (3.45) EXPLICITAMENTE COMO SIGUE.

EL VALOR DE LA INTEGRAL DENTRO DEL PARENTESIS CUADRADO EN (3.52) PUEDE OBTENERSE EMPLEANDO LA TRANSFORMACION ENTRE DISTINTOS CONJUNTOS DE COORDENADAS DE JACOBI (VER EC. 1.20, CAP. 1):

$$\bar\xi_i \rightarrow \bar\xi_k ,$$

OBTENIENDOSE LO SIGUIENTE(+):

$$\int \exp\left(-\rho^2 - 2i\,\bar p_i\cdot\bar\xi_i - 2\bar q_i\cdot\bar\eta_i + 2i\,\bar p_k\cdot\bar\xi_k - 2\bar q_k\cdot\bar\eta_k\right) =$$

$$= \pi^3 \exp\left[-2\bar p_i\cdot\bar p_k \cos\varphi_{ki} - 2i\,\bar p_k\cdot\bar q_i \operatorname{sen}\varphi_{ki} - 2i\,\bar p_i\cdot\bar q_k \operatorname{sen}\varphi_{ki} - 2\bar q_k\cdot\bar q_i \cos\varphi_{ki}\right] \tag{3.54}$$

AHORA, PODEMOS EXPRESAR ESTE ULTIMO RESULTADO, EN TERMINOS DE LA EXPANSION DE ONDA PLANA TRIDIMENSIONAL[2,8]:

$$e^{\bar a\cdot\bar b} = 4\pi \sum_{l,m} i^l\, j_l(-iab)\, Y_l^m(\hat a)\, Y_l^{m*}(\hat b) \tag{3.55}$$

DONDE $j_l(z)$ ES UNA FUNCION DE BESSEL ESFERICA RELACIONADA CON LA ORDINARIA POR:

$$j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, J_{l+\frac{1}{2}}(z) \tag{3.56}$$

HECHO LO ANTERIOR, SE LLEVAN A CABO LAS INTEGRACIONES INDICADAS EN (3.52) Y SUBSTITUYENDO EL RESULTADO EN (3.45) SE SUMA SOBRE LOS NUMEROS CUAN-

(+) Ver Apendice 2 (D)

TICOS MAGNETICOS PARA OBTENER UN COEFICIENTE 9-J. FINALMENTE LAS FUNCIONES DE BESSEL SE DESARROLLAN EN TERMINOS DEL PRODUCTO $(s_i s_k)$ Y ENTONCES LA DERIVACION INDICADA EN (3.52):

$$\left\{ \frac{\partial^k}{\partial s_i^k} \frac{\partial^k}{\partial s_k^k} \left[\quad \right] \right\}_{\substack{s_i=0 \\ s_k=0}} ,$$

CONSISTE UNICAMENTE EN ENCONTRAR LOS COEFICIENTES DE $(s_i s_k)$ EN EL DESARROLLO.

TODOS LOS PASOS ARRIBA SEÑALADOS SE TRATAN CON DETALLE EN EL APENDICE 2 (E) EL NO INCLUIRLOS EXPLICITAMENTE AQUI TIENE EL OBJETO DE NO OSCURECER EL RAZONAMIENTO SEGUIDO EN LA OBTENCION DE LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION DE REVAI-RAYNAL.

GRACIAS A TODO LO DISCUTIDO ANTERIORMENTE, EL VALOR DE LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION, DADOS POR LA EXPRESION (3.45), RESULTA SER:

$$\langle l_{s_i} l_{\eta_i} | l_{s_k} l_{\eta_k} \rangle_{KL}^{\varphi_{ki}} =$$

$$= \frac{\pi}{4} \left[C^{n_i}_{l_{s_i} l_{\eta_i}} \cdot C^{n_k}_{l_{s_k} l_{\eta_k}} \right]^{-\frac{1}{2}} \cdot \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4} (i)^{l_2 + l_3 + l_{\eta_i} - l_{\eta_k}} (-1)^{l_1 + l_4} \cdot$$

$$\cdot f(l_1, l_3; l_{s_i}) \cdot f(l_2, l_4; l_{\eta_i}) \cdot f(l_1, l_2; l_{s_k}) \cdot f(l_3, l_4; l_{\eta_k}) \cdot$$

$$\cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_{s_k} \\ l_3 & l_4 & l_{\eta_k} \\ l_{s_i} & l_{\eta_i} & L \end{pmatrix} (-1)^{l_2 + l_3} \cdot \sum_{\mu, \nu} (-1)^{\mu} C^{\nu}_{l_1, l_4} C^{\mu}_{l_2, l_3} (\cos \varphi_{ki})^{2\nu + l_1 + l_4} \cdot$$

$$\cdot (\operatorname{sen} \varphi_{ki})^{2\mu + l_2 + l_3}$$

COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL (3.57)

NOTESE QUE EL VALOR DE LOS COEFICIENTES (3.57) DEPENDE DE LA FASE φ_{ki} POR ELLO ES CONVENIENTE AGREGAR UN SUPERINDICE φ_{ki}.

EN LA EXPRESION (3.57) SE HA EMPLEADO LA SIGUIENTE NOTACION DE ACUERDO AL TRABAJO ORIGINAL DE J. REVAI Y J. RAYNAL:

$$C^{\alpha}_{\beta\gamma} = \frac{\Gamma(2\alpha+\beta+\gamma+2)}{\Gamma(\alpha+\beta+\frac{3}{2})\,\Gamma(\alpha+\gamma+\frac{3}{2})\,\Gamma(\alpha+1)\,\Gamma(\alpha+\beta+\gamma+2)}$$

$$f(a,b;c) = \left[(2a+1)(2b+1)\right]^{1/2}(a\,0\,b\,0|c\,0)$$

LA SIGUIENTE CONDICION RESTRINGE EL VALOR DE LA SUMA EN (3.57)(+):

$$K = 2n_i + l_{s_i} + l_{y_i} = 2n_k + l_{s_k} + l_{y_k} = 2\mu + 2\nu + l_1 + l_2 + l_3 + l_4 \qquad (3.58)$$

EL VALOR DEL ANGULO DE FASE φ_{ki} SE ENCUENTRA MEDIANTE LA ECUACION (1.21):

$$\varphi_{ki} = \arctan (-1)^P \left(\frac{m_j M}{m_i m_k}\right)^{1/2},$$

DONDE $(-1)^P$ ES EL SIGNO DE LA PERMUTACION CICLICA DE i, j, k, DE MANERA QUE SI PASAMOS DE LA COORDENADA $\bar{\xi}_1$ A $\bar{\xi}_2$, DE ACURDO A LA DEFINICION DE DE LAS COORDENADAS DE JACOBI PARA TRES CUERPOS (EC.1.15, CAP.1):

$$\bar{\xi}_i = \left(\frac{m_j m_k}{m_j + m_k}\right)^{1/2}(\bar{r}_j - \bar{r}_k),$$

ESTO EQUIVALE AL CAMBIO (PERMUTACION) $(1,2,3) \rightarrow (2,1,3)$ QUE ES IMPAR POR LO QUE $(-1)^P$ ES NEGATIVO SIENDO ENTONCES EL ANGULO DE FASE:

$$\varphi_{21} = \arctan (-1)^P \left(\frac{m_2 M}{m_3 m_1}\right)^{1/2} \quad ..$$

ESTO SERA DE MUCHA UTILIDAD EN LA SECCION 3.D CUANDO SE ESTUDIEN LOS SISTEMAS ATOMICOS DE DOS ELECTRONES.

(+) Ver Apendice 2 (E)

MEDIANTE LA EXPRESION CERRADA PARA LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION (3.57), EL CALCULO DE INTEGRALES DEL TIPO (3.40):

$$\int \mathcal{W}_k^{l_{s_i} l_{y_i} LM}(\alpha_i)\, V(s_k)\, d\Omega ,$$

PUEDE REALIZARSE DE FORMA MAS SIMPLE Y SISTEMATICA, SI SE EMPLEAN DICHOS COEFICIENTES. EN EL ESTUDIO QUE SE HARA PARA ATOMOS DE DOS ELECTRONES (SEC. 3.D), SE EMPLEARAN EXPLICITAMENTE LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL.

3.C. RELACION ENTRE LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL Y LOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY-TALMI.

EN ESTA SECCION SE ESTABLECERA UNA CONEXION ENTRE LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION OBTENIDOS POR M. MOSHINSKY, DISCUTIDOS EN LA SECCION 3.A, Y LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL DADOS POR LA EXPRESION (3.57). ESTA RELACION NOS PERMITE HABLAR DE LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL COMO UNA GENERALIZACION DE LOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY PARA EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS.

OBTENGAMOS ENTONCES LA RELACION BUSCADA. OBSERVESE QUE EL HAMILTONIANO (3.5) (O 3.6), DESCRIBE A UN OSCILADOR ARMONICO EN SEIS DIMENSIONES, ES DECIR, ESCRIBAMOS EXPLICITAMENTE A (3.5) Y (3.6):

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\left(\nabla_x^2 + \nabla_y^2 - x^2 - y^2\right) \tag{3.5}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\left(\nabla_X^2 + \nabla_Y^2 - X^2 - Y^2\right) \tag{3.6}$$

DE LA ECUACION (3.8) SE PUEDE VER FACILMENTE QUE:

$$x^2 + y^2 = X^2 + Y^2 = \text{invariante} \equiv \rho^2 \tag{3.59}$$

DONDE ρ ES EL RADIO DE LA ESFERA HEXADIMENSIONAL DETERMINADA POR LAS COMPONENTES DE LOS VECTORES $(\bar{x},\bar{y})$ O $(\bar{\mathfrak{x}},\bar{\mathfrak{y}})$. ES POSIBLE ENTONCES HACER EL TRATAMIENTO DEL PROBLEMA MEDIANTE LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS DEFINIDAS EN EL CAPITULO 1 .

EN TERMINOS DE (3.59) LAS ECUACIONES (3.5) Y (3.6) QUEDAN COMO SIGUE:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\left(\nabla_x^2 + \nabla_y^2 - \rho^2\right) \tag{3.60}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\left(\nabla_{\mathfrak{x}}^2 + \nabla_{\mathfrak{y}}^2 - \rho^2\right) \tag{3.61}$$

NOS LIMITAREMOS A UNA DE LAS ECUACIONES ANTERIORES, POR TENER LA MISMA ESTRUCTURA AMBAS, POR LO QUE LAS EXPRESIONES OBTENIDAS PARA UNA SERAN IGUALMENTE VALIDAS PARA LA OTRA. TRABAJEMOS CON LA ECUACION (3.60).

LA PARTE CINETICA DEL HAMILTONIANO (3.60) EN COORDENADAS HIPERESFERICAS ES (VER ECS. 1.34):

$$\hat{T} = -\frac{1}{2}\left(\nabla_x^2 + \nabla_y^2\right) = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{K}^2(\Omega)}{\rho^2}\right)$$

POR LO TANTO (3.60) QUEDA EXPRESADO COMO::

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{K}^2(\Omega)}{\rho^2}\right) + \frac{1}{2}\rho^2 \tag{3.62}$$

LA ECUACION DE SCHROEDINGER CORRESPONDIENTE ES:

$$\hat{\mathcal{H}}\,\Psi(\rho,\Omega) = E\,\Psi(\rho,\Omega) \tag{3.63}$$

ESTO ULTIMO, EXPLICITAMENTE, EMPLEANDO (3.62) QUEDA:

$$\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\hat{K}^2(\Omega)}{\rho^2}\right)+\frac{1}{2}\rho^2\right]\Psi(\rho,\Omega)=E\,\Psi(\rho,\Omega)$$

(3.64)

ESTA ULTIMA ECUACION ES SEPARABLE, POR LO QUE PROPONEMOS:

$$\Psi(\rho,\Omega) = R(\rho)\,\mathcal{W}_K(\Omega) \tag{3.64A}$$

DONDE $\mathcal{W}_K(\Omega)$ ES UN ARMONICO HIPERESFERICO QUE SATISFACE LA ECUACION -- (1.40):

$$\hat{K}^2(\Omega)\cdot\mathcal{W}_K(\Omega) = K(K+4)\,\mathcal{W}_K(\Omega)$$

POR LO QUE (3.64) SE REDUCE A:

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{5}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[2E-\rho^2-\frac{K(K+4)}{\rho^2}\right]R=0$$

(3.65)

ANALIZANDO EL COMPORTAMIENTO DE $R(\rho)$ EN LOS CASOS $\rho\to\infty$ Y $\rho\to 0$;TAL COMO SE HIZO EN LA SOLUCION DE LA ECUACION (3.16), SE VE FACILMENTE QUE $R(\rho)$ TIENE LA FORMA:

$$R(\rho)=\rho^K e^{-\frac{\rho^2}{2}}\,S(\rho) \tag{3.66}$$

DONDE $S(\rho)$ SATISFACE LA ECUACION:

$$S''(\rho)+\left(\frac{2K}{\rho}-\frac{5}{\rho}-2\rho\right)S'(\rho)+(2E-2K-6)\,S(\rho)=0$$

(3.67)

AHORA, MEDIANTE EL CAMBIO DE VARIABLE:

$$v\equiv\rho^2$$

LA ECUACION (3.67) SE REDUCE A :

$$v S''(v) + (k-3-v) S'(v) + \left(\frac{E}{2} - \frac{k}{2} - \frac{3}{2} \right) S(v) = 0$$

(3.68)

RESOLVIENDO ESTA ECUACION POR EL METODO DE SERIES, SE VE QUE $S(v)$ ES UN POLINOMIO DE LAGUERRE:

$$S(v) = S(\rho^2) = L_N^{k+2}(\rho^2) \tag{3.69}$$

POR LO QUE $R(\rho)$ TIENE LA EXPRESION:

$$R(\rho) = N_{Nk}\, \rho^k e^{-\frac{\rho^2}{2}} L_N^{k+2}(\rho^2)$$

(3.70)

DONDE N_{Nk} ES LA CONSTANTE DE NORMALIZACION:

$$N_{Nk} = \frac{2N!}{\Gamma(N+k+3)}, \tag{3.71}$$

Y LA ENERGIA E TIENE EL SIGUIENTE VALOR:

$$E = 2N + k + 3$$

(3.72)

LA ECUACION ASOCIADA A (3.61) TIENE EXACTAMENTE LA MISMA SOLUCION RADIAL (EC. 3.70), POR LO QUE TOMANDO EN CUENTA LAS RESPECTIVAS PARTES - HIPERANGULARES TENEMOS QUE LAS EIGENFUNCIONES DE (3.60) Y (3.61) SON -- RESPECTIVAMENTE:

$$\Psi^{Nk l_x l_y LM}_{(\rho, \alpha, \hat{x}, \hat{y})} = N_{Nk}\, e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^k L_N^{k+2}(\rho^2)\, \mathcal{W}_k^{l_x l_y LM}(\alpha, \hat{x}, \hat{y})$$

(3.73)

$$\Psi^{Nk l_x l_y LM}_{(\rho, \beta, \hat{x}, \hat{y})} = N_{Nk}\, e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^k L_N^{k+2}(\rho^2)\, \mathcal{W}_k^{l_x l_y LM}(\beta, \hat{x}, \hat{y}) \tag{3.74}$$

Por ser soluciones del mismo problema tanto las funciones (3.73) y (3.74) como las funciones (3.34) y (3.35), pero en sistemas de coordenadas distintos, trataremos ahora de encontrar una relacion entre dichos conjuntos de soluciones, lo cual finalmente nos conducira a encontrar la relacion entre los coeficientes de Moshinsky y los de Pevai-Paynal.

Para una energia total dada, podemos definir una transformacion unitaria que relacione a (3.34) con (3.73) y a (3.35) con (3.74), es decir:

$$\Psi^{NKl_xl_yLM}_{(\rho,\alpha,\hat{x},\hat{y})} = \sum_{n_x,n_y} \langle n_x n_y | NK \rangle_{l_x l_y} \Psi^{n_x l_x n_y l_y LM}_{(x,y;\hat{x},\hat{y})} \tag{3.75}$$

$$\Psi^{NKl_{\mathfrak{x}}l_{\mathfrak{y}}LM}_{(\rho,\beta,\hat{\mathfrak{x}},\hat{\mathfrak{y}})} = \sum_{n_{\mathfrak{x}},n_{\mathfrak{y}}} \langle n_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} | NK \rangle_{l_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{y}}} \Psi^{n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}} LM}_{(\mathfrak{x},\mathfrak{y};\hat{\mathfrak{x}},\hat{\mathfrak{y}})} \tag{3.76}$$

Donde los coeficientes $\langle n_i n_j | NK \rangle$ definen la transformacion y la suma esta restringida por la relacion de energia (ecs. 3.38 y 3.72):

$$E = 2N+K+3 = E_{n_x l_x} + E_{n_y l_y} = 2n_x + l_x + 2n_y + l_y + 3$$

$$\begin{aligned} \therefore \quad 2N+K &= 2n_x + 2n_y + l_x + l_y \\ &= 2n_{\mathfrak{x}} + 2n_{\mathfrak{y}} + l_{\mathfrak{x}} + l_{\mathfrak{y}} \end{aligned} \tag{3.77}$$

Es importante observar que la transformacion de la funcion (3.73) a (3.74) involucra precisamente a los coeficientes de Revai-Raynal, es decir:

$$\Psi^{NKl_{\mathfrak{x}}l_{\mathfrak{y}}LM}_{(\rho,\beta,\hat{\mathfrak{x}},\hat{\mathfrak{y}})} = \sum_{l_x,l_y} \langle l_x l_y | l_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{y}} \rangle_{KL} \Psi^{NKl_xl_yLM}_{(\rho,\alpha,\hat{x},\hat{y})} \tag{3.78}$$

AL MISMO TIEMPO, OBSERVESE QUE LA TRANSFORMACION DE MOSHINSKY ENTRE LAS FUNCIONES (3.34) Y (3.35) ES (VER EC. 3.36):

$$\Psi^{n_x l_x n_y l_y LM}(x,y;\hat{x},\hat{y}) = \sum_{\substack{n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} \\ n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}}}} \langle n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}} L | n_x l_x n_y l_y L \rangle \cdot \Psi^{n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}} LM}(\mathfrak{x},\mathfrak{y};\hat{\mathfrak{x}}\hat{\mathfrak{y}})$$

PODEMOS ENTONCES ESTABLECER UNA RELACION ENTRE LA TRANSFORMACION DE REVAI-RAYNAL Y LA DE MOSHINSKY LLEVANDO A CABO LA TRANSFORMACION (3.78) EN TRES PASOS SUCESIVOS COMO SIGUE(+):

1) EMPLEEMOS LA ECUACION (3.76):

$$|NK l_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{y}} LM\rangle = \sum_{n_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}}} |n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}} LM\rangle \langle n_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} | NK\rangle_{l_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{y}}} \tag{3.79}$$

2) LA ECUACION (3.36) QUE DEFINE LA TRANSFORMACION DE MOSHINSKY ES:

$$|n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}} LM\rangle = \sum_{\substack{n_x n_y \\ l_x l_y}} |n_x l_x n_y l_y LM\rangle \langle n_x l_x n_y l_y L | n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}} L\rangle \tag{3.80}$$

PERO POR (3.79) SABEMOS QUE:

$$|n_x l_x n_y l_y LM\rangle = \sum_{n_x, n_y} |NK l_x l_y LM\rangle \langle NK | n_x n_y\rangle_{l_x l_y} \tag{3.81}$$

SUBSTITUYENDO ESTO ULTIMO EN (3.80) OBTENEMOS:

$$|n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}} LM\rangle = \sum_{\substack{n_x n_y \\ l_x l_y}} |NK l_x l_y LM\rangle \langle n_x l_x n_y l_y L | n_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} l_{\mathfrak{y}} L\rangle \cdot \langle NK | n_x n_y\rangle_{l_x l_y} \tag{3.82}$$

3) SUBSTITUYAMOS AHORA LA EXPRESION ANTERIOR EN (3.79) Y LLEGAMOS A:

(+) En este momento resulta más cómodo emplear la notación de Dirac asociando a la función $\Psi^{abc\ldots}$, el ket $|abc\ldots\rangle$

$$|NK\,l_{\xi}\,l_{\eta}\,LM\rangle =$$

$$= \sum_{l_x l_y} |NK\,l_x\,l_y\,LM\rangle \cdot \left\{ \sum_{\substack{n_x,n_y \\ n_\xi,n_\eta}} \langle n_\xi n_\eta | NK\rangle_{l_\xi l_\eta} \langle n_x l_x n_y l_y L | n_\xi l_\xi n_\eta l_\eta L\rangle \langle NK | n_x n_y\rangle_{l_x l_y} \right\}$$

(3.83)

SI COMPARAMOS ESTA ULTIMA ECUACION CON (3.78), PODEMOS VER QUE SON EQUIVALENTES SI LOS RESPECTIVOS COEFICIENTES DE $|NK\,l_x\,l_y\,LM\rangle$ SON IGUALES, ES DECIR:

$$\sum_{l_x,l_y} |NK\,l_x\,l_y\,LM\rangle \langle l_x l_y | l_\xi l_\eta\rangle_{KL} =$$

$$= \sum_{l_x,l_y} |NK\,l_x\,l_y\,LM\rangle \cdot \left\{ \sum_{\substack{n_x,n_y \\ n_\xi,n_\eta}} \langle n_\xi n_\eta | NK\rangle_{l_\xi l_\eta} \cdot \langle n_x l_x n_y l_y L | n_\xi l_\xi n_\eta l_\eta L\rangle \langle NK | n_x n_y\rangle_{l_x l_y} \right\} \quad (3.84)$$

DE AQUI QUE LA RELACION ENTRE LOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY Y LOS DE PEVAI - RAYNAL ES LA SIGUIENTE :

$$\langle l_x l_y | l_\xi l_\eta\rangle_{KL} =$$

$$= \sum_{\substack{n_x,n_y \\ n_\xi,n_\eta}} \langle n_\xi n_\eta | NK\rangle_{l_\xi l_\eta} \langle n_x l_x n_y l_y L | n_\xi l_\xi n_\eta l_\eta L\rangle \langle NK | n_x n_y\rangle_{l_x l_y}$$

(3.85)

DONDE LAS SUMAS ESTAN SUJETAS A LA CONDICION (3.77):

$$2N + K = 2n_x + 2n_y + l_x + l_y = 2n_\xi + 2n_\eta + l_\xi + l_\eta$$

EN LA OBTENCION DE LA EXPRESION (3.85) SE HA TOMADO EN CUENTA EL HECHO QUE N Y K SON BUENOS NUMEROS CUANTICOS Y QUE

$$\langle n_x n_y | NK \rangle_{l_x l_y} \quad ; \quad \langle n_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} | NK \rangle_{l_{\mathfrak{x}} l_{\mathfrak{y}}} \; ,$$

SON REALES. YA QUE LA DEPENDENCIA RADIAL NO INFLUYE EN LAS TRANSFORMACIONES SUCESIVAS HECHAS, LA ECUACION (3.85) DEBE SER VALIDA PARA TODO VALOR DEL NUMERO CUANTICO RADIAL N. ESTO SIMPLIFICA EL CALCULO EXPLICITO DE LA RELACION (3.85) YA QUE LOS COEFICIENTES

$$\langle n_x n_y | 0 K \rangle_{l_x l_y}$$

ADQUIEREN UNA EXPRESION SIMPLE.

APLICANDO ALGUNAS PROPIEDADES DE LOS POLINOMIOS DE JACOBI Y DE LAGUERRE, EL VALOR DEL COEFICIENTE $\langle n_x n_y | 0K \rangle_{l_x l_y}$ RESULTA(+):

$$\langle n_x n_y | 0K \rangle_{l_x l_y} = (-1)^{n_x} \left[\frac{\binom{n + l_y + \frac{1}{2}}{n_x} \binom{n + l_x + \frac{1}{2}}{n_y}}{\binom{K+1}{n}} \right]^{1/2} \tag{3.86}$$

CON

$$n = \frac{K - l_x - l_y}{2}$$

SE PUEDE ENCONTRAR LA EXPRESION ANALOGA PARA $\langle n_{\mathfrak{x}} n_{\mathfrak{y}} | 0K \rangle$ UNICAMENTE HACIENDO EL CAMBIO $x \to \mathfrak{x}$; $y \to \mathfrak{y}$, POR LO QUE FINALMENTE LA ECUACION (3.85) PARA $N=0$ Y EMPLEANDO (3.86), NOS DA LA RELACION EXPLICITA BUSCADA ENTRE LOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY Y LOS DE PEVAI-RAYNAL:

(+) Ver Apendice 2(b)

$$\langle l_x l_y | l_{\bar{x}} l_{\bar{y}} \rangle_{KL} =$$

$$= \left[\binom{K+1}{n} \binom{K+1}{n'} \right]^{-\frac{1}{2}} \sum_{\substack{n_x, n_y \\ n_{\bar{x}}, n_{\bar{y}}}} (-1)^{n_x + n_{\bar{x}}} \langle n_x l_x n_y l_y L | n_{\bar{x}} l_{\bar{x}} n_{\bar{y}} l_{\bar{y}} L \rangle \cdot$$

$$\cdot \left[\binom{n + l_x + \frac{1}{2}}{n_y} \binom{n + l_y + \frac{1}{2}}{n_x} \binom{n' + l_{\bar{x}} + \frac{1}{2}}{n_{\bar{y}}} \binom{n' + l_{\bar{y}} + \frac{1}{2}}{n_{\bar{x}}} \right]^{1/2} \tag{3.87}$$

CON LAS CONDICIONES:

$$n = \frac{K - l_x - l_y}{2} \quad ; \quad n' = \frac{K - l_{\bar{x}} - l_{\bar{y}}}{2}$$

$$K = 2n_x + l_x + l_y + 2n_y = 2n_{\bar{x}} + 2n_{\bar{y}} + l_{\bar{x}} + l_{\bar{y}}$$

ESTE RESULTADO FUE OBTENIDO ORIGINALMENTE POR J. REVAI Y J. RAYNAL (4).

PODEMOS ENTONCES VER QUE MEDIANTE LAS ECUACIONES (3.57) Y (3.87), TENEMOS DOS MANERAS DE CALCULAR LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL: DIRECTAMENTE (3.57) O BIEN, MEDIANTE LOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY (3.87).

DE ACUERDO CON LOS AUTORES J. REVAI Y J. RAYNAL, SI UNA DE LAS PARTICULAS SE SUPONE DE MASA INFINITA, LOS COEFICIENTES (3.57) SE REDUCEN A LOS DE MOSHINSKY.

3.D. Sistemas Atomicos De Dos Electrones.

Para concluir este capitulo, haremos un estudio de los sistemas atomicos de dos electrones desde el punto de vista del Metodo de Coordenadas Hiperesfericas mediante el uso de los parentesis de transformacion de Revai-Raynal obtenidos en la seccion 3.B de este capitulo.

Como se menciono en el capitulo 2, el potencial para un sistema atomico de dos electrones es (ec. 2.1):

$$\sum_{i<j}^{3} V(r_{ij}) = -\frac{Ze^2}{r_{1N}} - \frac{Ze^2}{r_{2N}} + \frac{e^2}{r_{12}} \tag{3.88}$$

Ahora bien, debido a la relacion (2.2):

$$\begin{aligned} \bar{r}_{1N} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_N \\ \bar{r}_{2N} &= \bar{r}_2 - \bar{r}_N \\ \bar{r}_{12} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \end{aligned} \tag{3.89}$$

podemos expresar a la ecuacion (3.88) en terminos de las coordenadas de Jacobi (ec. 1.15):

$$\bar{\xi}_i = \left(\frac{m_j m_k}{m_j + m_k}\right)(\bar{r}_j - \bar{r}_k) \tag{3.90}$$

De esta ultima expresion y de (3.89) se ve inmediatamente que(+):

$$\begin{aligned} \bar{r}_{1N} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_N = \left(\frac{m_e + m_N}{m_e m_N}\right)^{1/2} \xi_1^{(1,N)} \\ \bar{r}_{2N} &= \bar{r}_2 - \bar{r}_N = \left(\frac{m_e + m_N}{m_e m_N}\right)^{1/2} \xi_2^{(2,N)} \\ \bar{r}_{12} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_2 = \left(\frac{2}{m_e}\right) \xi_3^{(1,2)} \end{aligned} \tag{3.91}$$

Donde m_e es la masa del electron y m_N la del nucleo.

(+) Por conveniencia se ha introducido el superíndice $\xi_i^{(j,N)}$. La cuál será útil en el cálculo de la fase φ_{ei}.

COMO $m_j >> m_e$, LAS ECUACIONES (3.91) SE SIMPLIFICAN BASTANTE, REDUCIENDOSE A LO SIGUIENTE:

$$\bar{r}_{1N} = \frac{1}{\sqrt{m_e}} \xi_1^{(1,N)} ; \bar{r}_{2N} = \frac{1}{\sqrt{m_e}} \xi_2^{(2,N)} ; \bar{r}_{12} = \sqrt{\frac{2}{m_e}} \xi_3^{(1,2)} \tag{3.92}$$

OBSERVESE QUE CADA COORDENADA $\bar{\xi}_i$ EN ESTA ULTIMA EXPRESION CORRESPONDE A UN CONJUNTO DISTINTO DE COORDENADAS DE JACOBI.

EN TERMINOS DE (3.92) LA EXPRESION (3.88) PARA EL POTENCIAL SE REDUCE A :

$$\sum_{i<j}^{3} V(r_{ij}) = -\frac{Ze^2\sqrt{m_e}}{\xi_1^{(1,N)}} - \frac{Ze^2\sqrt{m_e}}{\xi_2^{(2,N)}} + \frac{e^2\sqrt{m_e}}{\sqrt{2}\ \xi_3^{(1,2)}} \tag{3.93}$$

HACIENDO AHORA USO DE LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS (EC.1.26):

$$\xi_i = \rho \cos \alpha_i ,$$

LA ECUACION (3.93) EN COORDENADAS HIPERESFERICAS QUEDA:

$$V(\rho, \Omega_i) = -\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho} \left\{ \frac{Z}{\cos\alpha_1} + \frac{Z}{\cos\alpha_2} - \frac{1}{\sqrt{2}\cos\alpha_3} \right\} \tag{3.94}$$

COMO SE SEÑALO EN EL CAPITULO 2 EL POTENCIAL ESCRITO EN COORDENADAS HIPERESFERICAS (3.94) PRESENTA UNA PARTE RADIAL Y OTRA ANGULAR. LO CUAL ES CARACTERISTICO DEL POTENCIAL COULOMBIANO EMPLEADO.

YA QUE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS CONSTITUYEN UNA BASE COMPLETA, LA PARTE ANGULAR DE (3.94) PUEDE EXPRESARSE COMO SIGUE:

$$\frac{Z}{\cos\alpha_1} + \frac{Z}{\cos\alpha_2} - \frac{1}{\sqrt{2}\cos\alpha_3} = \sum_{K,l_{3_i}l_{4_i}} V_K^{l_{3_i}l_{4_i}} W_K^{l_{3_i}l_{4_i}LM}(\Omega_i)$$

(3,95)

DONDE Ω_i APARECE PARA UNA REPRESENTACION DADA. ELIJAMOS POR EJEMPLO LA REPRESENTACION Ω_1 POR LO QUE, LA ECUACION (3,95) NOS DICE QUE:

$$V_K^{l_{3_1}l_{4_1}} = \int W_K^{l_{3_1}l_{4_1}LM^*}(\Omega_1) \left\{ \frac{Z}{\cos\alpha_1} + \frac{Z}{\cos\alpha_2} - \frac{1}{\sqrt{2}\cos\alpha_3} \right\} d\Omega$$

(3,96)

ESTA ULTIMA INTEGRAL PUEDE ESCRIBIRSE COMO:

$$V_K^{l_{3_1}l_{4_1}} = Z \int W_K^{l_{3_1}l_{4_1}LM^*}(\Omega_1) \left(\frac{1}{\cos\alpha_1}\right) d\Omega \; +$$

$$+ Z \int W_K^{l_{3_1}l_{4_1}LM^*}(\Omega_1) \left(\frac{1}{\cos\alpha_2}\right) d\Omega - \frac{1}{\sqrt{2}} \int W_K^{l_{3_1}l_{4_1}LM^*}(\Omega_1) \left(\frac{1}{\cos\alpha_3}\right) d\Omega$$

(3,97)

OBSERVESE QUE DE LAS INTEGRALES (3,97), LA UNICA QUE SE PUEDE CALCULAR DE MANERA INMEDIATA ES LA PRIMERA, POR CORRESPONDER Ω_1 Y α_1 AL MISMO - CONJUNTO; PERO EN LAS OTRAS DOS Ω_1, α_2 Y Ω_1, α_3 CORRESPONDEN A DISTINTOS - CONJUNTOS. ES EN ESTE MOMENTO DONDE HAREMOS USO DE LOS PARENTESIS DE -r TRANSFORMACION DE REVAI-RAYNAL (3,57).

DE ACUERDO A LA EXPRESION (3,42), SE TIENE:

$$W_K^{l_{3_1}l_{4_1}LM}(\Omega_1) = \sum_{l_{3_2}l_{4_2}} \langle l_{3_2}l_{4_2} | l_{3_1}l_{4_1} \rangle_{KL} \, W_K^{l_{3_2}l_{4_2}LM}(\Omega_2) \qquad (3,98a)$$

$$\mathcal{W}_K^{l_{s_1} l_{\eta_1} LM}(\Omega_1) = \sum_{l_{s_3} l_{\eta_3}} \langle l_{s_3} l_{\eta_3} | l_{s_3} l_{\eta_3} \rangle_{KL} \, \mathcal{W}_K^{l_{s_3} l_{\eta_3} LM}(\Omega_3)$$

(3.98B)

SUBSTITUYENDO ESTO ULTIMO EN (3.97) SE OBTIENE LA SIGUIENTE RELACION PARA $V_K^{l_{s_1} l_{\eta_1}}$:

$$V_K^{l_{s_1} l_{\eta_1}} = Z \int \mathcal{W}_K^{l_{s_1} l_{\eta_1} LM^*}(\Omega_1) \left(\frac{1}{\cos\alpha_1} \right) d\Omega + Z \sum_{l_{s_2} l_{\eta_2}} \langle l_{s_1} l_{\eta_1} | l_{s_2} l_{\eta_2} \rangle_{KL} \cdot$$
$$\cdot \int \mathcal{W}_K^{l_{s_2} l_{\eta_2} LM^*}(\Omega_2) \left(\frac{1}{\cos\alpha_2} \right) d\Omega - \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l_{s_3} l_{\eta_3}} \langle l_{s_1} l_{\eta_1} | l_{s_3} l_{3} \rangle_{KL} \cdot$$
$$\cdot \int \mathcal{W}_K^{l_{s_3} l_{\eta_3} LM^*}(\Omega_3) \left(\frac{1}{\cos\alpha_3} \right) d\Omega \qquad (3.99)$$

OBSERVESE QUE AHORA LAS INTEGRALES TIENEN LA MISMA ESTRUCTURA Y CORRESPONDEN AL MISMO CONJUNTO DE COORDENADAS:

$$\int \mathcal{W}_K^{l_s l_\eta LM^*}(\Omega_i) \left(\frac{1}{\cos\alpha_i} \right) d\Omega \, , \qquad (3.100)$$

POR LO QUE SU CALCULO ES INMEDIATO Y LOS PARENTESIS DE TRANSFORMACION ESTAN DADOS EXPLICITAMENTE POR LA ECUACION (3.57). ANALICEMOS LA EXPRESION (3.100) MAS DETALLADAMENTE, ES DECIR:

$$\int \mathcal{W}_K^{l_s l_\eta LM^*}(\Omega_i) \left(\frac{1}{\cos\alpha_i} \right) d\Omega = \sum_{m_s m_\eta} (l_s m_s l_\eta m_\eta | LM) \cdot$$
$$\cdot \int \mathcal{W}_K^{l_s l_\eta m_s m_\eta^*}(\Omega_i) \left(\frac{1}{\cos\alpha_i} \right) d\Omega \qquad (3.101)$$

DONDE $(l_i m_i \, l_j m_j | LM)$ ES UN COEFICIENTE DE CLEBSCH-GORDAN.

EL CALCULO DE LA INTEGRAL EN ESTA ULTIMA EXPRESION SE PUEDE HACER DIRECTAMENTE EMPLEANDO EXPLICITAMENTE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS (+):

(+) $d\Omega = \operatorname{sen}^2\alpha \cos^2\alpha \, d\alpha \, d\Omega_s \, d\Omega_\eta$; según la ec. (2.20).

$$\int W_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta *}(\Omega_i)\left(\frac{1}{\cos\alpha_i}\right) d\Omega =$$

$$= N_K^{l_\xi l_\eta} \int (\cos\alpha_i)^{l_\xi} (\operatorname{sen}\alpha_i)^{l_\eta} P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha_i)\, Y_{l_\xi}^{m_\xi *}(\hat{\xi}_i)\, Y_{l_\eta}^{m_\eta *}(\hat{\eta}_i)\, \cdot$$

$$\cdot \left(\frac{1}{\cos\alpha_i}\right) \operatorname{sen}^2\alpha \cos^2\alpha \, d\alpha \, d\Omega_\xi \, d\Omega_\eta \tag{3.102}$$

LLEVANDO A CABO LA INTEGRACION SOBRE LOS ARMONICOS ESFERICOS, SABIENDO QUE

$$Y_0^0(\hat{\xi}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Y ADEMAS

$$\int Y_l^m(\xi)\, d\Omega_\xi = \sqrt{4\pi}\, \delta_{l,0} \cdot \delta_{m,0} \tag{3.103}$$

ENTONCES, LA INTEGRAL (3.102) SE REDUCE A:

$$\int W_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta *}(\Omega_i) \cdot \left(\frac{1}{\cos\alpha_i}\right) d\Omega =$$

$$= N_K^{00}\,(4\pi) \int_0^{\pi/2} P_n^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, \operatorname{sen}^2\alpha \cos^2\alpha \, d\alpha \tag{3.104}$$

HACIENDO EL CAMBIO DE VARIABLE

$$\gamma \equiv \cos 2\alpha \,,$$

Y EMPLEANDO EL VALOR DE N_K^{00} DE ACUERDO A (1.46), LA INTEGRAL ANTERIOR - QUEDA FINALMENTE COMO:

$$\int W_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta *}(\Omega_i)\left(\frac{1}{\cos\alpha_i}\right) d\Omega = \frac{2^{1/2}\pi\,(n+1)!}{\Gamma(n+\frac{3}{2})} \int_{-1}^{1} P_n^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}(\gamma) \cdot (1-\gamma)^{1/2}\, d\gamma \tag{3.105}$$

DE ACUERDO A ESTO ULTIMO Y A LA CONDICION (3.103), LA EXPRESION (3.101) QUEDA ESCRITA COMO SIGUE:

$$\int W_K^{l_s l_\eta LM^*}(\Omega_i)\left(\frac{1}{\cos \alpha_i}\right) d\Omega = \frac{2^{1/2}\pi (n+1)!}{\Gamma(n+\frac{3}{2})}\int_{-1}^{1} P_n^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}(\gamma)\cdot(1-\gamma)^{1/2}\, d\gamma$$

(3.106)

DONDE LOS COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN SE HAN REDUCIDO A LA UNIDAD - EN VIRTUD DE (3.103).

EN TERMINOS DE ESTO ULTIMO, LA ECUACION (3.99) SE REDUCE A LO SUIGUIENTE:

$$V_K^{l_{s_1} l_{\eta_1}} = \Big\{ Z \langle l_{s_1} l_{\eta_1} | 00 \rangle_{K0}^{\varphi_{11}} \cdot \delta_{l_{s_1}0}\,\delta_{l_{\eta_1}0} + Z \langle l_{s_1} l_{\eta_1} | 00 \rangle_{K0}^{\varphi_{21}} -$$

$$- \frac{1}{\sqrt{2}} \langle l_{s_1} l_{\eta_1} | 00 \rangle_{K0}^{\varphi_{31}} \Big\} \cdot \frac{2^{1/2}\pi (n+1)!}{\Gamma(n+\frac{3}{2})}\int_{-1}^{1} P_n^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}(\gamma)\,(1-\gamma)^{1/2}\, d\gamma$$

(3.107)

OBSERVESE QUE LOS COEFICIENTES $\langle l_{s_1} l_{\eta_1} | 00 \rangle_{KL}^{\varphi_{Kb}}$ Y $\langle l_{s_1} l_{\eta_1} | 0\,0 \rangle_{KL}^{\varphi_{Ka}}$, SON -- DISTINTOS, PUESTO QUE CORRESPONDEN A ANGULOS DE FASE (φ_{Ki}) DIFERENTES(+). NOTESE TAMBIEN QUE l_{s_1} Y l_{η_1} SON CERO UNICAMENTE EN EL PRIMER SUMANDO, DEBIDO A QUE EN ESA INTEGRAL APARECEN COMO $\delta_{l_{s_1}0}\,\delta_{l_{\eta_1}0}$.

EL CALCULO EXPLICITO DEL COEFICIENTE

$$\langle l_{s_1} l_{\eta_1} | 0\,0 \rangle_{K0}^{\varphi_{Ki}}$$

SE ENCUENTRA EN EL APENDICE 2 (F); ESENCIALMENTE SE HACE USO DE LAS PROPIEDADES DE LOS COEFICIENTES 9-J, CON $L=0=l_{s_2}=l_{\eta_2}$. PARA QUE l_{s_1}, l_{η_1} SE ACOPLEN PARA SUMAR $L=0$ ESTO SOLO ES POSIBLE SI

$$l_{s_1} = l_{\eta_1} = l\,,$$

LO CUAL SE DEMUESTRA EXPLICITAMENTE EN EL APENDICE ARRIBA SEÑALADO.

POR LO TANTO, LA EXPRESION FINAL CORRESPONDIENTE AL COEFICIENTE --

(+) Ver pág. 88

$\langle l_{3_1} l_{4_1} | 0\,0 \rangle_{KO}^{\varphi_{ki}}$ ES LA SIGUIENTE:

$$\langle l_{3_1} l_{4_1} | 0\,0 \rangle_{KO}^{\varphi_{ki}} = \langle l\, l | 0\,0 \rangle_{KO}^{\varphi_{ki}} =$$

$$= \left(\frac{\pi}{4}\right) \Gamma\left(n_k+\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(n_i+l+\frac{3}{2}\right) \left[\frac{\Gamma(n_i+1)\,\Gamma(n_k+1)\,\Gamma(n_i+2l+2)\,\Gamma(n_k+2)}{\Gamma(2n_i+2l+2)\,\Gamma(2n_k+2)} \right]^{1/2} \cdot$$

$$\sum_{l_1, l_3} (i)^{l_1+l_3-l} \cdot \frac{(2l+1)^{1/2}(2l_1+1)(2l_3+1)\cdot(l_1+l_3-l)!\,(l+l_1-l_3)!\,(l+l_3-l_1)!}{(l_1+l_3+l+1)!} \cdot$$

$$\left[\frac{\left(\frac{l_1+l_3+l}{2}\right)!}{\left(\frac{l_1+l_3-l}{2}\right)!\left(\frac{l+l_3-l_1}{2}\right)!\left(\frac{l+l_1-l_3}{2}\right)!} \right]^2 \cdot \sum_{\mu,\nu} (-1)^{\mu} \cdot$$

$$\frac{\Gamma(2\nu+l_1+l_3+2)\,\Gamma(2\mu+l_1+l_3+2)\,(\cos\varphi_{ki})^{2\nu+l_1+l_3}\,(\operatorname{sen}\varphi_{ki})^{2\mu+l_1+l_3}}{\Gamma(\nu+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(\nu+l_3+\frac{3}{2})\,\Gamma(\nu+1)\,\Gamma(\nu+l_1+l_3+2)\,\Gamma(\mu+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(\mu+l_3+\frac{3}{2})\,\Gamma(\mu-1)\cdot \Gamma(\mu+l_1+l_3+2)}$$

(3.108)

DONDE LA RESTRICCION SOBRE LAS SUMAS ES LA SIGUIENTE(VER EC.3.58)

$$K = 2n_i + 2l = 2n_k = 2\mu + 2\nu + 2l_1 + 2l_3 \qquad (3.109)$$

ADEMAS SE DEBE CUMPLIR LA SIGUIENTE CONDICION(+):

$$l_1 + l_3 + l = par \quad ; \quad \frac{l_1+l_3+l}{2} \geq l, l_1, l_3 \qquad (3.110)$$

COMPARESE ESTE RESULTADO CON LA EXPRESION (2.74).

DE LA ECUACION (3.109) SE CONCLUYE QUE K DEBE SER UN NUMERO PAR, ES DECIR, SOLO LOS TERMINOS CON K PAR DARAN CONTRIBUCION A LA EXPRESION (3.107). ESTE RESULTADO ES EL MISMO QUE SE OBTUVO EN EL CAPITULO 2 DEL ANALISIS DE LA EXPRESION (2.34).

(+) Ver Apéndice 2 (F).

POR LO QUE SE HA DISCUTIDO HASTA EL MOMENTO, LA ECUACION (3.107) RESULTA SER LO SIGUIENTE:

$$V_k^{\ell\ell} \equiv V_k^{\ell} = \left\{ Z \langle \ell_{\xi_1} \ell_{\eta_1} | 00 \rangle_{k0}^{\varphi_{11}} \delta_{\ell_{\xi_1} 0} \delta_{\eta_1 0} + Z \langle \ell\ell | 00 \rangle_{k0}^{\varphi_{21}} - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \ell\ell | 00 \rangle_{k0}^{\varphi_{31}} \right\} \cdot$$

$$\cdot \frac{2^{1/2}\pi \, (n+1)!}{\Gamma(n+\frac{3}{2})} \cdot \int_{-1}^{1} P_n^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}(\gamma) \, (1-\gamma)^{1/2} \, d\gamma \qquad (3.111)$$

CON $\langle \ell\ell | 00 \rangle_{k0}^{\varphi_{ki}}$ DADO POR (3.108), SE PUEDE DEMOSTRAR SIN DIFICULTAD QUE LOS SIGUIENTES PARENTESIS DE TRANSFORMACION TIENEN LOS VALORES:

$$\langle 00|00 \rangle_{00}^{\varphi_{ki}} = 1 \quad ; \langle 00|00 \rangle_{20}^{\varphi_{ki}} = \cos 2\varphi_{ki}$$

$$\langle 00|00 \rangle_{40}^{\varphi_{ki}} = \cos 4\varphi_{ki} + \frac{2}{3}\operatorname{sen}^2 2\varphi_{ki} \quad ; \quad \langle 11|00 \rangle_{20}^{\varphi_{ki}} = \operatorname{sen} 2\varphi_{ki}$$

$$\langle 11|00 \rangle_{40}^{\varphi_{ki}} = \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} \operatorname{sen} 4\varphi_{ki} \quad ; \quad \langle 22|00 \rangle_{40}^{\varphi_{ki}} = \frac{20}{\sqrt{2}} \operatorname{sen}^2 2\varphi_{ki} \qquad (3.112)$$

DE ACUERDO A ESTO, ALGUNOS VALORES EXPLICITOS PARA V_k^{ℓ} EN (3.111) HAN SIDO CALCULADOS PARA EL ATOMO DE HELIO ($Z=2$) (+):

$$V_0^0 = \frac{8\pi^{1/2}}{3}\left(8-\sqrt{2}\right) \qquad V_4^0 = -\frac{32}{35}\pi^{1/2}\left(6+\frac{\sqrt{2}}{4}\right)$$

$$V_2^0 = 0 \qquad V_4^1 = 0 \qquad (3.113)$$

$$V_2^1 = \frac{16\sqrt{2}}{15}\pi^{1/2} \qquad V_4^2 = -\frac{32}{35}\pi^{1/2}$$

COMPARENSE ESTOS VALORES CON LOS OBTENIDOS POR EL CAMINO DIRECTO EN EL CAPITULO 2, (EC. 2.40).

EN VIRTUD DE LAS EXPRESIONES (3.94) Y (3.95) Y SABIENDO QUE $\ell_{\xi_1} = \ell_{\eta_1} = \ell$, ASI COMO $L=0$ Y $M=0$, EL POTENCIAL PARA EL ATOMO DE DOS ELECTRONES SE PUEDE EXPRESAR COMO:

$$V(\rho,\Omega) = -\frac{e^2\sqrt{m_e}}{\rho} \sum_{k,\ell} V_k^{\ell} \, \mathcal{W}_k^{\ell\ell L=0 M=0}(\Omega) \qquad (3.114)$$

(+) El valor de φ_{ki} se calcula como se explicó en la pág. 88.

DONDE V_K^λ ESTA DADO POR LA ECUACION (3.111). ESTE ULTIMO RESULTADO FUE TAMBIEN ENCONTRADO EN EL CAPITULO ANTERIOR (EC.2.34), HACIENDO EL CALCULO DE UNA MANERA DIRECTA. ES OPORTUNO OBSERVAR QUE EN LA OBTENCION DEL VALOR DE V_K^λ POR EL METODO DIRECTO, SE NECESITAN CALCULAR INTEGRALES PARA CADA VALOR DE λ, MIENTRAS QUE MEDIANTE LOS PARENTESIS DE TRANSFORMACION EL TRABAJO SE REDUCE CONSIDERABLEMENTE.

A PARTIR DE LA EXPRESION (3.110), EL RAZONAMIENTO SEGUIDO EN EL CAPITULO ANTERIOR ES EL QUE SE DEBE SEGUIR AQUI: APROVECHANDO LA COMPLETEZ DE LA BASE HIPERESFERICA HACEMOS UN DESARROLLO DEL POTENCIAL COMO DE LA FUNCION DE ONDA EN TERMINOS DE ARMONICOS HIPERESFERICOS, ESTO NOS PERMITE REDUCIR LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL DE SCHROEDINGER A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS EN (ρ).- TRATANDO EL CASO "MONOPOLAR" ($K=0$) EL SISTEMA SE DESACOPLA, SIENDO LAS SOLUCIONES CORRESPONDIENTES $R^{(0)}_{n_\rho K}$ DEL TIPO DEL ATOMO DE HIDROGENO Y CONSTITUYEN UNA BASE COMPLETA PARA LAS FUNCIONES RADIALES; POR ESTO ULTIMO ES POSIBLE REDUCIR FINALMENTE LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL DE SCHROEDINGER A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES Y HOMOGENEAS (EC.2.67):

$$\left(E^{(0)}_{n_\rho'' K''} - E\right) a^{l_3'' l_4''}_{n_\rho'' K''} - e^2\sqrt{m_e} \sum_{\substack{K\neq 0 \\ l}} \sum_{\substack{K', l_3', l_4' \\ n_\rho'}} a^{l_3' l_4'}_{n_\rho' K'} V_K^l \cdot$$

$$\cdot \left\langle R^{(0)}_{n_\rho'' K''}(\rho) \right| \frac{1}{\rho} \left| R^{(0)}_{n_\rho' K'}(\rho) \right\rangle \left\langle W^{l_3'' l_4'' L'' M''}_{K''}(\alpha) \right| W^{l l 0 0}_{K}(\alpha) \left| W^{l_3' l_4' L' M'}_{K'}(\alpha) \right\rangle$$

$$= 0$$

LA SUMA SE LLEVA A CABO SOBRE TODO EL ESPECTRO CONTINUO Y DISCRETO. V_K^l ESTA DADA POR (3.111)-EN TERMINOS DE LOS PARENTESIS DE TRANSFORMACION DE REVAI-RAYNAL.

EVIDENTEMENTE EL TRATAMIENTO DEL PROBLEMA DE TRES CUERPOS EN GENERAL, PUEDE SER HECHO MEDIANTE EL USO DE LOS PARENTESIS DE REVAI-RAYNAL. EN ESTE CASO, SE HAN ELEGIDO LOS SISTEMAS ATOMICOS DE DOS ELECTRONES DEBIDO A QUE YA HAN SIDO TRATADOS EN EL CAPITULO 2 DE FORMA DIRECTA, LO - CUAL PERMITE TENER UN PUNTO DE COMPARACION PARA AMBOS TRATAMIENTOS.

DISCUSION.

EN ESTA TESIS SE HA ESTABLECIDO EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS COMO UN ENFOQUE DISTINTO PARA EL ESTUDIO CUANTICO DE SISTEMAS DE MUCHAS PARTICULAS. SE HA PLANTEADO EL CAMINO A SEGUIR EN LA APLICACION DEL METODO Y EN ESPECIAL EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS HA SIDO TRATADO EXPLICITAMENTE.

EN EL CAPITULO 2 SE ESTUDIO LA APLICACION DEL METODO PARA LOS SISTEMAS ATOMICOS. EN PARTICULAR EL ATOMO DE HELIO FUE TRATADO PARA EL CASO DE SIMETRIA HIPERESFERICA PARA LA INTERACCION ($k=0$) UNICAMENTE PARA MOSTRAR LA FORMA DE LA BASE RADIAL $R^{(0)}_{n_\rho k}(\rho)$ PARA DICHO SISTEMA. EL PROPOSITO DE ESTE CAPITULO NO HA SIDO ESTUDIAR UN SISTEMA O SISTEMAS EN PARTICULAR, SINO MOSTRAR EL CAMINO PARA EL TRATAMIENTO DE SISTEMAS ATOMICOS MEDIANTE EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS.

EN GENERAL, CUANDO SE TRABAJA CON UN ATOMO DE DOS ELECTRONES EN EL CASO $k\neq 0$, SE DEBEN SEGUIR ESENCIALMENTE LOS SIGUIENTES PASOS:

1) EN EL CASO $k=0$ SE HA ENCONTRADO LA BASE RADIAL $R^{(0)}_{n_\rho k}(\rho)$

2) EMPLEANDO LA BASE RADIAL Y ANGULAR, REDUCIR LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL DE SCHROEDINGER A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES Y HOMOGENEAS Y CONSTRUIR LA MATRIZ DE ENERGIA CORRESPONDIENTE.

3) DIAGONALIZAR LA MATRIZ DE ENERGIA.

4) ANALIZAR LA CONVERGENCIA DE LAS SOLUCIONES.

SIGUIENDO BASICAMENTE EL TRABAJO DE J. REVAI Y J. RAYNAL, EN EL CAPITULO 3 SE DEFINIO LA TRANSFORMACION DE REVAI-RAYNAL, QUE RELACIONA FUNCIONES DE DISTINTOS CONJUNTOS DE COORDENADAS DE JACOBI Y FUE POSIBLE OBTENER LA EXPRESION EXPLICITA DE LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION DE REVAI-RAYNAL, CUYA UTILIDAD EN GENERAL ES SIMPLIFICAR EL CALCULO DE ELEMENTOS DE MATRIZ EN EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS.

LA RELACION ENTRE LOS COEFICIENTES DE MOSHINSKY Y LOS DE REVAI--

RAYNAL,OBTENIDA ORIGINALMENTE POR ESTOS ULTIMOS,FUE CALCULADA EXPLICITAMENTE.ESTA RELACION ES BASTANTE VENTAJOSA,YA QUE PODEMOS OBTENER LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL EN TERMINOS DE LOS DE MOSHINSKY YA TABULADOS (6),LO CUAL PERMITE APLICAR EL METODO DE MANERA MAS SISTEMATICA.PARA EL CASO DE N PARTICULAS AUN NO SE HA OBTENIDO UNA EXPRESION CERRADA PARA LOS CORRESPONDIENTES COEFICIENTES DE TRANSFORMACION,ESTO ES POR LO TANTO MOTIVO DE INVESTIGACION.

CABE MENCIONAR QUE LOS RESULTADOS OBTENIDOS EN EL CAPITULO 2 SON NUEVOS,ES DECIR,NO SE SIGUIO ALGUN TRABAJO PREVIAMENTE PUBLICADO.EN ESTE CAPITULO SE OBTUVIERON ALGUNAS REGLAS DE SELECCION (ECS.2.74),ASI COMO EN EL CAPITULO 3 (ECS.3.110).A LO LARGO DE LOS OTROS CAPITULOS,ALGUNOS RESULTADOS SE PRESENTAN TAMBIEN CON EL MISMO CARACTER.

FINALMENTE CONVIENE SUBRAYAR QUE EL METODO DE COORDENADAS HIPERESFERICAS TIENE LA VENTAJA DE SER EXACTO EN SU FORMULACION Y ADEMAS PERMITE REDUCIR LA ECUACION DIFERENCIAL PARCIAL DE SCHROEDINGER A UN SISTEMA INFINITO DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS ACOPLADAS.LAS APROXIMACIONES HECHAS SON CONOCIDAS EN EL SENTIDO DE QUE SABEMOS HASTA QUE PUNTO LIMITAR EL NUMERO DE ECUACIONES,LO CUAL ESTA SUJETO AL ANALISIS DE LA CONVERGENCIA DE LAS SOLUCIONES.ESTA CONVERGENCIA ES AUN ESTUDIADA Y DE ELLA DEPENDE LA APLICABILIDAD DEL METODO.

APENDICE 1.

EN ESTE APENDICE SE RESOLVERA EXPLICITAMENTE LA ECUACION DIFERENCIAL(1.43),TAMBIEN SE CALCULARA EL VALOR DEL COEFICIENTE DE NORMALIZACION $N_k^{l_3 l_4}$ DADO EN (1.46).

A. SOLUCION DE LA ECUACION (1.43):

$$\frac{d^2 X_1}{d\alpha^2} + 4\cot 2\alpha \frac{dX_1}{d\alpha} - \left[\frac{l_3(l_3+1)}{\cos^2\alpha} + \frac{l_4(l_4+1)}{\operatorname{sen}^2\alpha} - \lambda \right] X_1 = 0 \tag{A.1}$$

ESTA ECUACION ES SINGULAR EN LOS PUNTOS $\alpha=0$ ($=n\pi$, CON n ENTERO) Y $\alpha=\frac{\pi}{2}$ ($=\frac{2n+1}{2}\pi$, CON n ENTERO). PARA REMOVER ESTAS SINGULARIDADES, PROPONEMOS A $X(\alpha)$ COMO SIGUE:

$$X_1(\alpha) = (\operatorname{sen}\alpha)^a (\cos\alpha)^b S(\alpha) \tag{A.2}$$

ENCONTREMOS AHORA EL VALOR DE a Y b EN LA ECUACION (A.2), PARA $\alpha=0$ Y $\alpha=\frac{\pi}{2}$ RESPECTIVAMENTE. SUBSTITUYENDO (A.2) EN LA ECUACION (A.1) Y LLEVANDO A CABO LAS OPERACIONES INDICADAS, DESPUES DE SIMPLIFICAR Y ASOCIAR TERMINOS SEMEJANTES, OBTENEMOS LA ECUACION:

$$\begin{aligned} & S''(\alpha)\left(\frac{1-\cos^2 2\alpha}{4}\right) + \left[a\left(\frac{1+\cos 2\alpha}{2}\right) - b\left(\frac{1-\cos 2\alpha}{2}\right) + \cos 2\alpha\right](1-\cos^2 2\alpha)^{1/2} S'(\alpha) \\ & + \left\{ \left[l_3\left(\frac{1-\cos 2\alpha}{2}\right) - l_4\left(\frac{1+\cos 2\alpha}{2}\right)\right]^2 + 2\cos 2\alpha\left[l_4\left(\frac{1+\cos 2\alpha}{2}\right) - l_3\left(\frac{1-\cos 2\alpha}{2}\right)\right] \right. \\ & \left. - (b^2+b+l_3)\left(\frac{1-\cos 2\alpha}{2}\right) - (a^2+a+l_4)\left(\frac{1+\cos 2\alpha}{2}\right) + \lambda\left(\frac{1-\cos^2 2\alpha}{4}\right)\right\} S(\alpha) = 0 \end{aligned} \tag{A.3}$$

DONDE SE HA HECHO USO DE ALGUNAS IDENTIDADES TRIGONOMETRICAS INMEDIATAS.

SE PUEDE VER QUE PARA $\alpha = 0$ LA ECUACION (A.3) SE REDUCE A:

$$\left[l_\eta^2 + 2 l_\eta - (a^2 + a + l_\eta) \right] S(\alpha) = 0 \tag{A.4}$$

DE AQUI QUE:

$$a = l_\eta \quad \text{ó} \quad a = -l_\eta - 1$$

DE ESTOS DOS VALORES OBTENIDOS, DEBEMOS ESCOGER AQUEL TAL QUE LA SOLUCION SEA FINITA EN TODO PUNTO, PARA QUE ASI TENGA SENTIDO FISICO LA FUNCION DE ONDA BUSCADA (VER CAPITULO 1). ASI PUES, ESCOGEMOS EL VALOR:

$$a = l_\eta$$

DE LA MISMA MANERA, PODEMOS CALCULAR EL VALOR DE b, HACIENDO $\alpha = \frac{\pi}{2}$ EN (A.3), DE DONDE SE OBTIENE:

$$b = l_\xi$$

POR LO TANTO LA SOLUCION PROPUESTA EN (A.2) QUEDA:

$$X_\eta(\alpha) = (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta} (\cos\alpha)^{l_\xi} \, S(\alpha) \tag{A.5}$$

DONDE $S(\alpha)$ SATISFACE LA ECUACION DIFERENCIAL:

$$\begin{aligned} & S''(\alpha)\left(\frac{1-\cos^2 2\alpha}{4}\right) + \left[l_\eta \left(\frac{1+\cos 2\alpha}{2}\right) - l_\xi \left(\frac{1-\cos 2\alpha}{2}\right) + \cos 2\alpha \right] \cdot \\ & \cdot (1-\cos^2 2\alpha)^{1/2} S'(\alpha) + \left\{ \left[l_\xi \left(\frac{1-\cos 2\alpha}{2}\right) - l_\eta \left(\frac{1+\cos 2\alpha}{2}\right) \right]^2 + 2\cos 2\alpha \cdot \right. \\ & \cdot \left[l_\eta \left(\frac{1+\cos 2\alpha}{2}\right) - l_\xi \left(\frac{1-\cos 2\alpha}{2}\right) \right] - l_\xi (l_\xi + 2)\left(\frac{1-\cos 2\alpha}{2}\right) - \\ & \left. - l_\eta (l_\eta + 2)\left(\frac{1+\cos 2\alpha}{2}\right) + \lambda \left(\frac{1-\cos^2 2\alpha}{4}\right) \right\} S(\alpha) = 0 \end{aligned} \tag{A.6}$$

TRATAREMOS AHORA DE ENCONTRAR EL VALOR DE $S(\alpha)$ A PARTIR DE LA ECUACION ANTERIOR, ENTONCES, HACIENDO EL SIGUIENTE CAMBIO DE VARIABLE:

$$\gamma \equiv \cos 2\alpha \tag{A.7}$$

APLICANDO LA REGLA DE LA CADENA Y REALIZANDO TODAS LAS SIMPLIFICACIONES POSIBLES, SE PUEDE VER QUE LA ECUACION (A.6) SE REDUCE A:

$$(1-\gamma^2)\, S''(\gamma) + \left[l_3 - l_4 - (l_3 + l_4 + 3)\gamma \right] S'(\gamma) + \left[\frac{\lambda}{4} - (l_3 + l_4) - \frac{1}{4}(l_3 + l_4)^2 \right] \cdot S(\gamma) = 0 \tag{A.8}$$

ESTA ECUACION DIFERENCIAL ES SINGULAR EN $\gamma = \pm 1$; PROPONEMOS ENTONCES UNA SOLUCION DE LA FORMA:

$$S(\gamma) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k (\gamma - 1)^k \tag{A.9}$$

ENTONCES:

$$S'(\gamma) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k (k) (\gamma - 1)^{k-1} \quad ; \quad S''(\gamma) = \sum_{k=2}^{\infty} C_k (k)(k-1)(\gamma - 1)^{k-2}$$

SUBSTITUYENDO EN LA ECUACION DIFERENCIAL (A.9) OBTENEMOS:

$$(1-\gamma^2) \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) C_k (\gamma - 1)^{k-2} + \left[l_3 - l_4 - (l_3 + l_4 + 3)\gamma \right] \sum_{k=1}^{\infty} k C_k (\gamma - 1)^{k-1} +$$

$$+ \left[\frac{\lambda}{4} - (l_3 + l_4) - \frac{1}{4}(l_3 + l_4)^2 \right] \sum_{k=0}^{\infty} C_k (\gamma - 1)^k = 0$$

EXPRESANDO $1-\gamma^2$ COMO:

$$1 - \gamma^2 = -(\gamma - 1)^2 - 2(\gamma - 1)$$

SUBSTITUYENDO EN EL DESARROLLO Y CAMBIANDO DE SIGNO A TODA LA ECUACION:

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)\, C_k\, (\gamma-1)^k + 2\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)\, C_k\, (\gamma-1)^{k-1} - (l_5-l_4)\sum_{k=1}^{\infty} k\, C_k\, (\gamma-1)^{k-1} +$$

$$+ (l_4+l_5+3)\,\gamma \sum_{k=1}^{\infty} k\, C_k\, (\gamma-1)^{k-1} - \left[\frac{\lambda}{4} - (l_5+l_4) - \frac{1}{4}(l_5+l_4)^2\right] \sum_{k=0}^{\infty} C_k (\gamma-1)^k = 0$$

AHORA, EN EL CUARTO TERMINO DE LA ECUACION ANTERIOR PODEMOS HACER LO SIGUIENTE:

$$(l_4+l_5+3)\,\gamma \sum_{k=1}^{\infty} k\, C_k\, (\gamma-1)^{k-1} =$$

$$= (l_4+l_5+3) \sum_{k=1}^{\infty} k\, C_k\, (\gamma-1)^k + (l_4+l_5+3)\sum_{k=1}^{\infty} k\, C_k\, (\gamma-1)^{k-1}$$

SUBSTITUYENDO ESTO EN EL DESARROLLO Y ASOCIANDO TERMINOS SEMEJANTES, DESPUES DE AJUSTAR LOS INDICES DE SUMA OBTENEMOS:

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)\, C_k\, (\gamma-1)^k + (l_5+l_4+3) \sum_{k=1}^{\infty} k\, C_k\, (\gamma-1)^k - \left[\frac{\lambda}{4} - (l_5+l_4) - \frac{1}{4}(l_5+l_4)^2\right]\cdot$$

$$\cdot \sum_{k=0}^{\infty} C_k (\gamma-1)^k + 2\sum_{k=1}^{\infty} (k+1)(k)\, C_{k+1}\, (\gamma-1)^k - (l_5-l_4)\sum_{k=0}^{\infty} (k+1)\, C_{k+1}\, (\gamma-1)^k +$$

$$+ (l_5+l_4+3)\sum_{k=0}^{\infty} (k+1)\, C_{k+1} (\gamma-1)^k = 0 \qquad (A.10)$$

DE ESTA ECUACION SE VE FACILMENTE QUE LA RELACION DE RECURRENCIA RESULTA:

$$\frac{C_{k+1}}{C_k} = \frac{\frac{\lambda}{4} - (l_5+l_4) - \frac{1}{4}(l_5+l_4)^2 - k(k+l_5+l_4+2)}{(k+1)(2k+2l_4+3)} \qquad (A.11)$$

PARA EXAMINAR EL COMPORTAMIENTO DE LA SERIE, APLIQUEMOS EL CRITERIO DE COMPARACION.

SABEMOS QUE LA SERIE:

$$e^{x^2} \equiv \sum_s \frac{(x^2)^s}{s!} = \sum_s c_s x^{2s}, \qquad (A.12)$$

DIVERGE, Y LA RAZON $\frac{c_{s+1}}{c_s}$ DE DOS COEFICIENTES SUCESIVOS ES :

$$\frac{c_{s+1}}{c_s} = \frac{1}{s+1} . \qquad (A.13)$$

SI DIVIDIMOS EL COCIENTE (A.11) ENTRE (A.13), ENCONTRAMOS QUE:

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} > \frac{c_{s+1}}{c_s} \qquad (A.14)$$

ESTO ULTIMO INDICA QUE LA SERIE (A.9) DIVERGE. PARA QUE LA SOLUCION TENGA SENTIDO FISICO, ES NECESARIO CORTAR LA SERIE. SEA $n = k$ EL MAXIMO VALOR DE k PARA EL CUAL LA SERIE SE CORTA, ESTO IMPLICA QUE (A.11) SE DEBE ANULAR EN $k=n$ Y ESTO SUCEDE SOLAMENTE QUE EL NUMERADOR SEA CERO, ES DECIR:

$$\frac{\lambda}{4} - (l_s + l_\eta) - \frac{1}{4}(l_s + l_\eta)^2 - n(n + l_s + l_\eta + 2) = 0$$

(A.15)

DE ESTA EXPRESION PODEMOS ENCONTRAR EL VALOR DE λ EN TERMINOS DE n l_s Y l_η:

$$\begin{aligned} \lambda &= (2n + l_s + l_\eta)(2n + l_s + l_\eta + 4) \\ &= K(K+4) \end{aligned} \qquad (A.16)$$

CON

$$K \equiv 2n + l_s + l_\eta$$

ENTONCES, POR (A.16) LA RELACION DE RECURRENCIA SE REDUCE A :

$$c_{k+1} = \frac{n(n+a+b+1) - k(k+a+b+1)}{(k+1)[2k + (2a+1)]} c_k$$

(A.17)

DONDE SE HA HECHO LA CONVENCION:

$$a = l_\eta + \frac{1}{2} \ ; \ b = l_s + \frac{1}{2} \qquad (A.18)$$

En resumen, la solucion de la ecuacion (A.8) es:

$$S(\gamma) = \sum_{k=0}^{n} C_k (\gamma-1)^k ,$$

donde los coeficientes del desarrollo estan determinados por (A.17).
Explicitamente $S(\gamma)$ es lo siguiente:

$$S(\gamma) = C_0 + C_1(\gamma-1) + C_2(\gamma-1)^2 + \cdots + C_n(\gamma-1)^n$$

$$= 1 + \frac{n(n+a+b+1)}{2(a+1)}(\gamma-1) + \frac{n(n+a+b+1)-(a+b+2)}{4(a+2)} \cdot \frac{n(n+a+b+1)}{2(a+1)}(\gamma-1)^2 + \cdots + C_{n-1}\frac{n(n+a+b+1)-(n-1)(a+b+n)}{n[2(n-1)+2(a+1)]}(\gamma-1)^n$$

Algunos polinomios $S(\gamma)$ son :

$n=0$ $\quad S(\gamma) = 1$

$n=1$ $\quad S(\gamma) = \frac{1}{2(a+1)}\left[2(a+1) + (a+b+2)(\gamma-1)\right]$

$n=2$ $\quad S(\gamma) = \left[4(a+2)(a+1) + 4(a+b+3)(a+2)(\gamma-1) + (a+b+3)(a+b+4)(\gamma-1)^2\right] \cdot \frac{1}{4(a+2)(a+1)}$

$n=3$ $\quad S(\gamma) = \left\{8(a+3)(a+2)(a+1) + 12(a+b+4)(a+3)(a+2)(\gamma-1) + 6(a+b+5)(a+b+4)(a+3)(\gamma-1)^2 + (a+b+6)(a+b+5)(a+b+4)\cdot(\gamma-1)^3\right\} \cdot \frac{1}{8(a+3)(a+2)(a+1)}$

Estos son precisamente los polinomios de Jacobi (no normalizados) (3)

$$P_0^{(a,b)}(\gamma) \; ; \; P_1^{(a,b)}(\gamma) \; ; \; P_2^{(a,b)}(\gamma) \; ; \; P_3^{(a,b)}(\gamma) ,$$

respectivamente.

Podemos entonces concluir que (A.8) es la ecuacion diferencial que sa-

TISFACEN LOS POLINOMIOS DE JACOBI:

$$S(\gamma) = P_n^{(a,b)}(\gamma) = P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)$$

(A.19)

FINALMENTE, EN TERMINOS DE LAS EXPRESIONES (A.5) Y (A.19), LA SOLUCION DE LA ECUACION DIFERENCIAL (A.1) ES:

$$X_\nu(\alpha) = (\cos\alpha)^{l_\xi} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta} P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)$$

(A.20)

B. CALCULO DEL COEFICIENTE DE NORMALIZACION $N_K^{l_\xi l_\eta}$ PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS.

DE ACUERDO A LA EXPRESION (1.45), LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS SON LOS SIGUIENTES:

$$\mathcal{U}_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega) = N_K^{l_\xi l_\eta} (\cos\alpha)^{l_\xi} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta} P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, Y_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{\xi})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{\eta})$$

(B.1)

DONDE $N_K^{l_\xi l_\eta}$ ES EL COEFICIENTE DE NORMALIZACION PARA LOS MISMOS. CALCULEMOS UNA EXPRESION EXPLICITA PARA DICHO COEFICIENTE.

EN GENERAL, LA ECUACION DE EIGENVALORES ASOCIADA AL HAMILTONIANO - (1.28):

$$\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi^2\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{1}{\eta^2}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta^2\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right] + \frac{1}{2}\left[\frac{\hat{l}^2(\hat{\xi})}{\xi^2} + \frac{\hat{l}^2(\hat{\eta})}{\eta^2}\right]\right\}\Psi(\xi,\eta) = E\,\Psi(\xi,\eta)$$

TIENE LA SOLUCION $\Psi(\xi,\eta)$, TAL QUE PARA CALCULAR LA CONSTANTE DE NORMALIZACION HACEMOS USO DE LA CONDICION:

$$\int \Psi^*(\xi,\eta)\, \Psi(\xi,\eta)\, d^3\xi\, d^3\eta = 1$$

(B.2)

ESTO ULTIMO LO PODEMOS ESCRIBIR COMO(9):

$$\int \Psi^*(\xi,\eta)\, \Psi(\xi,\eta)\, (\xi^2 d\xi)(\eta^2 d\eta)\; d\Omega_\xi \cdot d\Omega_\eta \tag{B.3}$$

AHORA, DEBIDO A LA DEFINICION DE LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS:

$$\left.\begin{array}{l} \xi = \rho \cos\alpha \\ \eta = \rho \operatorname{sen}\alpha \end{array}\right\};$$

LA FUNCION DE ONDA PUEDE ESCRIBIRSE COMO (VER CAP.1):

$$\Psi(\xi,\eta) = \Psi(\rho,\Omega) = R(\rho)\, W_k(\Omega)$$

POR LO TANTO, LA ECUACION (B.3) TOMA LA FORMA:

$$\int R^*(\rho)\, R(\rho)\; W_k^*(\Omega)\, W_{k'}(\Omega)\; \xi^2\eta^2\, J\left(\frac{\xi,\eta}{\rho,\alpha}\right) d\rho\, d\alpha\, d\Omega_\xi\, d\Omega_\eta = 1 \tag{B.4}$$

DONDE $J\left(\frac{a,b}{c,d}\right)$ ES EL JACOBIANO DE TRANSFORMACION EN EL CALCULO DEL ELEMENTO DE VOLUMEN. SE PUEDE VER FACILMENTE QUE MEDIANTE LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS:

$$J\left(\frac{\xi,\eta}{\rho,\alpha}\right) = \rho\,, \tag{B.5}$$

Y POR LO TANTO:

$$\xi^2\eta^2\, J\left(\frac{\xi,\eta}{\rho,\alpha}\right) = \rho^5 \operatorname{sen}^2\alpha \cos^2\alpha \tag{B.6}$$

SUBSTITUYENDO ESTO ULTIMO EN LA ECUACION (B.4) Y POR SER $R(\rho)$ Y $W_k(\Omega)$, INDEPENDIENTES, (B.4) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$\int R^*(\rho)\, R(\rho)\, \rho^5 d\rho \cdot \int W_k^*(\Omega)\, W_{k'}(\Omega) \operatorname{sen}^2\alpha \cos^2\alpha\; d\alpha\, d\Omega_\xi\, d\Omega_\eta = 1 \tag{B.7}$$

DE ESTO ULTIMO DEBEMOS TENER:

$$\int R^{*}(\rho)\, R(\rho)\, \rho^{5}\, d\rho = 1 \tag{B.8}$$

$$\int W_K^{*}(\Omega)\, W_K(\Omega)\, \operatorname{sen}^2\alpha \cos^2\alpha \, d\alpha \, d\Omega_\xi \, d\Omega_\eta = 1 \tag{B.9}$$

DE LAS CONDICIONES ANTERIORES, LA QUE NOS INTERESA POR EL MOMENTO ES LA (B.9), PARA CALCULAR LA CONSTANTE DE NORMALIZACION PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS.

ESCRIBIENDO EXPLICITAMENTE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS EN (B.9) OBTENEMOS:

$$\begin{aligned} \int N_K^{l_\xi l_\eta} \cdot N_{K'}^{l'_\xi l'_\eta} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta + l'_\eta} (\cos\alpha)^{l_\xi + l'_\xi} P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, P_n^{(l'_\eta+\frac{1}{2},\, l'_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha)\, \cdot \\ \cdot\, Y_{l_\xi}^{m_\xi *}(\hat{\xi})\, Y_{l'_\xi}^{m'_\xi}(\hat{\xi})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta *}(\hat{\eta})\, Y_{l'_\eta}^{m'_\eta}(\hat{\eta}) \operatorname{sen}^2\alpha \cos^2\alpha \, d\alpha \, d\Omega_\xi \, d\Omega_\eta \\ = 1 \end{aligned} \tag{B.10}$$

APROVECHANDO LA CONDICION:

$$\int Y_{l_\xi}^{m_\xi *}(\hat{\xi})\, Y_{l'_\xi}^{m'_\xi}(\hat{\xi})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta *}(\hat{\eta})\, Y_{l'_\eta}^{m'_\eta}(\hat{\eta})\, d\Omega_\xi \, d\Omega_\eta = \delta_{m_\xi m'_\xi}\, \delta_{m_\eta m'_\eta}\, \delta_{l_\xi l'_\xi}\, \delta_{l_\eta l'_\eta},$$

LA ECUACION (B.10) SE REDUCE A:

$$\left(N_K^{l_\xi l_\eta}\right)^2 \int_0^{\pi/2} (\operatorname{sen}\alpha)^{2l_\eta+2} (\cos\alpha)^{2l_\xi+2} \left[P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\, l_\xi+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) \right]^2 d\alpha = 1 \tag{B.11}$$

LOS LIMITES DE INTEGRACION CORRESPONDEN AL INTERVALO DE DEFINICION DE LOS POLINOMIOS DE JACOBI: $[0, \frac{\pi}{2}]$.

HACIENDO EL CAMBIO DE VARIABLE DE INTEGRACION:

$$\gamma = \cos 2\alpha ,$$

LA EXPRESION (B.11) RESULTA, DESPUES DE SIMPLIFICACIONES OBVIAS:

$$\left(N_{k}^{l_\xi l_\eta}\right)^2 2^{-a-b-2} \int_{-1}^{1} (1-\gamma)^a (1+\gamma)^b \left[P_n^{(a,b)}(\gamma) \right]^2 d\gamma = 1 \tag{B.12}$$

EL VALOR DE ESTA INTEGRAL RESULTA SER (3):

$$\int_{-1}^{1} (1-\gamma)^a (1+\gamma)^b \left[P_n^{(a,b)}(\gamma) \right]^2 d\gamma = \frac{2^{a+b+1}\,\Gamma(a+n+1)\,\Gamma(b+n+1)}{(a+b+2n+1)\,(n!)\,\Gamma(a+b+n+1)}$$

POR LO QUE, SUBSTITUYENDO ESTO EN LA EXPRESION (B.12) Y SABIENDO QUE

$$\left.\begin{array}{l} a = l_\eta + \frac{1}{2} \\ b = l_\xi + \frac{1}{2} \end{array}\right\} ;$$

OBTENEMOS FINALMENTE:

$$N_{k}^{l_\xi l_\eta} = \left[\frac{2n!\,(k+2)\,(l_\xi + l_\eta + n + 1)!}{\Gamma(l_\xi + n + \frac{3}{2})\,\Gamma(l_\eta + n + \frac{3}{2})} \right]^{1/2} \tag{B.13}$$

DONDE SE HA HECHO USO DE LA PROPIEDAD:

$$\Gamma(n+1) = n!$$

Y ADEMAS:

$$k = 2n + l_\xi + l_\eta$$

APENDICE 2.

EN ESTE APENDICE, MUCHOS DE LOS DESARROLLOS COPRESPONDIENTES AL CAPITULO 3, SE TRATAN CON DETALLE. EL APENDICE CONSTA DE LAS SIGUIENTES PARTES:

A. DESARROLLO DE ONDA PLANA TRIDIMENSIONAL.
B. DESARROLLO DE ONDA PLANA HEXADIMENSIONAL.
C. FUNCION GENERATRIZ PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS.
D. CALCULO DE LA INTEGRAL: $\int \exp(-\rho^2 - 2i\bar{p}_i\cdot\bar{\xi}_i - 2\bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_i + 2i\bar{p}_k\cdot\bar{\xi}_k - 2\bar{q}_k\cdot\bar{\eta}_k)\, d\xi_k\, d\eta_k$

E. OBTENCION DE LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION $\langle l_{\xi_i} l_{\eta_i} | l_{\xi_k} l_{\eta_k} \rangle_{KL}^{d_{ki}}$.
F. CALCULO DEL COEFICIENTE $\langle l_\xi l_\eta | 00 \rangle_{K0}^{\varphi_{ki}}$.
G. CALCULO DEL COEFICIENTE $\langle n_x n_y | 0 K \rangle_{l_x l_y}'$

COMO SE MENCIONO OPORTUNAMENTE, TODOS ESTOS CALCULOS SON UTILES PARA EL TEXTO PRINCIPAL DE LA TESIS, PERO NO SE INCLUYEN AHI CON EL FIN DE NO OSCURECER EL RAZONAMIENTO SEGUIDO; POR ESTA RAZON ESTE APENDICE ES EXTENSO.

A. DESARROLLO DE ONDA PLANA (TRES DIMENSIONES).

EN ESTA PARTE CONSIDERAREMOS PRIMERAMENTE ESTE DESARROLLO, YA QUE EL CAMINO SEGUIDO EN ESTE SERA EL QUE SE UTILICE EN LA OBTENCION DE LA EXPRESION PARA EL DESARROLLO DE ONDA PLANA EN SEIS DIMENSIONES.

SUPONGASE UNA ONDA PLANA TRIDIMENSIONAL, DE NUMERO DE ONDA k, MOVIENDOSE EN UNA DIRECCION DETERMINADA, POR EJEMPLO EL EJE Z POSITIVO. LA EXPRESION PARA TAL ONDA ES:

$$e^{ikr\cos\theta} \qquad 2(A.1)$$

DONDE θ ES EL ANGULO QUE FORMA EL VECTOR DE PROPAGACION CON EL EJE Z.

POR DEFINICION, LA FUNCION EXPONENCIAL ES :

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{n} \frac{i^n (kr)^n}{n!} (\cos\theta)^n \qquad 2(A.2)$$

PERO LA FUNCION $(\cos\theta)$ PUEDE EXPRESARSE EN TERMINOS DE LOS POLINOMIOS - DE LEGENDRE COMO SIGUE(10):

$$(\cos\theta)^n = \sum_{m} a_m P_m(\cos\theta) \qquad 2(A.3)$$

EN DONDE:

$$a_m = \frac{2m+1}{2} \int_0^{\pi} (\cos\theta)^n P_m(\cos\theta)\, d(\cos\theta) \qquad 2(A.4)$$

LO CUAL PUEDE VERSE FACILMENTE EMPLEANDO LA PROPIEDAD DE ORTOGONALIDAD PARA LOS POLINOMIOS DE LEGENDRE:

$$\int_0^{\pi} P_n(\cos\theta)\, P_m(\cos\theta)\, d(\cos\theta) = \frac{2}{2n+1}\, \delta_{m,n}$$

EL VALOR DE LA INTEGRAL EN 2(A.4) ES (10):

$$\int_{-1}^{1} \mu^n P_m(\mu)\, d\mu = \frac{n!\, \Gamma\left(\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}q + \frac{1}{2}\right)}{2^q\, (n-q)!\, \Gamma\left(\frac{1}{2}n + \frac{1}{2}q + \frac{3}{2}\right)} \qquad 2(A.5)$$

DONDE $\mu = \cos\theta$. ESTA INTEGRAL ES NO NULA SIEMPRE QUE SE CUMPLA LA CONDICION:

$$n - m = \text{par} \equiv 2s \qquad 2(A.6)$$

ENTONCES, EN TERMINOS DE 2(A.4) Y 2(A.5), EL DESARROLLO 2(A.3) QUEDA COMO SIGUE:

$$(\cos\theta)^n = \sum_{m} \frac{2m+1}{2} \cdot \frac{n!\, \Gamma\left(\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}m + \frac{1}{2}\right)}{2^m\, (n-m)!\, \Gamma\left(\frac{1}{2}n + \frac{1}{2}m + \frac{3}{2}\right)} \cdot P_m(\cos\theta) \qquad 2(A.7)$$

POR CONSIGUIENTE, USANDO ESTO ULTIMO EN LA EXPANSION 2(A.2), ESTA QUEDA:

$$e^{ikr\cos\theta} =$$
$$= \sum_n \sum_m \frac{2m+1}{2} \cdot \frac{n!\,\Gamma\left(\frac{1}{2}n-\frac{1}{2}m+\frac{1}{2}\right)}{2^m\,(n-m)!\,\Gamma\left(\frac{1}{2}n+\frac{1}{2}m+\frac{3}{2}\right)} \cdot \frac{i^n\,(kr)^n}{n!} \cdot P_m(\cos\theta)$$

2(A.8)

EMPLEANDO LA CONDICION 2(A.6), ESTA ULTIMA EXPRESION SE REDUCE A :

$$e^{ikr\cos\theta} =$$
$$= \sum_m \sum_s i^m\,(2m+1)\,(-1)^s\,(kr)^{2s+m} \cdot \frac{\Gamma\left(s+\frac{1}{2}\right)}{2^{m+1}\,(2s)!\,\Gamma\left(s+m+\frac{3}{2}\right)} \cdot P_m(\cos\theta)$$

2(A.9)

MEDIANTE LA "FORMULA DE DUPLICACION" PARA LA FUNCION GAMMA (10):

$$\Gamma\left(s+\tfrac{1}{2}\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(2s)}{2^{2s-1}\,\Gamma(s)},$$

2(A.10)

LA ECUACION 2(A.9) SE REDUCE, DESPUES DE SIMPLIFICACIONES DIRECTAS, A LO SIGUIENTE:

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_m i^m\,(2m+1)\,P_m(\cos\theta) \cdot \sum_s \frac{(-1)^s\,\left(\frac{kr}{2}\right)^{2s+m+\frac{1}{2}}}{s!\,\Gamma\left(s+m+\frac{3}{2}\right)} \cdot \left(\frac{\pi}{2kr}\right)^{1/2}$$

2(A.11)

AHORA BIEN, LA FUNCION BESSEL ESFERICA SE DEFINE COMO:

$$j_\ell(z) = \left(\frac{\pi}{2z}\right)^{1/2} \sum_h \frac{(-1)^h\,\left(\frac{z}{2}\right)^{2h+\ell+\frac{1}{2}}}{h!\,\Gamma\left(h+\ell+\frac{3}{2}\right)} = \left(\frac{\pi}{2z}\right)^{1/2} J_{\ell+\frac{1}{2}}(z)$$

2(A.12)

POR LO QUE ES FACIL VER QUE LA SEGUNDA SUMA EN 2(A.11) ES PRECISAMENTE LA FUNCION:

$$j_m(kr)$$

POR LO TANTO, LA EXPANSION DE ONDA PLANA TRIDIMENSIONAL QUEDA EXPRESADA COMO:

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{m} i^{m} (2m+1)\, j_m(kr)\, P_m(\cos\theta)$$

2(A.13)

ESTO ULTIMO LO PODEMOS ESCRIBIR DE UNA MANERA MAS FAMILIAR, GRACIAS AL TEOREMA DE ADICION DE LOS ARMONICOS ESFERICOS (2,3)

$$P_m(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2m+1} \sum_{q} Y_m^{q*}(\theta,\varphi)\, Y_m^{q}(\theta',\varphi')$$

2(A.14)

MEDIANTE ESTO, LA EXPANSION 2(A.13) QUEDA COMO:

$$e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} = 4\pi \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{q=-m}^{+m} i^{m}\, j_m(kr)\, Y_m^{q*}(\theta,\varphi)\, Y_m^{q}(\theta',\varphi')$$

2(A.15)

B. DESARROLLO DE ONDA PLANA (SEIS DIMENSIONES).

LA EXPRESION:

$$e^{i(\bar{k}_1\cdot\bar{\xi}+\bar{k}_2\cdot\bar{\eta})} = e^{i(k_1\xi\cos\theta+k_2\eta\cos\varphi)} = e^{i(k_1\xi\cos\theta)}\cdot e^{i(k_2\eta\cos\varphi)}$$

REPRESENTA A UNA ONDA PLANA EN SEIS DIMENSIONES Y COMO PUEDE VERSE, EQUIVALE AL PRODUCTO DE DOS ONDAS PLANAS TRIDIMENSIONALES CON NUMEROS DE ONDA k_1 Y k_2 RESPECTIVAMENTE.

AHORA ENCONTRAREMOS UNA EXPRESION PARA 2(B.1) EN TERMINOS DE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS. EN ESTA PARTE EMPLEAREMOS ALGUNOS RESULTADOS VISTOS EN LA PARTE A DE ESTE APENDICE.

EMPLEANDO LA DEFINICION DE LA FUNCION EXPONENCIAL 2(A.2),LA EXPRESION 2(B.1) SE ESCRIBE COMO:

$$e^{i(k_1\xi \operatorname{sen}\theta + k_2\eta\cos\varphi)} = \sum_{\epsilon} \frac{i^{\epsilon}(k_1\xi)^{\epsilon}}{\epsilon!}(\cos\theta)^{\epsilon} \cdot$$

$$\cdot \sum_{m} \frac{i^{m}(k_2\eta)^{m}}{m!}(\cos\varphi)^{m} = \sum_{\epsilon,m} \frac{i^{\epsilon+m}(k_1\xi)^{\epsilon}(k_2\eta)^{m}}{\epsilon!\,m!}(\cos\theta)^{\epsilon}(\cos\varphi)^{m}$$

2(B.2)

AHORA,EMPLEANDO EL DESARROLLO 2(A.3) PARA LA FUNCION COSENO,SE TIENE:

$$(\cos\theta)^{\epsilon} = \sum_{l_\xi} \frac{2l_\xi+1}{2} \cdot \frac{\epsilon!\,\Gamma\left(\frac{1}{2}\epsilon - \frac{1}{2}l_\xi + \frac{1}{2}\right)}{2^{l_\xi}(\epsilon-l_\xi)!\,\Gamma\left(\frac{1}{2}\epsilon+\frac{1}{2}l_\xi+\frac{3}{2}\right)} \cdot P_{l_\xi}(\cos\theta)$$

2(B.3)

$$(\cos\varphi)^{m} = \sum_{l_\eta} \frac{2l_\eta+1}{2} \cdot \frac{m!\,\Gamma\left(\frac{1}{2}m - \frac{1}{2}l_\eta + \frac{1}{2}\right)}{2^{l_\eta}(m-l_\eta)!\,\Gamma\left(\frac{1}{2}m+\frac{1}{2}l_\eta+\frac{3}{2}\right)} \cdot P_{l_\eta}(\cos\theta)$$

DONDE,POR LA CONDICION 2(A.6),SE CUMPLE QUE:

$$\epsilon - l_\xi = 2s \rightarrow \epsilon = l_\xi + 2s$$

$$m - l_\eta = 2\tau \rightarrow m = l_\eta + 2\tau \qquad 2(B.4)$$

EN TERMINOS DE TODO ESTO,LA EXPRESION 2(B.2) SE REDUCE A:

$$e^{i(k_1\xi\cos\theta + k_2\eta\cos\varphi)} = \sum_{s,\tau,l_\xi,l_\eta} i^{2s+2\tau+l_\xi+l_\eta}(k_1\xi)^{2s+l_\xi}(k_2\eta)^{2\tau+l_\eta} \cdot$$

$$\cdot P_{l_\xi}(\cos\theta)P_{l_\eta}(\cos\varphi) \cdot \left[\frac{(2l_\xi+1)(2l_\eta+1)}{2^{l_\xi+l_\eta+2}} \cdot \frac{\Gamma(s+\frac{1}{2})\,\Gamma(\tau+\frac{1}{2})}{(2s)!\,(2\tau)!\,\Gamma(s+l_\xi+\frac{3}{2})\Gamma(\tau+l_\eta+\frac{3}{2})}\right]$$

2(B.5)

AHORA BIEN, LOS VECTORES $(\bar{k}_1, \bar{k}_2)$ Y $(\bar{\xi}, \bar{\eta})$, TIENEN LA PROPIEDAD:

$$k_1^2 + k_2^2 = \varkappa^2$$

$$\xi^2 + \eta^2 = \rho^2$$

ENTONCES, ES POSIBLE ESCRIBIR:

$$\begin{aligned} \xi &= \rho \cos\alpha \qquad & k_1 &= \varkappa \cos\beta \\ \eta &= \rho \operatorname{sen}\alpha \qquad & k_2 &= \varkappa \operatorname{sen}\beta \end{aligned} \qquad 2(B.6)$$

ESTA ULTIMA EXPRESION CORRESPONDE PRECISAMENTE A LA DEFINICION DE LAS COORDENADAS HIPERESFERICAS (CAP. 1), SIENDO ρ LA LONGITUD DEL RADIO -- DE LA HIPERESFERA DETERMINADA POR

$$\xi^2 + \eta^2 = \rho^2 .$$

LO MISMO QUE $\varkappa$ PARA LOS VECTORES $\bar{k}_1$ Y $\bar{k}_2$. SEAN α Y β LOS ANGULOS QUE RELACIONAN LAS LONGITUDES ρ Y $\varkappa$ CON LOS VECTORES $(\bar{\xi}, \bar{\eta})$ Y $(\bar{k}_1, \bar{k}_2)$ RESPECTIVAMENTE.

EN TERMINOS DE LA EXPRESION 2(B.6), EL DESARROLLO 2(B.5) RESULTA SER:

$$e^{i(k_1 \xi \cos\theta + k_2 \eta \cos\varphi)} = \sum_{s,\tau,l_\xi,l_\eta} i^{2s+2\tau+l_\xi+l_\eta} (\cos\alpha)^{2s+l_\xi} (\operatorname{sen}\alpha)^{2\tau+l_\eta} (\cos\beta)^{2s+l_\xi} (\operatorname{sen}\beta)^{2\tau+l_\eta} \cdot$$

$$\cdot (\varkappa\rho)^{2s+2\tau+l_\xi+l_\eta} \cdot \left[\frac{(2l_\xi+1)(2l_\eta+1)\Gamma(s+\frac{1}{2})\Gamma(\tau+\frac{1}{2})}{2^{l_\xi+l_\eta+2}(2s)!(2\tau)!\Gamma(s+l_\xi+\frac{3}{2})\Gamma(\tau+l_\eta+\frac{3}{2})} \right] \cdot P_{l_\xi}(\cos\theta) P_{l_\eta}(\cos\varphi) \qquad 2(B.7)$$

COMO QUEREMOS EXPRESAR EL DESARROLLO ANTERIOR EN TERMINOS DE ARMONICOS HIPERESFERICOS, Y ESTOS DEPENDEN FUNCIONALMENTE DE LOS POLINOMIOS DE JACOBI $P_n^{(a,b)}(\gamma)$, ENTONCES, ES CONVENIENTE ESCRIBIR LA RELACION:

$$(\cos\alpha)^{2s} (\operatorname{sen}\alpha)^{2\tau} = \sum_n C_n P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha) \qquad 2(B.8)$$

PARA PODER ESCRIBIR EXPLICITAMENTE ESTE ULTIMO DESARROLLO, DEBEMOS ENCONTRAR EL VALOR DEL COEFICIENTE C_n ; LO CUAL SE HACE CON DETALLE A CONTINUACION.

MULTIPLIQUEMOS AMBOS MIEMBROS DE 2(B.8) POR:

$$P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha)\ (1-\cos 2\alpha)^a\,(1+\cos 2\alpha)^b\ d(\cos 2\alpha)\,,$$

E INTEGREMOS SOBRE EL INTERVALO DE DEFINICION DE LOS POLINOMIOS DE JACOBI $[0,\frac{\pi}{2}]$:

$$\int_0^{\pi/2}(\cos\alpha)^{2s}(\operatorname{sen}\alpha)^{2\tau}(1-\cos 2\alpha)^a(1+\cos 2\alpha)^b\,P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha)\ d(\cos 2\alpha)=$$

$$=\sum_n C_n\int_0^{\pi/2}\left[P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha)\right]^2(1-\cos 2\alpha)^a(1+\cos 2\alpha)^b\,d(\cos 2\alpha)$$

2(B.9)

HACIENDO EL CAMBIO DE VARIABLE:

$$\gamma=\cos 2\alpha\,,$$

Y UTILIZANDO LA PROPIEDAD DE NORMALIZACION PARA LOS POLINOMIOS DE JACOBI 1(B.12):

$$\int_{-1}^{1}\left[P_n^{(a,b)}(\gamma)\right]^2(1-\gamma)^a(1+\gamma)^b\,d\gamma=\frac{2^{a+b+1}\,\Gamma(a+n+1)\,\Gamma(b+n+1)}{(a+b+2n+1)\,(n!)\,\Gamma(a+b+n+1)}\,,$$

LA ECUACION 2(B.9) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$2^{-s-\tau}\int_{-1}^{1}(1+\gamma)^{s+b}\,(1-\gamma)^{\tau+a}\,P_n^{(a,b)}(\gamma)\,d\gamma=C_n\cdot\frac{2^{a+b+1}\,\Gamma(a+n+1)\,\Gamma(b+n+1)}{(a+b+2n+1)\,(n!)\,\Gamma(a+b+n+1)}$$

2(B.10)

ES NECESARIO, AHORA, CALCULAR LA INTEGRAL DEL PRIMER MIEMBRO DE ESTA ULTIMA EXPRESION, LO CUAL SE HACE EN SEGUIDA.

HACIENDO USO DE LA FUNCION GENERATRIZ (FORMULA DE RODRIGUEZ) PARA LOS POLINOMIOS DE JACOBI (3):

$$P_n^{(a,b)}(\gamma) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1+\gamma)^{-b}(1-\gamma)^{-a} \frac{d^n}{d\gamma^n}\left[(1+\gamma)^{b+n}(1-\gamma)^{a+n}\right], \qquad 2(B.11)$$

ENTONCES, LA INTEGRAL EN 2(B.10) SE REDUCE A:

$$\int_{-1}^{1} (1+\gamma)^{s+b}(1-\gamma)^{\tau+a} P_n^{(a,b)}(\gamma)\, d\gamma =$$

$$= \frac{(-1)^n}{2^n n!} \int_{-1}^{1} (1+\gamma)^s (1-\gamma)^\tau \frac{d^n}{d\gamma^n}\left\{(1+\gamma)^{b+n}(1-\gamma)^{a+n}\right\} d\gamma . \qquad 2(B.12)$$

INTEGREMOS POR PARTES ESTA ULTIMA EXPRESION TOMANDO

$$u = (1+\gamma)^s(1-\gamma)^\tau \quad ; \quad dv = \frac{d^n}{d\gamma^n}\left\{(1+\gamma)^{b+n}(1-\gamma)^{a+n}\right\}$$

DE DONDE INMEDIATAMENTE SE VE

$$du = (1+\gamma)^s(1-\gamma)^\tau\left[s(1+\gamma)^{-1} + \tau(1-\gamma)^{-1}\right]; \quad v = \frac{d^{n-1}}{d\gamma^{n-1}}\left\{(1+\gamma)^{b+n}(1-\gamma)^{a+n}\right\}$$

ENTONCES, APLICANDO N VECES LA REGLA DE INTEGRACION POR PARTES, LA INTEGRAL 2(B.12) QUEDA:

$$\int_{-1}^{1} (1+\gamma)^{s+b}(1-\gamma)^{\tau+a} P_n^{(a,b)}(\gamma)\, d\gamma =$$

$$= \frac{(-1)^{2n}}{2^n n!} \int_{-1}^{1} (1+\gamma)^{b+n}(1-\gamma)^{a+n} \frac{d^n}{d\gamma^n}\left\{(1+\gamma)^s(1-\gamma)^\tau\right\} d\gamma \qquad 2(B.13)$$

EMPLEANDO AHORA EL TEOREMA DE LEIBNITZ PARA LA DERIVACION DEL PRODUCTO DE FUNCIONES (3):

$$\frac{d^n}{d\gamma^n}(u\cdot w) = \sum_{r=0}^{n} \binom{n}{r} \frac{d^{n-r} u}{d\gamma^{n-r}} \cdot \frac{d^r w}{d\gamma^r} \qquad 2(B.14)$$

SE PUEDE DEMOSTRAR FACILMENTE QUE:

$$\frac{d^n}{d\gamma^n}\left\{(1+\gamma)^s(1-\gamma)^\tau\right\} = \sum_{r=0}^{n} \binom{n}{r} (-1)^r \frac{s!\,\tau!\,(1+\gamma)^{s-n+r}(1-\gamma)^{\tau-r}}{(s-n+r)!\,(\tau-r)!}$$

2(B.15)

CON $s \geq n-r$ Y $\tau \geq r$.

En terminos de este ultimo resultado, la integral 2(B.13) queda como sigue:

$$\int_{-1}^{1} (1+\gamma)^{s+b}(1-\gamma)^{\tau+a} P_n^{(a,b)}(\gamma)\, d\gamma =$$

$$= \frac{(-1)^{2n}}{2^n n!} \sum_{r=0}^{n} \binom{n}{r} (-1)^r \frac{s!\,\tau!}{(s-n+r)!\,(\tau-r)!} \int_{-1}^{1} (1+\gamma)^{s+r+b}(1-\gamma)^{\tau-r+a+n}\, d\gamma$$

2(B.16)

Ahora bien, la ultima integral que aparece en esta expresion, es la funcion Beta, que se define de la siguiente forma (11):

$$\int_{-1}^{1} (1+\gamma)^{J-1}(1-\gamma)^{H-1}\, d\gamma = 2^{J+H-1}\; B(J,H)$$

CON $$B(J,H) = \frac{\Gamma(J)\,\Gamma(H)}{\Gamma(J+H)} \quad ; \; (R_e\, J, H > 0)$$ 2(B.17)

De aqui que 2(B.16) queda como:

$$\int_{-1}^{1} (1+\gamma)^{s+b}(1-\gamma)^{\tau+a} P_n^{(a,b)}(\gamma)\, d\gamma =$$

$$= \frac{(-1)^{2n}}{2^n n!} \sum_{r=0}^{n} (-1)^r \binom{n}{r} \frac{s!\,\tau!}{(s-n+r)!\,(\tau-r)!} \cdot \frac{\Gamma(s+r+b+1)\,\Gamma(\tau-r+a+n+1)}{\Gamma(\tau+s+a+b+n+2)} \cdot 2^{\tau+s+a+b+n+1}$$

2(B.18)

SUBSTITUYENDO ESTO ULTIMO EN LA ECUACION 2(B.19), EL VALOR DE C_n PUEDE CONOCERSE EXPLICITAMENTE, SIENDO EL SIGUIENTE:

$$C_n = \sum_{r=0}^{n} \frac{n!\,(-1)^{2n+r}\,(a+b+2n+1)\,\Gamma(a+b+n+1)\,s!\,\tau!\,\Gamma(s+r+b+1)\,\Gamma(\tau-r+a+n+1)}{\Gamma(a+n+1)\,\Gamma(b+n+1)\,(n-r)!\,r!\,(s-n+r)!\,(\tau-r)!\,\Gamma(s+\tau+a+b+n+2)}$$

2(B.19)

POR LO TANTO EL DESARROLLO 2(B.8) PUEDE LLEVARSE A CABO CON C_n DADO POR 2(B.19). PODEMOS ENTONCES, PROSEGUIR CON EL DESARROLLO 2(B.7) PARA LA ONDA PLANA.

EN TERMINOS DE 2(B.8) Y 2(B.19), LA EXPRESION 2(B.7) QUEDA EXPLICITAMENTE COMO SIGUE:

$$e^{i(k_1 \xi \cos\theta + k_2 \eta \cos\varphi)} = \sum_{s,\tau,\ell_\xi,\ell_\eta} i^{2s+2\tau+\ell_\xi+\ell_\eta} (\cos\alpha)^{\ell_\xi} (\operatorname{sen}\alpha)^{\ell_\eta} (\cos\beta)^{\ell_\xi} (\operatorname{sen}\beta)^{\ell_\eta} (\varkappa\rho)^{2s+2\tau+\ell_\xi+\ell_\eta} \cdot$$

$$\cdot (\cos\beta)^{2s} (\operatorname{sen}\beta)^{2\tau} \cdot \frac{(2\ell_\xi+1)(2\ell_\eta+1)}{2^{\ell_\xi+\ell_\eta+2}} \cdot \frac{\Gamma(s+\frac{1}{2})\,\Gamma(\tau+\frac{1}{2})}{(2s)!\,(2\tau)!\,\Gamma(\ell_\xi+s+\frac{3}{2})\,\Gamma(\ell_\eta+\tau+\frac{3}{2})} \cdot$$

$$\cdot \sum_{n} \sum_{r=0}^{n} \frac{n!\,(-1)^{2n+r}\,(a+b+2n+1)\,\Gamma(a+b+n+1)\,s!\,\tau!\,\Gamma(s+r+b+1)\,\Gamma(\tau-r+a+n+1)}{\Gamma(a+n+1)\,\Gamma(b+n+1)\,(n-r)!\,r!\,(s-n+r)!\,(\tau-r)!\,\Gamma(s+\tau+a+b+n+2)}$$

$$\cdot P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha) \cdot P_{\ell_\xi}(\cos\theta) \cdot P_{\ell_\eta}(\cos\varphi) \qquad 2(B.20)$$

APLICANDO LA "FORMULA DE DUPLICACION" (APENDICE 2, PTE. A) :

$$\Gamma(s+\tfrac{1}{2}) = \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\,\Gamma(2s)}{2^{2s-1}\,\Gamma(s)},$$

Y ALGUNAS PROPIEDADES TRIGONOMETRICAS DIRECTAS, DESPUES DE SIMPLIFICAR,

LA ECUACION 2(B.20) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$e^{i(k_1\xi\cos\theta + k_2\eta\cos\varphi)} =$$

$$= \sum_{s,\tau,l_\xi,l_\eta} i^{2s+2\tau+l_\xi+l_\eta} (\cos\alpha)^{l_\xi} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta} (\cos\beta)^{l_\xi} (\operatorname{sen}\beta)^{l_\eta} (\kappa\rho)^{2s+2\tau+l_\xi+l_\eta} \cdot$$

$$\cdot \frac{(2l_\xi+1)(2l_\eta+1)}{2^{l_\xi+l_\eta+2}} \cdot \frac{\pi}{2^{2s+2\tau}\,\Gamma(l_\xi+s+\frac{3}{2})\,\Gamma(l_\eta+\tau+\frac{3}{2})} \cdot$$

$$\cdot \sum_n \sum_{r=0}^{n} \frac{n!\,(-1)^{2n+r}\,(a+b+2n+1)\,\Gamma(a+b+n+1)\,\Gamma(s+r+b+1)\,\Gamma(\tau-r+a+n+1)}{\Gamma(a+n+1)\,\Gamma(b+n+1)\,(n-r)!\,r!\,(s-n+r)!\,(\tau-r)!\,\Gamma(s+\tau+a+b+n+2)} \cdot$$

$$\cdot \left(\frac{1-\cos 2\beta}{2}\right)^{\tau} \left(\frac{1+\cos 2\beta}{2}\right)^{s} \cdot P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha) \cdot P_{l_\xi}(\cos\theta) \cdot P_{l_\eta}(\cos\varphi) \qquad 2(B.21)$$

SI AHORA HACEMOS EL CAMBIO DE INDICES:

$$\tau - r \equiv p \qquad 2(B.22)$$

$$s - n + r \equiv m$$

ENTONCES, POR ESTO ULTIMO:

$$(\tau = r + p \quad ; \quad s = n - r + m) \rightarrow s + \tau = n + h \qquad 2(B.23)$$

CON

$$h \equiv m + p$$

EN TERMINOS DE LOS NUEVOS INDICES, LA ECUACION 2(B.21) QUEDA DE LA SI-- GUIENTE FORMA:

$$e^{i(k_3 s\cos\theta + k_4\eta\cos\varphi)} =$$

$$= \sum_{n,h,l_3,l_4} i^{2n+2h+l_3+l_4}\,(\cos\alpha)^{l_3}(\operatorname{sen}\alpha)^{l_4}(\cos\beta)^{l_3}(\operatorname{sen}\beta)^{l_4}\,(\chi\rho)^{2n+2h+l_3+l_4}\,\cdot$$

$$\cdot\ \frac{(2l_3+1)(2l_4+1)}{2^{2n+2h+l_3+l_4+2}}\cdot(\pi)\cdot\sum_{m,p}\frac{n!\,(-1)^{2n+2r}(a+b+2n+1)\,\Gamma(a+b+n+1)\,\Gamma(n+b+m+1)}{\Gamma(a+n+1)\,\Gamma(b+n+1)\,m!\,p!\,\Gamma(2n+m+p+a+b+2)}\,\cdot$$

$$\cdot\ \frac{\Gamma(n+a+p+1)}{\Gamma(n+l_3+m+\frac{3}{2})\,\Gamma(n+l_4+p+\frac{3}{2})}\cdot\left(\frac{1-\cos2\beta}{2}\right)^{p}\left(\frac{1+\cos2\beta}{2}\right)^{m}\cdot$$

$$\cdot\ \left\{\frac{1}{2^n}\sum_{r=0}^{n}\binom{n+l_4+p+\frac{1}{2}}{n-r}\binom{n+l_3+m+\frac{1}{2}}{r}(\cos2\beta-1)^{r}(\cos2\beta+1)^{n-r}\right\}\cdot$$

$$\cdot\ P_n^{(a,b)}(\cos2\alpha)\cdot P_{l_3}(\cos\theta)\cdot P_{l_4}(\cos\varphi)$$

2(P.24)

DONDE LA SIGUIENTE SUBSTITUCION SE HA HECHO:

$$\frac{1}{(n-r)!\,r!\,\Gamma(l_3+n-r+m+\frac{3}{2})\,\Gamma(l_4+p+r+\frac{3}{2})} = \frac{\binom{n+l_3+m+\frac{1}{2}}{r}\binom{n+l_4+p+\frac{1}{2}}{n-r}}{\Gamma(n+l_3+m+\frac{3}{2})\,\Gamma(n+l_4+p+\frac{3}{2})}$$

DEBIDO A LA PROPIEDAD DE LA FUNCION GAMMA:

$$\binom{w}{z} = \frac{\Gamma(w+1)}{\Gamma(z+1)\,\Gamma(w-z+1)}$$

AHORA BIEN, UNA EXPRESION EXPLICITA PARA LOS POLINOMIOS DE JACOBI ES LA SIGUIENTE (3):

$$P_n^{(a,b)}(\gamma) = \frac{1}{2^n}\sum_{m=0}^{n}\binom{n+a}{m}\binom{n+b}{n-m}(\gamma-1)^{n-m}(\gamma+1)^{m}$$

2(P.25)

POR LO QUE, SE CONCLUYE QUE EL TERMINO DENTRO DEL PARENTESIS ANGULAR EN LA ECUACION 2(B.24) ES EL POLINOMIO DE JACOBI:

$$P_n^{(l_4+p+\frac{1}{2},\, l_3+m+\frac{1}{2})}(\cos 2\beta) = P_n^{(a+p,\, b+m)}(\cos 2\beta) \qquad 2(B.26)$$

DONDE SE SABE QUE:

$$\left.\begin{aligned} a &= l_4+\tfrac{1}{2} \\ b &= l_3+\tfrac{1}{2} \end{aligned}\right\} \qquad 2(B.27)$$

MEDIANTE 2(B.26) Y FIJANDO NUESTRA ATENCION AHORA EN LA SUMA SOBRE m Y p EN 2(B.24), DE ACUERDO A LA RELACION 2(B.27) ALGUNOS TERMINOS SE CANCELAN, REDUCIENDOSE LA ECUACION 2(B.24) A:

$$e^{i(k_{13}\cos\theta + k_{24}\cos\varphi)} =$$

$$= \sum_{n,h,l_3,l_4} i^{2n+2h+l_3+l_4} (\cos\alpha)^{l_3} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_4} (\cos\beta)^{l_3} (\operatorname{sen}\beta)^{l_4} (\mathcal{X}\rho)^{2n+2h+l_3+l_4} \cdot$$

$$\cdot \frac{(2l_3+1)(2l_4+1)}{2^{2n+2h+l_3+l_4+2}} (\pi) \cdot \frac{n!\,(a+b+2n+1)\,\Gamma(a+b+n+1)}{\Gamma(a+n+1)\,\Gamma(b+n+1)} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \sum_{m,p} \frac{\left(\frac{1-\cos 2\beta}{2}\right)^p \left(\frac{1+\cos 2\beta}{2}\right)^m}{p!\,m!\,\Gamma(2n+m+p+a+b+2)} \cdot P_n^{(a+p,\, b+m)}(\cos 2\beta) \right\} \cdot P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha) \cdot P_{l_3}(\cos\theta) \cdot$$

$$\cdot P_{l_4}(\cos\varphi)$$

2(B.28)

AHORA BIEN, DEBIDO A 2(B.23):

$$h = m+p,$$

ENTONCES, EL TERMINO DENTRO DEL PARENTESIS ANGULAR EN 2(B.28) SE PUEDE ESCRIBIR COMO SIGUE:

$$\sum_{m,p} \frac{\left(\frac{1-\cos 2\beta}{2}\right)^p \left(\frac{1+\cos 2\beta}{2}\right)^m}{p!\,m!\,\Gamma(2n+m+p+a+b+2)} P_n^{(a+p,\, b+m)}(\cos 2\beta) =$$

$$= \sum_h \frac{1}{h!\,\Gamma(2n+h+a+b+2)} \cdot \sum_{m=0}^{h} \binom{h}{m} \left(\frac{1-\cos 2\beta}{2}\right)^{h-m} \left(\frac{1+\cos 2\beta}{2}\right)^m \cdot P_n^{(a+h-m,\, b+m)}(\cos 2\beta)$$

2(B.29)

PERO DE ESTA ULTIMA RELACION SE CUMPLE QUE (3):

$$\sum_{m=0}^{h} \binom{h}{m} \left(\frac{1-\cos 2\beta}{2}\right)^{h-m} \left(\frac{1+\cos 2\beta}{2}\right)^{m} P_n^{(a+n-m,b+m)}(\cos 2\beta) = P_n^{(a,b)}(\cos 2\beta)$$

2(B.30)

Y ADEMAS LA CANTIDAD:

$$\frac{n!\,(a+b+2n+1)\,\Gamma(a+b+n+1)}{\Gamma(a+n+1)\,\Gamma(b+n+1)} \equiv \frac{\left(N_K^{l_3 l_4}\right)^2}{2}$$

CORRESPONDE AL VALOR DE LA CONSTANTE DE NORMALIZACION DE LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS (VER APENDICE 1),POR LO QUE LA LLAMAREMOS $\left(N_K^{l_3 l_4}\right)$.

SUBSTITUYAMOS ENTONCES LAS EXPRESIONES 2(B.30,29 Y 28) EN LA ECUACION 2(B27),OBTENIENDO:

$$e^{i(k_1 \xi \cos\theta + k_2 \eta \cos\varphi)} = e^{i(\bar{k}_1\cdot\bar{\xi} + \bar{k}_2\cdot\bar{\eta})} =$$

$$= \sum_{n,h,l_3,l_4} i^{2n+l_3+l_4} \cdot i^{2h} (\cos\alpha)^{l_3} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_4} (\cos\beta)^{l_3} (\operatorname{sen}\beta)^{l_4} (\chi\rho)^{2n+2h+l_3+l_4} \cdot$$

$$\cdot \frac{(2l_3+1)(2l_4+1)}{2^{2n+2h+l_3+l_4+2}} \cdot (\pi) \cdot \frac{\left(N_K^{l_3 l_4}\right)^2}{2} \cdot P_n^{(a,b)}(\cos 2\beta) \cdot P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha) \cdot P_{l_3}(\cos\theta) \cdot$$

$$\cdot P_{l_4}(\cos\varphi) \cdot \frac{1}{h!\,\Gamma(2n+h+a+b+2)}$$

2(B.31)

AHORA,USANDO LA RELACION:

$$K \equiv 2n + l_3 + l_4 ,$$

Y AGRUPANDO TERMINOS,SE PUEDE VER FACILMENTE QUE LA ECUACION 2(B.31) - PUEDE ESCRIBIRSE COMO:

$$e^{i(\bar{k}_1\cdot\bar{\xi}+\bar{k}_2\cdot\bar{\eta})} =$$

$$= \frac{\pi}{2}\sum_{k,l_\xi,l_\eta} i^k (\cos\alpha)^{l_\xi}(\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta}(\cos\beta)^{l_\xi}(\operatorname{sen}\beta)^{l_\eta}\; P_n^{(a,b)}(\cos 2\beta)\; P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha).$$

$$\cdot (2l_\xi+1)(2l_\eta+1)\, P_{l_\eta}(\cos\varphi)\, P_{l_\xi}(\cos\theta) \left(N_k^{l_\xi l_\eta}\right)^2 .$$

$$\cdot \frac{1}{(\varkappa\rho)^2}\cdot\sum_h \frac{(-1)^h \left(\frac{\varkappa\rho}{2}\right)^{2h+k+2}}{h!\,\Gamma(k+h+3)} .$$

2(B.32)

LA ULTIMA SUMA DE ESTA EXPRESION ES LA FUNCION BESSEL,POR DEFINICION:

$$\sum_h \frac{(-1)^h \left(\frac{\varkappa\rho}{2}\right)^{2h+k+2}}{h!\,\Gamma(k+h+3)} = J_{k+2}(\varkappa\rho)$$

2(B.33)

EMPLEANDO ESTO ULTIMO,ASI COMO EL TEOREMA DE ADICION PARA LOS ARMONICOS ESFERICOS 2(A.14):

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_m Y_l^{m*}(\hat{k})\, Y_l^{m}(\hat{r}) ,$$

LA ECUACION 2(B.32) RESULTA SER LO SIGUIENTE:

$$e^{i(\bar{k}_1\cdot\bar{\xi}+\bar{k}_2\cdot\bar{\eta})} =$$

$$= \sum_{\substack{k,l_\xi,l_\eta\\ m_\xi,m_\eta}} \frac{(2\pi)^2}{(\varkappa\rho)^2}\cdot\left\{ N_k^{l_\xi l_\eta}(\cos\alpha)^{l_\xi}(\operatorname{sen}\alpha)^{l_\eta} P_n^{(a,b)}(\cos 2\alpha)\, Y_{l_\xi}^{m_\xi *}(\hat{k}_1)\, Y_{l_\eta}^{m_\eta *}(\hat{k}_2)\right\}$$

$$\cdot\left\{ N_k^{l_\xi l_\eta}(\cos\beta)^{l_\xi}(\operatorname{sen}\beta)^{l_\eta} P_n^{(a,b)}(\cos 2\beta)\, Y_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{\xi})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{\eta})\right\}\cdot J_{k+2}(\varkappa\rho)$$

2(B.34)

PERO, PRECISAMENTE LAS CANTIDADES QUE APARECEN DENTRO DE LOS PARENTESIS SON LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS (VER CAP. 1); POR LO QUE FINALMENTE, LA EXPANSION DE ONDA PLANA HEXADIMENSIONAL, EN TERMINOS DE ARMONICOS HIPERESFERICOS ES:

$$e^{i(\bar{k}_1\cdot\bar{\xi}+\bar{k}_2\cdot\bar{\eta})} =$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{(\varkappa\rho)^2} \sum_{\substack{K,l_\xi,l_\eta \\ m_\xi,m_\eta}} i^K\, W_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta *}(\Omega_k)\, W_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega_i)\, J_{K+2}(\varkappa\rho) \qquad 2(B.35)$$

C. FUNCION GENERATRIZ PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS.

EN ESTA PARTE OBTENDREMOS UNA FUNCION GENERATRIZ PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS A PARTIR DEL DESARROLLO DE ONDA PLANA HEXADIMENSIONAL QUE SE OBTUVO EN LA PARTE B DE ESTE APENDICE Ec. 2(B.35):

$$e^{i(\bar{k}_1\cdot\bar{\xi}+\bar{k}_2\cdot\bar{\eta})} = \frac{(2\pi)^3}{(\varkappa\rho)^2} \sum_{\substack{K,l_\xi,l_\eta \\ m_\xi,m_\eta}} i^K\, W_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta *}(\Omega_k)\, W_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega_i)\, J_{K+2}(\varkappa\rho)$$

SI HACEMOS EL CAMBIO (+):

$$\bar{k}_1 = 2\bar{p} \;\; ; \;\; \bar{k}_2 = 2i\bar{q} \, ,$$

Y SUBSTITUIMOS EN LA ECUACION 2(B.35) JUNTO CON LA EXPRESION EXPLICITA PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS $W_K^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega)$, ENTONCES:

(+) Este cambio tiene el objeto de permitir encontrar el límite deseado asegurando la convergencia para las funciones Bessel y los polinomios de Jacobi.

$$e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})} =$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{4(p^2-q^2)\,p^2}\sum_{\substack{k,l_\xi,l_\eta\\ m_\xi,m_\eta}} i^k N_k^{l_\xi l_\eta}\left(\frac{\varkappa\cos\beta}{\varkappa}\right)^{l_\xi}\left(\frac{\varkappa\operatorname{sen}\beta}{\varkappa}\right)^{l_\eta} P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\,l_\xi+\frac{1}{2})}\left(\frac{\varkappa^2\cos^2\beta-\varkappa^2\operatorname{sen}^2\beta}{\varkappa^2}\right)$$

$$\cdot\ Y_{l_\xi}^{m_\xi *}(\hat{k}_1)\, Y_{l_\eta}^{m_\eta *}(\hat{k}_2)\, W_k^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega_i)\ J_{k+2}\left(2p\sqrt{p^2-q^2}\right)$$

2(C.1)

RECORDANDO QUE EC, 2(B.6):

$$\left.\begin{aligned}|\bar{k}_1| &= \varkappa\cos\beta\\ |\bar{k}_2| &= \varkappa\operatorname{sen}\beta\end{aligned}\right\},$$

Y EMPLEANDO LA IGUALDAD:

$$\bar{k}_1 = 2\bar{p}\quad ;\ \bar{k}_2 = 2i\bar{q}\ ,$$

DEPUES DE ALGUNAS SIMPLIFICACIONES DIRECTAS SE OBTIENE PARA 2(C.1):

$$e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})} =$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{4(p^2-q^2)\,p^2}\sum_{\substack{k,l_\xi,l_\eta\\ m_\xi,m_\eta}} i^{k+l_\eta} N_k^{l_\xi l_\eta}\cdot\frac{p^{l_\xi}\cdot q^{l_\eta}}{(p^2-q^2)^{\frac{1}{2}(l_\xi+l_\eta)}}\cdot P_n^{(l_\eta+\frac{1}{2},\,l_\xi+\frac{1}{2})}\left(\frac{p^2+q^2}{p^2-q^2}\right)\cdot$$

$$\cdot\ Y_{l_\xi}^{m_\xi *}(\hat{p})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta *}(\hat{q})\, W_k^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega_i)\ J_{k+2}\left(2p\sqrt{p^2-q^2}\right)$$

2(C.2)

CONSIDEREMOS EL COMPORTAMIENTO DE ESTA ULTIMA EXPRESION EN EL LIMITE:

$$p\to q\to s\ .$$

PARA ESTO, EXPRESEMOS EXPLICITAMENTE LA FUNCION BESSEL DE ACUERDO A LA

ECUACION 2(B.33), QUE PARA ESTE CASO TIENE LA FORMA:

$$J_{k+2}\left(2\rho\sqrt{p^2-q^2}\right) = \sum_h \frac{(-1)^h \rho^{2h+k+2}\left(\sqrt{p^2-q^2}\right)^{2h+k+2}}{h!\,\Gamma(h+k+3)} \qquad 2(C.3)$$

HACIENDO USO DE LA EXPRESION:

$$k = 2n + l_3 + l_4 ,$$

ENTONCES 2(C.3) SE REDUCE FINALMENTE A:

$$J_{k+2}\left(2\rho\sqrt{p^2-q^2}\right) = \rho^{2n+l_3+l_4+2}\,(p^2-q^2)^{n+1}\,(p^2-q^2)^{\frac{1}{2}(l_3+l_4)} \cdot$$

$$\cdot \sum_h \frac{(-1)^h (\rho)^{2h} (p^2-q^2)^h}{h!\,\Gamma(h+2n+l_3+l_4+3)} . \qquad 2(C.4)$$

AHORA, EMPLEANDO LA RELACION EXPLICITA PARA LOS POLINOMIOS DE JACOBI(3)

$$P_n^{(a,b)}(\gamma) = \sum_{m=0}^{n} \binom{n+a}{m}\binom{n+b}{n-m} (\gamma-1)^{n-m} (\gamma+1)^m . \qquad 2(C.5)$$

SUBSTITUYENDO 2(C.4) Y 2(C.5) EN 2(C.2) Y DESPUES DE SIMPLIFICAR SE TIENE:

$$e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi} - 2\bar{q}\cdot\bar{\eta})} =$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{4} \sum_{\substack{k,l_3,l_4\\ m_3,m_4}} i^{k+l_4} N_k^{l_3 l_4}\, p^{l_3} q^{l_4} \cdot \sum_{m=0}^{n} \binom{n+l_4+\frac{1}{2}}{m}\binom{n+l_3+\frac{1}{2}}{n-m} \cdot$$

$$\cdot\, q^{2(n-m)} p^{2m} \rho^k \cdot \sum_h \frac{(-1)^h (\rho)^{2h} (p^2-q^2)^h}{h!\,\Gamma(h+2n+l_3+l_4+3)} \cdot Y_{l_3}^{m_3 *}(\hat{p}) \cdot$$

$$\cdot\, Y_{l_4}^{m_4 *}(\hat{q})\, W_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}(\Omega_i) \qquad 2(C.6)$$

AHORA SE PUEDE VER FACILMENTE QUE EN EL LIMITE

$$p \to q \to s,$$

LA EXPRESION 2(C.6) SE REDUCE A:

$$e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})} =$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{4} \sum_{\substack{k,l_\xi,l_\eta \\ m_\xi,m_\eta}} i^{k+l_\eta} N_k^{l_\xi l_\eta} (\rho s)^k Y_{l_\xi}^{m_\xi *}(\hat{p}) Y_{l_\eta}^{m_\eta *}(\hat{q}) \cdot$$

$$\cdot W_k^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega_i) \cdot \frac{1}{\Gamma(2n+l_\xi+l_\eta+3)} \cdot \sum_{m=0}^{n} \binom{n+l_\eta+\frac{1}{2}}{m}\binom{n+l_\xi+\frac{1}{2}}{n-m}$$

2(C.7)

LA ULTIMA SUMA TIENE EL VALOR (3):

$$\sum_{m=0}^{n} \binom{n+l_\eta+\frac{1}{2}}{m}\binom{n+l_\xi+\frac{1}{2}}{n-m} = \binom{2n+l_\xi+l_\eta+1}{n} = \binom{k+1}{n}$$

2(C.8)

FINALMENTE, SUBSTITUYENDO LA EXPRESION EXPLICITA PARA EL COEFICIENTE $N_k^{l_\xi l_\eta}$ (VER EC.1.46, CAP.1) Y LA EC.2(C.8) EN LA ECUACION 2(C.7), SE OBTIENE, DESPUES DE ALGUNAS SIMPLIFICACIONES LO QUE SIGUE:

$$e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})} = \sum_{\substack{k,l_\xi,l_\eta \\ m_\xi,m_\eta}} A_k^{l_\xi l_\eta} W_k^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega_i) Y_{l_\xi}^{m_\xi *}(\hat{p}) Y_{l_\eta}^{m_\eta *}(\hat{q}) (\rho s)^k$$

2(C.9)

DONDE:

$$A_k^{l_\xi l_\eta} = (i)^{k+l_\eta} \left[\frac{8\pi^6}{n!\,\Gamma(n+l_\xi+\frac{3}{2})\,\Gamma(n+l_\eta+\frac{3}{2})\,\Gamma(n+l_\xi+l_\eta+2)\,(k+2)} \right]^{1/2}$$

2(C.10)

De la expresion 2(C.9) para la expansion de onda plana, obtenemos la funcion generatriz para los armonicos hiperesfericos como sigue.

Multipliquemos ambos miembros de 2(C.9) por

$$\bar{Y}_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{p})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{q})\, d\hat{p}\, d\hat{q},$$

e integremos, es decir:

$$\int e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})}\, \bar{Y}_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{p})\, \bar{Y}_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{q})\, d\hat{p}\, d\hat{q} =$$

$$= \sum_{\substack{k,l_\xi,l_\eta\\ m_\xi,m_\eta}} (\rho s)^k A_k^{l_\xi l_\eta} W_k^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega_i) \int \bar{Y}_{l_\xi}^{m_\xi *}(\hat{p})\, Y_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{p})\, \bar{Y}_{l_\eta}^{m_\eta *}(\hat{q})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{q})\, d\hat{p}\, d\hat{q} \qquad 2(C.11)$$

Aprovechando la propiedad de ortonormalidad de los armonicos esfericos, esta ultima expresion se reduce a:

$$\int e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})}\, \bar{Y}_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{p})\, \bar{Y}_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{q})\, d\hat{p}\, d\hat{q} = \sum_{k} (\rho s)^k A_k^{l_\xi l_\eta} W_k^{l_\xi l_\eta m_\xi m_\eta}(\Omega_i) \qquad 2(C.12)$$

Notese que en esta ultima ecuacion la suma sobre m_ξ y m_η ha desaparecido debido a la integracion sobre los armonicos esfericos.

Si ahora desarrollamos en series de Taylor el primer miembro de 2(C.12) en potencias de s alrededor del punto $s=0$, tenemos:

$$\int e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})}\, \bar{Y}_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{p})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{q})\, d\hat{p}\, d\hat{q} =$$

$$= \sum_{k} \frac{s^k}{k!} \frac{\partial^k}{\partial s^k}\left[\int e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})}\, \bar{Y}_{l_\xi}^{m_\xi}(\hat{p})\, Y_{l_\eta}^{m_\eta}(\hat{q})\, d\hat{p}\, d\hat{q}\right]_{s=0} \qquad 2(C.13)$$

IGUALANDO ESTO ULTIMO AL MIEMBRO DERECHO DE LA ECUACION 2(C.12) SE OBTIENE:

$$\sum_k \frac{s^k}{k!} \frac{\partial^k}{\partial s^k}\left[\int e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})} Y_{l_3}^{m_3}(\hat{p})\, Y_{l_4}^{m_4}(\hat{q})\, d\hat{p}\, d\hat{q}\right]_{s=0}$$

$$= \sum_k \rho^k s^k A_k^{l_3 l_4}\, \mathcal{W}_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}(\Omega_i)$$

2(C.14)

PARA QUE LA IGUALDAD SE MANTENGA ES NECESARIO QUE LOS COEFICIENTES DE LAS RESPECTIVAS POTENCIAS DE S SEAN IGUALES, ES DECIR:

$$\rho^k A_k^{l_3 l_4}\, \mathcal{W}_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}(\Omega_i) = \frac{1}{k!} \frac{\partial^k}{\partial s^k}\left[\int e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})} Y_{l_3}^{m_3}(\hat{p})\, Y_{l_4}^{m_4}(\hat{q})\cdot \right.$$

$$\left. \cdot\, d\hat{p}\, d\hat{q}\right]_{s=0} \qquad 2(C.15)$$

DE AQUI QUE LA FUNCION GENERATRIZ PARA LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS ES LA SIGUIENTE:

$$\rho^k \mathcal{W}_k^{l_3 l_4 m_3 m_4}(\Omega_i) = \left(A_k^{l_3 l_4}\right)^{-1} \cdot \frac{1}{k!} \cdot$$

$$\cdot \frac{\partial^k}{\partial s^k}\left[\int e^{(2i\bar{p}\cdot\bar{\xi}-2\bar{q}\cdot\bar{\eta})} Y_{l_3}^{m_3}(\hat{p})\, Y_{l_4}^{m_4}(\hat{q})\, d\hat{p}\, d\hat{q}\right]_{s=0} \qquad 2(C.16)$$

D. CALCULO DE LA INTEGRAL (3.54):

$$I = \int \exp(-\rho^2 - 2i\bar{p}_i\cdot\bar{\xi}_i - 2\bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_i + 2i\bar{p}_k\cdot\bar{\xi}_k - 2\bar{q}_k\cdot\bar{\eta}_k)\, d\bar{\xi}_k\, d\bar{\eta}_k \qquad 2(D.1)$$

PARA LA OBTENCION DE LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION DE REVAI-RAYNAL, EN EL CAPITULO 3, ES NECESARIO CALCULAR EL VALOR EXPLICITO DE LA

INTEGRAL (3.54) ARRIBA MENCIONADA. EN ESTA PARTE CALCULAREMOS EXPLICITAMENTE DICHA INTEGRAL ESENCIALMENTE HACIENDO USO DE LA TRANSFORMACION ENTRE DISTINTOS CONJUNTOS DE COORDENADAS DE JACOBI:

$$\begin{pmatrix} \bar{\xi}_k \\ \bar{\eta}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos\varphi_{ki} & \operatorname{sen}\varphi_{ki} \\ -\operatorname{sen}\varphi_{ki} & -\cos\varphi_{ki} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\xi}_i \\ \bar{\eta}_i \end{pmatrix} \qquad 2(D.2)$$

POR MEDIO DE LO ANTRIOR, PODEMOS ENCONTRAR FACILMENTE LAS SIGUIENTES RELACIONES:

$$\bar{p}_i\cdot\bar{\xi}_i = -\bar{p}_i\cdot\bar{\xi}_k\cos\varphi_{ki} - \bar{p}_i\cdot\bar{\eta}_k\operatorname{sen}\varphi_{ki}$$

$$\bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_i = \bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_k\operatorname{sen}\varphi_{ki} - \bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_k\cos\varphi_{ki} \qquad 2(D.3)$$

ADEMAS (CAP.1):

$$\xi_i^2+\eta_i^2 = \xi_k^2+\eta_k^2 = \rho^2 \qquad 2(D.4)$$

EN TERMINOS DE ESTAS ULTIMAS RELACIONES, LA INTEGRAL 2(D.1) TIENE LA FORMA:

$$I = \int \exp\left(-\xi_k^2-\eta_k^2+2i\bar{p}_i\cdot\bar{\xi}_k\cos\varphi_{ki}+2i\bar{p}_i\cdot\bar{\eta}_k\operatorname{sen}\varphi_{ki}-2\bar{q}_i\cdot\bar{\xi}_k\operatorname{sen}\varphi_{ki}+\right.$$
$$\left.+2\bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_k\cos\varphi_{ki}+2i\bar{p}_k\cdot\bar{\xi}_k-2\bar{q}_k\cdot\bar{\eta}_k\right)d\bar{\xi}_k\,d\bar{\eta}_k \qquad 2(D.5)$$

ESTO SE PUEDE ESCRIBIR COMO EL SIGUIENTE PRODUCTO:

$$I = \int \exp\left(-\xi_k^2+2i\bar{p}_i\cdot\bar{\xi}_k\cos\varphi_{ki}-2\bar{q}_i\cdot\bar{\xi}_k\operatorname{sen}\varphi_{ki}+2i\bar{p}_k\cdot\bar{\xi}_k\right)d\bar{\xi}_k\;\cdot$$

$$\cdot\int \exp\left(-\eta_k^2+2i\bar{p}_i\cdot\bar{\eta}_k\operatorname{sen}\varphi_{ki}+2\bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_k\cos\varphi_{ki}-2\bar{q}_k\cdot\bar{\eta}_k\right)d\bar{\eta}_k \qquad 2(D.6)$$

COMPLETANDO CUADRADOS DENTRO DE CADA PARENTESIS EN ESTA ULTIMA EXPRESION, OBTENEMOS LO SIGUIENTE:

$$I = \left(\int \exp\left\{-\left[\bar{\xi}_k-(i\bar{p}_i\cos\varphi_{ki}-\bar{q}_i\operatorname{sen}\varphi_{ki}+i\bar{p}_k)\right]^2\right\}d\bar{\xi}_k\right)\cdot\exp\left(i\bar{p}_i\cos\varphi_{ki}-\bar{q}_i\operatorname{sen}\varphi_{ki}+i\bar{p}_k\right)^2$$

$$\cdot\left(\int \exp\left\{-\left[\bar{\eta}_k-(i\bar{p}_i\operatorname{sen}\varphi_{ki}+\bar{q}_i\cos\varphi_{ki}-\bar{q}_k)\right]^2\right\}d\bar{\eta}_k\right)\cdot\exp\left(i\bar{p}_i\operatorname{sen}\varphi_{ki}+\bar{q}_i\cos\varphi_{ki}-\bar{q}_k\right)^2 \qquad 2(D.7)$$

ESTAS INTEGRALES TIENEN LA FORMA (3):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\bar{r}-\bar{a})^2} d\bar{r} = (\pi)^{3/2} \qquad 2(D.8)$$

POR LO TANTO, LA INTEGRAL 2(D.7) SE REDUCE A:

$$I = (\pi)^3 \exp\left(-p_i^2 + q_i^2 - p_k^2 + q_k^2 - 2\bar{p}_i \cdot \bar{p}_k \cos\alpha_{ki} - 2i\bar{p}_k \cdot \bar{q}_i \operatorname{sen}\alpha_{ki} - \right.$$
$$\left. - 2i\bar{p}_i \cdot \bar{q}_k \operatorname{sen}\alpha_{ki} - 2\bar{q}_k \cdot \bar{q}_i \cos\alpha_{ki}\right) \qquad 2(D.9)$$

EN EL LIMITE:

$$p_j \rightarrow q_j \,(\rightarrow s_j),$$

OBTENEMOS FINALMENTE EL VALOR DESEADO PARA 2(D.1):

$$\int \exp\left(-p^2 - 2i\bar{p}_i \cdot \bar{\xi}_i - 2\bar{q}_i \cdot \bar{\eta}_i + 2i\bar{p}_k \cdot \bar{\xi}_k - 2\bar{q}_k \cdot \bar{\eta}_k\right) d\bar{\xi}_k \cdot d\bar{\eta}_k =$$

$$= (\pi)^3 \exp\left(-2\bar{p}_i \cdot \bar{p}_k \cos\alpha_{ki} - 2i\bar{p}_k \cdot \bar{q}_i \operatorname{sen}\alpha_{ki} - 2i\bar{p}_i \cdot \bar{q}_k \operatorname{sen}\alpha_{ki} - 2\bar{q}_k \cdot \bar{q}_i \cos\alpha_{ki}\right)$$

2(D.10)

E. OBTENCION DE LOS PARENTESIS DE TRANSFORMACION $\langle l_{\xi_i} l_{\eta_i} | l_{\xi_k} l_{\eta_k} \rangle_{ki}^{\alpha_{ki}}$.

EN EL CAPITULO 3 SE TRATA LA OBTENCION DE LOS PARENTESIS DE REVAL RAYNAL, PERO EL TRABAJO ES MAS BIEN CUANTITATIVO Y POR ELLO SE HA FORMADO ESTE APENDICE: PARA MOSTRAR CON DETALLE LOS PASOS QUE EN EL CITADO CAPITULO SOLO SE NOMBRAN.

SEGUN LA EXPRESION (3.45) LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION ESTAN DADOS POR:

$$\langle l_{s_i} l_{\eta_i} | l_{s_k} l_{\eta_k} \rangle_{KL}^{\varphi_{ki}} =$$

$$= \sum_{\substack{m_{s_i}, m_{\eta_i} \\ m_{s_k}, m_{\eta_k}}} (l_{s_i} m_{s_i} l_{\eta_i} m_{\eta_i} | LM)\,(l_{s_k} m_{s_k} l_{\eta_k} m_{\eta_k} | LM)\,\cdot$$

$$\cdot \int \mathcal{W}_K^{l_{s_i} l_{\eta_i} m_{s_i} m_{\eta_i}}{}^*(\Omega_i)\; \mathcal{W}_K^{l_{s_k} l_{\eta_k} m_{s_k} m_{\eta_k}}(\Omega_k) \qquad 2(E.1)$$

REDUCIENDOSE EL CALCULO DE DICHOS COEFICIENTES AL CALCULO DE LA INTEGRAL(EC.3.69):

$$\int \mathcal{W}_K^{l_{s_i} l_{\eta_i} m_{s_i} m_{\eta_i}}{}^*(\Omega_i)\; \mathcal{W}_K^{l_{s_k} l_{\eta_k} m_{s_k} m_{\eta_k}}(\Omega_k)\, d\Omega = \frac{1}{\int_0^\infty e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^{2K+5}\, d\rho}\,\cdot$$

$$\cdot \left[A_K^{l_{s_i} l_{\eta_i}{}^*} \cdot A_K^{l_{s_k} l_{\eta_k}} \right]^{-1} \cdot \left(\frac{1}{K!}\right)^2 \cdot$$

$$\cdot \left\{ \frac{\partial^K}{\partial s_k^K} \frac{\partial^K}{\partial s_i^K} \int \left[\int \exp\left(-\rho^2 - 2i\bar{p}_i\cdot\bar{\xi}_i - 2\bar{q}_i\cdot\bar{\eta}_i + 2i\bar{p}_k\cdot\bar{\xi}_k - 2\bar{q}_k\cdot\bar{\eta}_k\right)\cdot d\bar{\xi}_k\cdot d\bar{\eta}_k \right]\cdot\right.$$

$$\left.\cdot\, Y_{l_{s_i}}^{m_{s_i}*}(\hat{p}_i)\; Y_{l_{\eta_i}}^{m_{\eta_i}*}(\hat{q}_i)\; Y_{l_{s_k}}^{m_{s_k}}(\hat{p}_k)\; Y_{l_{\eta_k}}^{m_{\eta_k}}(\hat{q}_k)\; d\hat{p}_i\, d\hat{q}_i\, d\hat{p}_k\, d\hat{q}_k \right\}_{\substack{s_i=0\\ s_k=0}}$$

$$2(E.2)$$

SABIENDO ADEMAS QUE EL VALOR DE LA INTEGRAL DENTRO DEL PARENTESIS CUADRADO ES (VER PARTE D DE ESTE APENDICE):

$$\left[\int \exp(\quad)\, d\bar{\xi}_k\, d\bar{\eta}_k \right] = (\pi)^3 \exp\left(-2\bar{p}_i\cdot\bar{p}_k \cos\varphi_{ki} - 2i\bar{p}_k\cdot\bar{q}_i \operatorname{sen}\varphi_{ki} - \right.$$

$$\left. - 2i\bar{p}_i\cdot\bar{q}_k \operatorname{sen}\varphi_{ki} - 2\bar{q}_k\cdot\bar{q}_i \cos\varphi_{ki}\right) \qquad 2(E.3)$$

ESENCIALMENTE LO QUE SE HARA EN ESTA PARTE, ES EL CALCULO COMPLETO DE LA INTEGRAL 2(E.2), OBTENIENDO EN CONSECUENCIA EL VALOR EXPLICITO DE LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL 2(E.1).

MEDIANTE LA EXPANSION DE ONDA PLANA TRIDIMENSIONAL:

$$e^{\bar{a}\cdot\bar{b}} = 4\pi \sum_{l,m} i^{l}\, j_l(-iab)\, Y_l^{m}(\hat{a})\, Y_l^{m*}(\hat{b}),$$

SE PUEDE VER FACILMENTE QUE LA ECUACION 2(E.3) RESULTA EXPRESABLE COMO SIGUE:

$$\left[\int \exp(\ )\, d\bar{\xi}_i\, d\bar{\eta}_k\right] =$$

$$(4\pi)^4 (\pi)^3 \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3,l_4\\ m_1,m_2,m_3,m_4}} i^{l_1+l_2+l_3+l_4} \cdot j_{l_1}(2i p_i p_k \cos\theta_{ki}) \cdot j_{l_2}(-2p_k q_i \operatorname{sen}\theta_{ki}) \cdot$$

$$\cdot j_{l_3}(-2p_i q_k \operatorname{sen}\theta_{ki}) \cdot j_{l_4}(2i q_k q_i \cos\theta_{ki}) \cdot Y_{l_1}^{m_1}(\hat{p}_i)\, Y_{l_1}^{m_1*}(\hat{p}_k) \cdot$$

$$\cdot Y_{l_2}^{m_2}(\hat{q}_i)\, Y_{l_2}^{m_2*}(\hat{p}_k) \cdot Y_{l_3}^{m_3}(\hat{p}_i)\, Y_{l_3}^{m_3*}(\hat{q}_k)\, Y_{l_4}^{m_4}(\hat{q}_i)\, Y_{l_4}^{m_4*}(\hat{q}_k)$$

2(E.4)

SUBSTITUYENDO ESTO ULTIMO EN LA ECUACION 2(E.2) SE OBTIENE:

$$\int W_k^{l_{s_i} l_{q_i} m_{s_i} m_{q_i} *}(\Omega_i)\, W_k^{l_{s_k} l_{q_k} m_{s_k} m_{q_k}}(\Omega_k)\, d\Omega =$$

$$= \frac{2}{(k+2)!}\left[A_k^{l_{s_i} l_{q_i} *} \cdot A_k^{l_{s_k} l_{q_k}} \right]^{-1} \cdot \left(\frac{1}{k!}\right)^2 \cdot \left\{ \frac{\partial^k}{\partial s_k^k} \frac{\partial^k}{\partial s_i^k} \left[(4\pi)^4 (\pi)^3 \cdot \right.\right.$$

$$\cdot \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3,l_4 \\ m_1,m_2,m_3,m_4}} i^{l_1+l_2+l_3+l_4} \cdot j_{l_1}(2i\, p_i p_k \cos\varphi_{ki})\, j_{l_2}(-2 p_k q_i \operatorname{sen}\varphi_{ki}) \cdot$$

$$\left. \cdot\, j_{l_3}(-2 p_i q_k \operatorname{sen}\varphi_{ki}) \cdot j_{l_4}(2i\, q_k q_i \cos\varphi_{ki}) \right] \cdot \int Y_{l_1}^{m_1}(\hat{p}_i)\, Y_{l_3}^{m_3}(\hat{p}_i)\, Y_{l_{s_i}}^{m_{s_i}*}(\hat{p}_i)\, d\hat{p}_i \cdot$$

$$\cdot \int Y_{l_4}^{m_4}(\hat{q}_i)\, Y_{l_2}^{m_2}(\hat{q}_i)\, Y_{l_{q_i}}^{m_{q_i}*}(\hat{q}_i)\, d\hat{q}_i \cdot \int Y_{l_{s_k}}^{m_{s_k}}(\hat{p}_k)\, Y_{l_2}^{m_2*}(\hat{p}_k)\, Y_{l_1}^{m_1*}(\hat{p}_k)\, d\hat{p}_k \cdot$$

$$\left. \cdot \int Y_{l_{q_k}}^{m_{q_k}}(\hat{q}_k)\, Y_{l_3}^{m_3*}(\hat{q}_k)\, Y_{l_4}^{m_4*}(\hat{q}_k)\, d\hat{q}_k \right\}_{\substack{s_i=0 \\ s_k=0}} \qquad 2(E.5)$$

AHORA BIEN, LA INTEGRAL DEL PRODUCTO DE TRES ARMONICOS ESFERICOS COMO APARECEN EN 2(E.5), ES LA SIGUIENTE (2):

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\theta,\varphi)\, Y_{l_2}^{m_2}(\theta,\varphi)\, Y_{l_3}^{m_3*}(\theta,\varphi)\, d\Omega = \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi\,(2l_3+1)} \right]^{1/2} \cdot$$

$$\cdot (l_1 m_1 l_2 m_2 | l_3 m_3)\, (l_1 0\, l_2 0 | l_3 0) \qquad 2(E.6)$$

DONDE $(l_1 m_1 l_2 m_2 | l_3 m_3)$ SON LOS COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN, LOS CUALES, POR SER REALES, PERMITEN ESCRIBIR LA SIGUIENTE IGUALDAD:

$$\int Y_{\ell_1}^{m_1 *}(\theta,\varphi) Y_{\ell_2}^{m_2 *}(\theta,\varphi) Y_{\ell_3}^{m_3}(\theta,\varphi)\, d\Omega = \int Y_{\ell_1}^{m_1}(\theta,\varphi) Y_{\ell_2}^{m_2}(\theta,\varphi) Y_{\ell_3}^{m_3 *}(\theta,\varphi)\, d\Omega$$

2(E.7)

AGRUPANDO ALGUNOS TERMINOS Y APROVECHANDO LAS PROPIEDADES 2(E.6) Y 2(E7) SE VE QUE LA ECUACION 2(E.5) QUEDA COMO SIGUE:

$$\int W_k^{\ell_{3_i} \ell_{4_i} m_{3_i} m_{4_i} *}(\Omega_i)\, W_k^{\ell_{3_k} \ell_{4_k} m_{3_k} m_{4_k}}(\Omega_k)\, d\Omega =$$

$$= \frac{2 (4\pi)^4 (\pi)^3}{(k+2)!\,(k!)^2} \cdot \left[A_k^{\ell_{3_i}\ell_{4_i} *} \cdot A_k^{\ell_{3_k}\ell_{4_k}} \right]^{-1} \cdot \sum_{\ell_1,\ell_2,\ell_3,\ell_4} i^{\ell_1+\ell_2+\ell_3+\ell_4} \cdot$$

$$\cdot \left[\sum_{m_1,m_2,m_3,m_4} (\ell_1 m_1 \ell_3 m_3 | \ell_{3_i} m_{3_i})(\ell_2 m_2 \ell_4 m_4 | \ell_{4_i} m_{4_i})(\ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | \ell_{3_k} m_{3_k})(\ell_3 m_3 \ell_4 m_4 | \ell_{4_k} m_{4_k}) \right.$$

$$\left. \cdot \frac{1}{\sqrt{(2\ell_{3_i}+1)(2\ell_{4_i}+1)(2\ell_{3_k}+1)(2\ell_{4_k}+1)}} \right] \cdot \frac{1}{(4\pi)^2} \cdot \sqrt{(2\ell_1+1)(2\ell_3+1)}\,(\ell_1 0 \ell_3 0 | \ell_{3_i} 0) \cdot$$

$$\cdot \sqrt{(2\ell_2+1)(2\ell_4+1)}\,(\ell_2 0 \ell_4 0 | \ell_{4_i} 0) \cdot \sqrt{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}\,(\ell_1 0 \ell_2 0 | \ell_{3_k} 0) \cdot$$

$$\cdot \sqrt{(2\ell_3+1)(2\ell_4+1)}\,(\ell_3 0 \ell_4 0 | \ell_{4_k} 0) \cdot$$

$$\cdot \frac{\partial^k}{\partial S_k^k} \frac{\partial^k}{\partial S_i^k} \left\{ j_{\ell_1}(2i\, p_i p_k \cos\theta_{ki})\, j_{\ell_2}(-2 p_k q_i \operatorname{sen}\theta_{ki})\, j_{\ell_3}(-2 p_i q_k \operatorname{sen}\theta_{ki})\, j_{\ell_4}(2i\, q_k q_i \cos\theta_{ki}) \right\}_{\substack{S_i=0\\ S_k=0}}$$

2(E.8)

DONDE SE HA UTILIZADO :

$$\int_0^\infty e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^{2k+5}\, d\rho = \frac{(k+2)!}{2}$$

SUBSTITUYAMOS AHORA LA EXPRESION 2(F.8) EN LA ECUACION 2(F.1) Y LLEVEMOS A CABO LA SUMA SOBRE LOS NUMEROS CUANTICOS MAGNETICOS QUE SE INDICAN. EMPLEANDO LA DEFINICION DEL COEFICIENTE 9-J (2,9), SE PUEDE VER QUE LA SUMA ARRIBA MENCIONADA CORRESPONDE A LO SIGUIENTE:

$$\sum_{\substack{m_1, m_2, m_3, m_4 \\ m_{s_i} m_{\eta_i} m_{s_k} m_{\eta_k}}} (l_1 m_1 l_3 m_3 | l_{s_i} m_{s_i})(l_2 m_2 l_4 m_4 | l_{\eta_i} m_{\eta_i})(l_{s_i} m_{s_i} l_{\eta_i} m_{\eta_i} | LM) \times$$

$$\times (l_1 m_1 l_2 m_2 | l_{s_k} m_{s_k})(l_3 m_3 l_4 m_4 | l_{\eta_k} m_{\eta_k})(l_{s_k} m_{s_k} l_{\eta_k} m_{\eta_k} | LM) =$$

$$= \left[(2l_{s_i}+1)(2l_{\eta_i}+1)(2l_{s_k}+1)(2l_{\eta_k}+1)\right]^{1/2} \cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_{s_k} \\ l_3 & l_4 & l_{\eta_k} \\ l_{s_i} & l_{\eta_i} & L \end{pmatrix} \qquad 2(F.9)$$

DONDE

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_{s_k} \\ l_3 & l_4 & l_{\eta_k} \\ l_{s_i} & l_{\eta_i} & L \end{pmatrix}$$

ES UN COEFICIENTE 9-J.

ENTONCES, LA ECUACION 2(F.1) TOMA LA FORMA EXPLICITA:

$$\langle l_{s_i} l_{\eta_i} | l_{s_k} l_{\eta_k} \rangle_{KL}^{\alpha_{ki}} =$$

$$= \frac{32\pi^5}{(K+2)!\,(K!)^2} \cdot \left[\Delta_k^{l_{s_i} l_{\eta_i}*} \cdot \Delta_k^{l_{s_k} l_{\eta_k}} \right]^{-1} \cdot \sum_{l_1,l_2,l_3,l_4} i^{\,l_1+l_2+l_3+l_4} \cdot$$

$$\cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_{s_k} \\ l_3 & l_4 & l_{\eta_k} \\ l_{s_i} & l_{\eta_i} & L \end{pmatrix} \cdot f(l_1,l_3;l_{s_i})\, f(l_2,l_4;l_{\eta_i}) \cdot f(l_1,l_2;l_{s_k}) \cdot f(l_3,l_4;l_{\eta_k})$$

$$\cdot \frac{\partial^K}{\partial s_k^K} \frac{\partial^K}{\partial s_i^K} \Big\{ j_{l_1}(2i\, p_i p_k \cos\alpha_{ki})\, j_{l_2}(-2 p_k q_i \operatorname{sen}\alpha_{ki}) \cdot j_{l_3}(-2 p_i q_k \operatorname{sen}\alpha_{ki}) \cdot$$

$$\cdot j_{l_4}(2i\, q_k q_i \cos\alpha_{ki}) \Big\}_{\substack{s_i=0 \\ s_k=0}} \qquad 2(E.10)$$

DONDE, POR SIMPLICIDAD DE NOTACION, SE HIZO LA CONVENCION:

$$f(a,b;c) = \left[(2a+1)(2b+1) \right]^{1/2} (a\,0\,b\,0 | c\,0)$$

EXPRESEMOS AHORA EXPLICITAMENTE A LAS FUNCIONES BESSEL ESFERICAS QUE APARECEN EN 2(E.10), SABIENDO QUE(3):

$$j_l(z) = \left(\frac{\pi}{2z} \right)^{1/2} \sum_s \frac{(-1)^s \left(\frac{z}{2} \right)^{2s+l+\frac{1}{2}}}{s!\,\Gamma(s+l+\frac{3}{2})} \qquad 2(E.11)$$

EN TERMINOS DE ESTO ULTIMO, SE PUEDE ENCONTRAR EL PRODUCTO DE LAS CUATRO FUNCIONES BESSEL, EC. 2(E.10), Y EN EL LIMITE:

$$q_i \to s_i \;;\; q_k \to s_k \,,$$

DESPUES DE ALGUNAS SIMPLIFICACIONES OBVIAS, SE OBTIENE LO QUE SIGUE:

$$j_{l_1}(2i p_i p_k \cos\theta_{ki})\, j_{l_2}(-2 p_k q_i \,\mathrm{sen}\,\theta_{ki})\, j_{l_3}(-2 p_i q_k \,\mathrm{sen}\,\theta_{ki})\, j_{l_4}(2i q_k q_i \cos\theta_{ki}) =$$

$$= \frac{\pi^2}{16} \sum_{s,\tau,u,v} (-1)^{2s+2v+3\tau+3u+l_2+l_3} (i)^{l_1+l_4} (s_i s_k)^{2s+2\tau+2u+2v+l_1+l_2+l_3+l_4} \cdot$$

$$\cdot (\cos\theta_{ki})^{2s+2v+l_1+l_4} (\mathrm{sen}\,\theta_{ki})^{2\tau+2u+l_2+l_3} \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{s!\,\tau!\,u!\,v!\,\Gamma(s+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(\tau+l_2+\frac{3}{2})\,\Gamma(u+l_3+\frac{3}{2})\,\Gamma(v+l_4+\frac{3}{2})} \qquad 2(E.12)$$

SI HACEMOS AHORA EL CAMBIO DE INDICES:

$$\left.\begin{aligned} s+v &\equiv \nu \\ \tau+u &\equiv \mu \end{aligned}\right\}, \qquad 2(E.13)$$

ENTONCES, LA ECUACION 2(E.12) QUEDA COMO:

$$j_{l_1}\cdot j_{l_2}\cdot j_{l_3}\cdot j_{l_4} =$$

$$= \frac{\pi^2}{16} \sum_{\mu,\nu} (-1)^{\mu+l_2+l_3} \cdot i^{l_1+l_4} (s_i s_k)^{2\mu+2\nu+l_1+l_2+l_3+l_4} \cdot$$

$$\cdot (\cos\theta_{ki})^{2\nu+l_1+l_4} (\mathrm{sen}\,\theta_{ki})^{2\mu+l_2+l_3} \cdot \sum_{v=0}^{\nu} \frac{1}{(\nu-v)!\,v!\,\Gamma(\nu-v+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(v+l_4+\frac{3}{2})} \cdot$$

$$\cdot \sum_{u=0}^{\mu} \frac{1}{(\mu-u)!\,u!\,\Gamma(\mu-u+l_2+\frac{3}{2})\,\Gamma(u+l_3+\frac{3}{2})} \cdot$$

2(E.14)

SE PUEDE VER FACILMENTE QUE LAS ULTIMAS DOS SUMAS EN ESTA ECUACION SON REDUCIBLES A LO SIGUIENTE:

$$\sum_{r=0}^{s} \frac{1}{(s-r)!\; r!\; \Gamma(s-r+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(r+l_2+\frac{3}{2})} =$$

$$= \frac{\sum_{r=0}^{s} \binom{s+l_1+\frac{1}{2}}{r}\binom{s+l_2+\frac{1}{2}}{s-r}}{\Gamma(s+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(s+l_2+\frac{3}{2})} = \frac{\Gamma(2s+l_1+l_2+2)}{\Gamma(s+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(s+l_2+\frac{3}{2})} \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\Gamma(s+1)\,\Gamma(s+l_1+l_2+2)} ,$$

2(E.15)

DONDE SE HA EMPLEADO LA PROPIEDAD DE LA FUNCION GAMMA:

$$\binom{w}{z} = \frac{\Gamma(w+1)}{\Gamma(z+1)\,\Gamma(w-z+1)}$$

MEDIANTE ESTO ULTIMO, EL PRODUCTO DE LAS FUNCIONES BESSEL 2(E.14) QUEDA COMO:

$$j_{l_1}\cdot j_{l_2}\cdot j_{l_3}\cdot j_{l_4} =$$

$$= \frac{\pi^2}{16} \sum_{\mu,\nu} (-1)^{\mu+l_2+l_3}\; i^{l_1+l_4} \cdot \left[\frac{\Gamma(2\nu+l_1+l_4+2)}{\Gamma(\nu+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(\nu+l_4+\frac{3}{2})\,\Gamma(\nu+1)\,\Gamma(\nu+l_1+l_4+2)}\right] \cdot$$

$$\cdot \left[\frac{\Gamma(2\mu+l_2+l_3+2)}{\Gamma(\mu+l_2+\frac{3}{2})\,\Gamma(\mu+l_3+\frac{3}{2})\,\Gamma(\mu+1)\,\Gamma(\mu+l_2+l_3+2)}\right] (s_i s_k)^{2\mu+2\nu+l_1+l_2+l_3+l_4} \cdot$$

$$\cdot (\cos\theta_{ki})^{2\nu+l_1+l_4}\,(\operatorname{sen}\theta_{ki})^{2\mu+l_2+l_3}$$

2(E.16)

SUBSTITUYAMOS ESTA ULTIMA EXPRESION DENTRO DE LA ECUACION 2(E.10) Y -- LLEVEMOS A CABO LA DERIVACION INDICADA EN ESTA ULTIMA ECUACION:

$$\frac{\partial^k}{\partial s_i^k}\,\frac{\partial^k}{\partial s_k^k}\,(s_i s_k)^{2\mu+2\nu+l_1+l_2+l_3+l_4} = (K!)^2$$

2(E.17)

$$(K = 2\mu+2\nu+l_1+l_2+l_3+l_4)$$

EN TERMINOS DE ESTO, LA ECUACION 2(E.10) QUEDA:

$$\langle l_{3_i} l_{4_i} | l_{3_k} l_{4_k} \rangle_{KL}^{\varphi_{ki}} =$$

$$= \frac{2\pi^7}{(K+2)!}\left[A_K^{l_{3_i}l_{4_i}*}\cdot A_K^{l_{3_k}l_{4_k}}\right]^{-1}\sum_{l_1,l_2,l_3,l_4} i^{\,l_1+l_2+l_3+l_4}\cdot\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_{3_k}\\ l_3 & l_4 & l_{4_k}\\ l_{3_i} & l_{4_i} & L\end{pmatrix}\cdot$$

$$\cdot\, f(l_1,l_3;l_{3_i})\cdot f(l_2,l_4;l_{4_i})\; f(l_1,l_2;l_{3_k})\cdot f(l_3\,l_4;l_{4_k})\,\cdot$$

$$\cdot\sum_{\mu,\nu}(-1)^{\mu+l_2+l_3}\, i^{\,l_1+l_4}\cdot\left[\frac{\Gamma(2\nu+l_1+l_4+2)}{\Gamma(\nu+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(\nu+l_4+\frac{3}{2})\,\Gamma(\nu+1)\,\Gamma(\nu+l_1+l_4+2)}\right]\cdot$$

$$\cdot\left[\frac{\Gamma(2\mu+l_2+l_3+2)}{\Gamma(\mu+l_2+\frac{3}{2})\,\Gamma(\mu+l_3+\frac{3}{2})\,\Gamma(\mu+1)\,\Gamma(\mu+l_2+l_3+2)}\right](\cos\varphi_{ki})^{2\nu+l_1+l_4}\,(\operatorname{sen}\varphi_{ki})^{2\mu+l_2+l_3}$$

2(E.18)

EMPLEANDO LAS RELACIONES EXPLICITAS PARA LAS CANTIDADES $A_K^{l_3 l_4}$ DADAS POR LA ECUACION 2(C.10, PTE. C. DE ESTE APENDICE) Y SABIENDO QUE:

$$K = 2n_i + l_{3_i} + l_{4_i} = 2n_k + l_{3_k} + l_{4_k} = 2\mu + 2\nu + l_1 + l_2 + l_3 + l_4$$

2(E.19)

DESPUES DE ALGUNAS SIMPLIFICACIONES DIRECTAS Y DE AGRUPAR TERMINOS, FINALMENTE, LA ECUACION 2(E.18) NOS PROPORCIONA LA EXPRESION PARA LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL:

$$\langle l_{3_i} l_{4_i} | l_{3_k} l_{4_k} \rangle_{KL}^{\varphi_{ki}} = \frac{\pi}{4}\sum_{l_1,l_2,l_3,l_4} i^{\,l_2+l_3-l_{4_i}-l_{4_k}}\,(-1)^{l_1+l_2+l_3+l_4}\cdot$$

$$\cdot\left[C^{n_i}_{l_{3_i}l_{4_i}}\cdot C^{n_k}_{l_{3_k}l_{4_k}}\right]^{-\frac{1}{2}}\cdot f(l_1,l_3;l_{3_i})\cdot f(l_2,l_4;l_{4_i})\cdot f(l_1,l_2;l_{3_k})\cdot f(l_3,l_4;l_{4_k})\cdot$$

$$\cdot\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_{3_k}\\ l_3 & l_4 & l_{4_k}\\ l_{3_i} & l_{4_i} & L\end{pmatrix}\cdot\sum_{\mu,\nu}(-1)^{\mu}\, C^{\nu}_{l_1,l_4}\cdot C^{\mu}_{l_2,l_3}\,(\cos\varphi_{ki})^{2\nu+l_1+l_4}\,(\operatorname{sen}\varphi_{ki})^{2\mu+l_2+l_3}$$

2(E.20)

DONDE LA SIGUIENTE CONVENCION SE HA EMPLEADO:

$$C_{bc}^{a} = \frac{\Gamma(2a+b+c+2)}{\Gamma(a+b+\frac{3}{2})\,\Gamma(a+c+\frac{3}{2})\,\Gamma(a+1)\,\Gamma(a+b+c+2)}$$

Y

$$f(a,b;c) = \left[(2a+1)(2b+1)\right]^{1/2} (a0\,b0|c0)$$

LA RESTRICCION SOBRE LAS SUMAS SE DA POR LA CONDICION 2(E.19):

$$k = 2n_i + l_{\xi_i} + l_{\eta_i} = 2n_k + l_{\xi_k} + l_{\eta_k} = 2\mu + 2\nu + l_1 + l_2 + l_3 + l_4 .$$

F. CALCULO DEL COEFICIENTE $\langle l_\xi l_\eta | 00 \rangle_{k0}^{q_{ki}}$.

EN EL ESTUDIO DE ATOMOS DE DOS ELECTRONES DONDE SE HACE USO DE LOS COEFICIENTES DE REVAI-RAYNAL, SEGUN SE DISCUTE EN LA SECCION D DEL CAPITULO 3, ES NECESARIO EL CALCULO EXPLICITO DE LOS COEFICIENTES (EC.3.107):

$$V_k^{l_{\xi_i} l_{\eta_i}}$$

SEGUN LA ECUACION 2(E.20) PARA LOS COEFICIENTES DE TRANSFORMACION, SUBSTITUYAMOS LOS VALORES:

$$L = l_{\xi_k} = l_{\eta_k} = 0 \qquad 2(E.1)$$

POR ESTO ULTIMO, LA ECUACION 2(E.20) QUEDA:

$$\langle l_{\xi_i} l_{\eta_i} | 0 0 \rangle^{\alpha_{ki}}_{k0} =$$

$$= \frac{\pi}{4} \left[\frac{\Gamma(2n_i + l_{\xi_i} + l_{\eta_i} + 2)\ \Gamma(2n_k + 2)}{\Gamma(n_i + l_{\xi_i} + \frac{3}{2})\, \Gamma(n_i + l_{\eta_i} + \frac{3}{2})\, \Gamma(n_i + 1)\, \Gamma(n_i + l_{\xi_i} + l_{\eta_i} + 2)\, \Gamma(n_k + 1)\, \Gamma(n_k + 2)} \right]^{-\frac{1}{2}} \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\Gamma(n_k + \frac{3}{2})} \cdot \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4} i^{\,l_2 + l_3 + l_{\xi_i}} \quad (-1)^{l_1 + l_2 + l_3 + l_4} \cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & 0 \\ l_3 & l_4 & 0 \\ l_{\xi_i} & l_{\eta_i} & 0 \end{pmatrix} \cdot$$

$$\cdot (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1)(2l_4 + 1)\,(l_1 0 l_3 0 | l_{\xi_i} 0)\,(l_2 0 l_4 0 | l_{\eta_i} 0)\,(l_1 0 l_2 0 | 0 0)$$

$$\cdot (l_3 0 l_4 0 | 0 0) \cdot \sum_{\mu, \nu} (-1)^{\mu} \cdot$$

$$\cdot \frac{\Gamma(2\nu + l_1 + l_4 + 2)\ \Gamma(2\mu + l_2 + l_3 + 2)}{\Gamma(\nu + l_1 + \frac{3}{2})\, \Gamma(\nu + l_4 + \frac{3}{2})\, \Gamma(\nu + 1)\, \Gamma(\nu + l_1 + l_4 + 2)\, \Gamma(\mu + l_2 + \frac{3}{2})\, \Gamma(\mu + l_3 + \frac{3}{2})} \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\Gamma(\mu + 1)\, \Gamma(\mu + l_2 + l_3 + 2)} \cdot (\cos \alpha_{ki})^{2\nu + l_1 + l_4}\, (\operatorname{sen} \alpha_{ki})^{2\mu + l_2 + l_3} \qquad 2(F.2)$$

EMPLEANDO LAS PROPIEDADES(6,12):

$$(j_i 0 j_j 0 | 0 0) = (-1)^{j_i} \cdot \frac{1}{\sqrt{(2j_i + 1)}} \cdot \delta_{j_i j_j}$$

$$(j_1 0 j_2 0 | j 0) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad j + j_1 + j_2 = \text{NON} \\ (-1)^{g-j} \sqrt{2j+1}\ \Delta(j_1 j_2 j) \cdot \dfrac{g!}{(g-j)!\,(g-j_1)!\,(g-j_2)!} & \\ \text{si} \quad j_1 + j_2 + j = \text{par} = 2g\ ;\ g \geq j, j_1, j_2 & \end{cases} \qquad 2(F.3)$$

DONDE LA CONDICION DE TRIANGULARIDAD $\Delta(j_1 j_2 j)$ TIENE EL SIGUIENTE VALOR:

$$\Delta(j_1 j_2 j) = \left[\frac{(j_1+j_2-j)!\,(j_1-j_2+j)!\,(j-j_1+j_2)!}{(j_1+j_2+j+1)!} \right]^{1/2} \qquad 2(F.4)$$

ADEMAS, DEL COEFICIENTE 9-J EN 2(F.2) SE CONCLUYE QUE:

$$l_{\xi_i} = l_{\eta_i} = l \, . \qquad 2(F.5)$$

EN TERMINOS DE 2(F.5) Y 2(F.3), LA ECUACION 2(F.2) QUEDA COMO SIGUE:

$$\langle ll|00\rangle_{K0}^{\alpha_{ki}} = \frac{\pi}{4}\,\Gamma\!\left(n_k+\tfrac{3}{2}\right)\Gamma\!\left(n_i+l+\tfrac{3}{2}\right)\cdot\left[\frac{\Gamma(n_i+1)\,\Gamma(n_k+1)\,\Gamma(n_k+2)\,\Gamma(n_i+2l+2)}{\Gamma(2n_i+2l+2)\,\Gamma(2n_k+2)}\right]^{1/2}\cdot$$

$$\sum_{l_1,l_3} (i)^{l_1+l_3+l} \cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_1 & 0 \\ l_3 & l_3 & 0 \\ l & l & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{(2l_1+1)^2 (2l_3+1)^2}{\left[(2l_1+1)(2l_3+1)\right]^{1/2}} \cdot (-1)^{l_1+l_3} \cdot (l_1 0 l_3 0|l0)^2$$

$$\cdot \sum_{\mu,\nu} (-1)^{\mu} \cdot \frac{\Gamma(2\nu+l_1+l_3+2)\,\Gamma(2\mu+l_1+l_3+2)}{\Gamma\!\left(\nu+l_1+\tfrac{3}{2}\right)\Gamma\!\left(\nu+l_3+\tfrac{3}{2}\right)\Gamma(\nu+1)\,\Gamma(\nu+l_1+l_3+2)\,\Gamma\!\left(\mu+l_1+\tfrac{3}{2}\right)} \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\Gamma\!\left(\mu+l_3+\tfrac{3}{2}\right)\Gamma(\mu+1)\,\Gamma(\mu+l_1+l_3+2)} \cdot (\cos\alpha_{ki})^{2\nu+l_1+l_3} \cdot (\operatorname{sen}\alpha_{ki})^{2\mu+l_1+l_3} \qquad 2(F.6)$$

AHORA, EL COEFICIENTE 9-J EN ESTA ULTIMA ECUACION, SE REDUCE A UN COEFICIENTE DE RACAH (6-J) (12):

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_1 & 0 \\ l_3 & l_3 & 0 \\ l & l & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{l-l_1-l_3}}{\sqrt{2l+1}} \cdot W(l_1 l_1 l_3 l_3 ; 0 l)$$

PERO, LOS COEFICIENTES DE RACAH TIENEN LA PROPIEDAD DE SIMETRIA:

$$W(l_1 l_1 l_3 l_3 ; 0 l) = (-1)^{l-l_1-l_3} \left[(2l_1+1)(2l_3+1) \right]^{-\frac{1}{2}}$$

POR LO TANTO:

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_1 & 0 \\ l_3 & l_3 & 0 \\ l & l & 0 \end{pmatrix} = \Big[(2l+1)(2l_1+1)(2l_3+1) \Big]^{-\frac{1}{2}}$$

2(F.7)

FINALMENTE, EMPLEANDO ESTO ULTIMO JUNTO CON 2(F.3) (CON $g = \frac{l_1+l_3+l}{2}$), Y DESPUES DE ALGUNAS SIMPLIFICACIONES, OBTENEMOS EL VALOR BUSCADO:

$$\langle l l | 0 0 \rangle^{\varphi_{ki}}_{K0} = \frac{\pi}{4}\, \Gamma(n_k+\tfrac{3}{2})\, \Gamma(n_i+l+\tfrac{3}{2}) \cdot \left[\frac{\Gamma(n_i+1)\,\Gamma(n_k+1)\,\Gamma(n_k+2)\,\Gamma(n_i+2l+2)}{\Gamma(2n_i+2l+2)\,\Gamma(2n_k+2)} \right]^{1/2}$$

$$\cdot \sum_{l_1, l_3} i^{\,l_1+l_3-l} \cdot \frac{(2l_1+1)(2l_3+1)(2l+1)^{1/2}\, (l_1+l_3-l)!\, (l+l_1-l_3)!\, (l+l_3-l_1)!}{(l_1+l_3+l+1)!} \cdot$$

$$\cdot \left[\frac{\left(\frac{l_1+l_3+l}{2}\right)!}{\left(\frac{l_1+l_3-l}{2}\right)!\left(\frac{l+l_3-l_1}{2}\right)!\left(\frac{l+l_1-l_3}{2}\right)!} \right]^2 \cdot \sum_{\mu, \nu} (-1)^{\mu} \cdot$$

$$\cdot \frac{\Gamma(2\nu+l_1+l_3+2)\,\Gamma(2\mu+l_1+l_3+2)}{\Gamma(\nu+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(\nu+l_3+\frac{3}{2})\,\Gamma(\nu+1)\,\Gamma(\nu+l_1+l_3+2)\,\Gamma(\mu+l_1+\frac{3}{2})\,\Gamma(\mu+l_3+\frac{3}{2})\,\Gamma(\mu+1)} \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\Gamma(\mu+l_1+l_3+2)} \cdot (\cos \varphi_{ki})^{2\nu+l_1+l_3}\, (\operatorname{sen} \varphi_{ki})^{2\mu+l_1+l_3}$$

2(F.8)

DONDE LA RESTRICCION SOBRE LAS SUMAS ES LA SIGUIENTE (VER PARTE E)

$$2n_i+2l = 2n_k = 2\mu+2\nu+2l_1+2l_3 ,$$

ADEMAS, DE 2(F.3) SE APRECIAN LAS RESTRICCIONES PARA l, l_1 Y l_3 :

$$l+l_1+l_3 = \text{par} \; ; \qquad \frac{l_1+l_3+l}{2} \geq l, l_1, l_3$$

G. CALCULO DEL COEFICIENTE $\langle n_x n_y | 0K \rangle_{\ell_x \ell_y}$

COMO SE DISCUTE EN EL CAPITULO 3, LA TRANSFORMACION UNITARIA QUE RELACIONA LA FUNCION DE ONDA DE DOS PARTICULAS EN UN POZO DE POTENCIAL DE OSCILADOR ARMONICO DADA EN TERMINOS DE LAS COORDENADAS DE CADA PARTICULA RESPECTO AL CENTRO DEL POZO, CON LA FUNCION DE ONDA DEL MISMO SISTEMA, PERO EN COORDENADAS HIPERESFERICAS, ES LA SIGUIENTE:

$$|NK\ell_x\ell_y LM\rangle = \sum_{n_x,n_y} |n_x\ell_x n_y\ell_y LM\rangle \langle n_x n_y | NK\rangle_{\ell_x\ell_y} \qquad 2(G.1)$$

DONDE (SEC. C, CAP. 3):

$$|NK\ell_x\ell_y LM\rangle = N_{NK}\, e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^K L_N^{K+2}(\rho^2)\, \mathcal{W}_K^{\ell_x\ell_y LM}(\alpha, \hat{x}, \hat{y}) \qquad 2(G.2)$$

CONSIDERANDO EL CASO $N=0$, LA ECUACION 2(G.2) SE REDUCE A:

$$|0K\ell_x\ell_y LM\rangle = N_{0K}\, e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^K L_0^{K+2}(\rho^2)\, \mathcal{W}_K^{\ell_x\ell_y LM}(\omega) \qquad 2(G.3)$$

ESCRIBIENDO EXPLICITAMENTE A LOS ARMONICOS HIPERESFERICOS CON Y ,
Y SABIENDO QUE:

$$L_0^{K+2}(\rho^2) = 1 \quad ; \quad N_{0K} = \left[\frac{2}{\Gamma(K+3)}\right]^{1/2}$$

Y

$$N_K^{\ell_x\ell_y} = \left[\frac{2n!\,(K+2)(n+\ell_x+\ell_y+1)!}{\Gamma(n+\ell_x+\frac{3}{2})\,\Gamma(n+\ell_y+\frac{3}{2})}\right]^{1/2}$$

ENTONCES 2(G.3) QUEDA:

$$|0K l_x l_y LM\rangle =$$

$$= \left\{ N_{0K} N_K^{l_x l_y} e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^K \right\} \cdot \left\{ \sum_{m_x, m_y} (l_x m_x l_y m_y | LM) (\cos\alpha)^{l_x} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_y} \cdot \right.$$

$$\left. \cdot P_n^{(l_y+\frac{1}{2}, l_x+\frac{1}{2})} (\cos 2\alpha) \, Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) \, Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \right\} \qquad 2(G.4)$$

AHORA BIEN, LA EXPRESION EXPLICITA PARA $|n_x l_x n_y l_y LM\rangle$ ES LA SIGUIENTE : (VER EC. 3.33):

$$|n_x l_x n_y l_y LM\rangle =$$

$$= \sum_{m_x, m_y} (l_x m_x l_y m_y | LM) \left[A_{n_x l_x} e^{-\frac{x^2}{2}} x^{l_x} L_{n_x}^{l_x+\frac{1}{2}}(x^2) \right] \cdot$$

$$\cdot \left[A_{n_y l_y} e^{-\frac{y^2}{2}} y^{l_y} L_{n_y}^{l_y+\frac{1}{2}}(y^2) \right] \cdot Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) \, Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \qquad 2(G.5)$$

DONDE SE HA ESCRITO EXPLICITAMENTE LA FORMA DE $\chi(x)$ Y $\mathcal{Y}(y)$ DADAS POR LAS ECS. (3.27) Y (3.32) RESPECTIVAMENTE, CON SUS RESPECTIVAS -- CONSTANTES DE NORMALIZACION.

LAS REPRESENTACIONES 2(G.4) Y 2(G.5), PUEDEN ESCRIBIRSE COMO SIGUE

$$|0K l_x l_y LM\rangle =$$

$$= \left(N_{0K} \cdot N_K^{l_x l_y} \right) e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^K (\cos\alpha)^{l_x} (\operatorname{sen}\alpha)^{l_y} P_n^{(l_y+\frac{1}{2}, l_x+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) \cdot \sum_{m_x, m_y} (l_x m_x l_y m_y | LM) \cdot$$

$$\cdot Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) \, Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \qquad 2(G.6)$$

$$|n_x l_x n_y l_y LM\rangle =$$

$$= \left(A_{n_x l_x} A_{n_y l_y} \right) e^{-\frac{\rho^2}{2}} (x)^{l_x} (y)^{l_y} \left[L_{n_x}^{l_x+\frac{1}{2}}(x^2) \cdot L_{n_y}^{l_y+\frac{1}{2}}(y^2) \right] \cdot \sum_{m_x, m_y} (l_x m_x l_y m_y | LM) \, Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) \, Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \qquad 2(G.7)$$

EXPRESEMOS A LOS POLINOMIOS DE JACOBI COMO (3):

$$P_n^{(a,b)}(\gamma) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{n} \binom{n+a}{m} \binom{n+b}{n-m} (\gamma-1)^{n-m} (\gamma+1)^m \qquad 2(G.8)$$

DONDE

$$a \equiv l_y + \tfrac{1}{2}\,; \quad b \equiv l_x + \tfrac{1}{2} \quad ; \quad \gamma \equiv \cos 2\alpha \qquad 2(G.9)$$

POR LO QUE 2(G.8) SE REDUCE A:

$$P_n^{(l_y+\frac{1}{2},\, l_x+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{n} \binom{n+l_y+\frac{1}{2}}{m} \binom{n+l_x+\frac{1}{2}}{n-m} \left(-2\operatorname{sen}^2\alpha\right)^{n-m} \left(2\cos^2\alpha\right)^{m}$$

ADEMAS, COMO PUEDE VERSE DE LA ECUACION (3.5º):

$$\left.\begin{array}{l} x = \rho \cos\alpha \\ y = \rho \operatorname{sen}\alpha \end{array}\right\}.$$

ENTONCES, LOS POLINOMIOS DE JACOBI SE PUEDEN ESCRIBIR COMO: LO QUE SIGUE EN COORDENADAS HIPERESFERICAS:

$$P_n^{(l_y+\frac{1}{2},\, l_x+\frac{1}{2})}(\cos 2\alpha) = \rho^{-2n} \sum_{m=0}^{n} \binom{n+l_y+\frac{1}{2}}{m} \binom{n+l_x+\frac{1}{2}}{n-m} (-1)^{n-m}\, x^{2m}\, y^{2(n-m)}$$

2(G.10)

EXPRESANDO TODO EN TERMINOS DE x E y EN LA ECUACION 2(G.4) Y SUBSTITUYENDO 2(G.10) PARA LOS POLINOMIOS DE JACOBI, LA EXPRESION 2(G-4) SE REDUCE A LO SIGUIENTE:

$$\begin{aligned} &|0K\, l_x l_y LM\rangle \\ &= N_{0K}\, N_K^{l_x l_y}\, e^{-\frac{\rho^2}{2}} (x)^{l_x} (y)^{l_y} \cdot \sum_{m=0}^{n} \binom{n+l_y+\frac{1}{2}}{m} \binom{n+l_x+\frac{1}{2}}{n-m} \cdot \\ &\cdot (-1)^{n-m}\, x^{2m}\, y^{2(n-m)} \cdot \sum_{m_x, m_y} (l_x m_x l_y m_y | LM)\, Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x})\, Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \end{aligned}$$

2(G.11)

NOTESE QUE EN ESTA ULTIMA EXPRESION EL TERMINO ρ^{K} HA DESAPARECIDO, YA QUE $K=2n+l_x+l_y$.

ANALOGAMENTE, LOS POLINOMIOS DE LAGUERRE EN 2(G.5) SE PUEDEN EXPRESAR COMO (3):

$$L_{n_x}^{l_x+\frac{1}{2}}(x^2) = \sum_{s=0}^{n_x} (-1)^s \binom{n_x+l_x+\frac{1}{2}}{n_x-s} \left(\frac{1}{s!}\right) x^{2s} ,$$

LO MISMO PARA $L_{n_y}^{l_y+\frac{1}{2}}(y^2)$, PERO CON OTRO INDICE, POR SUPUESTO.

EN TERMINOS DE ESTO 2(G.5) QUEDA:

$$|n_x l_x n_y l_y LM\rangle =$$

$$= \left(A_{n_x l_x} \cdot A_{n_y l_y}\right) e^{-\frac{\rho^2}{2}} (x)^{l_x} (y)^{l_y} \cdot \sum_{s=0}^{n_x} \sum_{\tau=0}^{n_y} (-1)^{s+\tau} \cdot$$

$$\binom{n_x+l_x+\frac{1}{2}}{n_x-s} \binom{n_y+l_y+\frac{1}{2}}{n_y-\tau} \left(\frac{1}{s!\tau!}\right) x^{2s} \cdot y^{2\tau} \cdot$$

$$\cdot \sum_{m_x, m_y} (l_x m_x l_y m_y | LM) \, Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) \, Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y})$$

2(G.12)

DONDE:

$$A_{n_x l_x} \cdot A_{n_y l_y} = \left[\frac{4 n_x! \, n_y!}{\Gamma(n_x+l_x+\frac{3}{2}) \, \Gamma(n_y+l_y+\frac{3}{2})}\right]^{1/2}$$

2(G.13)

APLICANDO LA PROPIEDAD:

$$\binom{w}{z} = \frac{\Gamma(w+1)}{\Gamma(z+1)\,\Gamma(w-z+1)}$$

Y SUBSTITUYENDO LAS EXPRESIONES 2(G.11) Y 2(G.12) EN LA ECUACION 2(G.1) ESTA ULTIMA ECUACION QUEDA COMO:

$$N_{0K} N_k^{l_x l_y} e^{-\frac{\rho^2}{2}} (x)^{l_x} (y)^{l_y} \sum_{m=0}^{n} \frac{\Gamma(n+l_y+\frac{3}{2})}{\Gamma(m+1)\,\Gamma(n-m+l_y+\frac{3}{2})} \cdot \frac{\Gamma(n+l_x+\frac{3}{2})}{\Gamma(n-m+1)\,\Gamma(m+l_x+\frac{3}{2})}$$

$$\cdot (-1)^{n-m} x^{2m} y^{2(n-m)} \cdot \sum_{m_x, m_y} (l_x m_x l_y m_y | LM)\, Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x})\, Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) =$$

$$\left(A_{n_x l_x} \cdot A_{n_y l_y}\right) e^{-\frac{\rho^2}{2}} (x)^{l_x} (y)^{l_y} \sum_{n_x, n_y} \langle n_x n_y | 0K \rangle_{l_x l_y} \cdot \sum_{s=0}^{n_x} \sum_{\tau=0}^{n_y} (-1)^{s+\tau} \cdot$$

$$\cdot \frac{\Gamma(n_x+l_x+\frac{3}{2})}{\Gamma(n_x-s+1)\,\Gamma(s+l_x+\frac{3}{2})} \cdot \frac{\Gamma(n_y+l_y+\frac{3}{2})}{\Gamma(n_y-\tau+1)\,\Gamma(\tau+l_y+\frac{3}{2})} \cdot \frac{1}{s!\,\tau!}\, x^{2s} y^{2\tau} \cdot$$

$$\cdot \sum_{m_x, m_y} (l_x m_x l_y m_y | LM)\, Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x})\, Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \qquad 2(G.14)$$

CANCELANDO TERMINOS SEMEJANTES Y SABIENDO QUE LA ECUACION (3.85) CON $N=0$, TIENE LA FORMA:

$$K = 2n_x + 2n_y + l_x + l_y \; ,$$

PERO

$$K = 2n + l_x + l_y \quad \therefore \quad n = n_x + n_y \qquad 2(G.15)$$

SI CONSIDERAMOS:

$$s = n_x \; ; \qquad \tau = n_y \; , \qquad 2(G.16)$$

EN 2(G.14) SE PUEDE VER QUE:

$$m = n_x \quad ; \; n-m = n_y \; . \qquad 2(G.17)$$

EMPLEANDO ESTAS DOS ULTIMAS EXPRESIONES EN 2(G.14), PODEMOS IGUALAR LOS CORRESPONDIENTES COEFICIENTES DE x^{2n_x} E y^{2n_y} POR LO QUE :

$$\left[\frac{2}{\Gamma(k+3)}\cdot\frac{2n!\,(k+2)\,(n+l_x+l_y+1)!}{\Gamma(n+l_x+\frac{3}{2})\,\Gamma(n+l_y+\frac{3}{2})}\right]^{1/2}\cdot\frac{\Gamma(n+l_y+\frac{3}{2})\quad\Gamma(n+l_x+\frac{3}{2})}{\Gamma(n_x+1)\,\Gamma(n_y+l_y+\frac{3}{2})\,\Gamma(n_y+1)\,\Gamma(n_x+l_x+\frac{3}{2})}\cdot$$

$$\cdot(-1)^{n_y} = \langle n_x n_y|0k\rangle_{l_x l_y}\;(-1)^{n_x+n_y}\frac{1}{n_x!\;n_y!}\left[\frac{4\,n_x!\;n_y!}{\Gamma(n_x+l_x+\frac{3}{2})\,\Gamma(n_y+l_y+\frac{3}{2})}\right]^{1/2}$$

2(G.18)

DE AQUI, SABIENDO QUE $(-1)^{-n_x}=(-1)^{n_x}$ Y $\Gamma(k+3)=(k+2)\,\Gamma(k+2)$,DESPEJEMOS $\langle n_x n_y|0k\rangle_{l_x l_y}$:

$$\langle n_x n_y|0k\rangle_{l_x l_y} =$$

$$= (-1)^{n_x}\left[\frac{n!}{\Gamma(k+2)}\cdot(n+l_x+l_y+1)!\right]^{1/2}\cdot\frac{\left[\Gamma(n+l_y+\frac{3}{2})\,\Gamma(n+l_x+\frac{3}{2})\right]^{1/2}(n_x!\;n_y!)^{1/2}}{\left[\Gamma(n_x+l_x+\frac{3}{2})\,\Gamma(n_y+l_y+\frac{3}{2})\right]^{1/2}\Gamma(n_x+1)\,\Gamma(n_y+1)}$$

2(G.19)

HACIENDO ALGUNAS SIMPLIFICACIONES, Y EMPLEANDO LA PROPIEDAD

$$\Gamma(n+1)=n! \quad ; \quad \binom{w}{z}=\frac{\Gamma(w+1)}{\Gamma(z+1)\,\Gamma(w-z+1)}$$

LA ECUACION 2(G.19) QUEDA:

$$\langle n_x n_y|0k\rangle_{l_x l_y}=$$

$$= (-1)^{n_x}\left[\frac{n!}{\Gamma(k+2)}\cdot(n+l_x+l_y+1)!\right]^{1/2}\cdot\left[\binom{n+l_y+\frac{1}{2}}{n_x}\binom{n+l_x+\frac{1}{2}}{n_y}\right]^{1/2}$$

2(G.20)

EL TERMINO DENTRO DEL PRIMER PARENTESIS LO PODEMOS ESCRIBIR COMO:

$$\left[\frac{n!}{\Gamma(k+2)}\cdot(n+l_x+l_y+1)!\right]^{1/2} = \left[\frac{1}{\binom{k+1}{n}}\right]^{1/2}$$

POR LO QUE ,FINALMENTE,EL VALOR DEL COEFICIENTE $\langle n_x n_y | 0k\rangle_{l_x l_y}$ ES:

$$\langle n_x n_y | 0k\rangle_{l_x l_y} = (-1)^{n_x}\left[\frac{\binom{n+l_y+\frac{1}{2}}{n_x}\binom{n+l_x+\frac{1}{2}}{n_y}}{\binom{k+1}{n}}\right]^{1/2} \qquad 2(G.21)$$

DONDE SABEMOS QUE:

$$n = \frac{k-l_x-l_y}{2}$$

SE PUEDE ENCONTRAR LA EXPRESION ANALOGA PARA $\langle n_{\mathfrak{X}} n_{\mathfrak{Y}} | 0k\rangle_{l_{\mathfrak{X}} l_{\mathfrak{Y}}}$, UNICAMENTE HACIENDO EL CAMBIO $x \to \mathfrak{X}\ ; y \to \mathfrak{Y}$.

B I B L I O G R A F I A .

(1) M.Fabre De La Ripelle;Rev.Roum.Phys.,V-14,N°10,(1969),pp.1215-1222.

(2) A.R.Edmonds,Angular Momentum in Quantum Mechanics (Princeton University Press,1957).

(3) M.Abramowitz-I.Stegun,Handbook of Mathematical Functions,Dover Publishing co.,N.Y.(1968).

(4) J.Raynal-J.Revai;Il Nuovo Cimento,V-68A,N°4,(1970),pp. 612-621 .

(5) M.Moshinsky; Nuclear Physics,V-13,(1959),pp. 104-116.

(6) T.A.Brody-M.Moshinsky;Tablas de Parentesis de Transformacion,Monografias del Instituto de Fisica,Mexico,(1960).

(7) A.S. Davydov.Quantum Mechanics,NEO Press,1966,pp.156-

(8) K.Kumar;Journal of Math.Phys.,V-7,N°4,(1966),pp. 671-677.

(9) P.M. Morse-H.Feshbach; Methods of Theoretical Physics,Part 1, Mc. Graw-Hill-Kogakusha,caps.1,2.

(10) Sneddon,The Mathematics of Physics & Chemistry,Oliver & Boyd,cap.

(11) E.D. Rainville,Special Functions,Mac Millan,(1960).

(12) Tables of Racah coefficients,Pan-Press,co.,Tokyo,( ),cap. .