

**Universidad Nacional del Sur**

**Tesis de Doctor en Física.**

**Bases Correlacionadas Aplicadas al Estudio de  
Sistemas de Tres Cuerpos Generales.**

**Lic. Karina Viviana Rodriguez**

**Bahía Blanca**

**Argentina**

**2010**

# Indice

<b>Prefacio</b>	<b>6</b>
<b>Resumen</b>	<b>9</b>
<b>Abstract</b>	<b>11</b>
<b>Introducción</b>	<b>12</b>
<b>1 El problema de tres cuerpos</b>	<b>18</b>
1.1 Existencia de soluciones y condiciones de cúspide. . . . .	19
1.2 Separabilidad y sistema de coordenadas. . . . .	21
<b>2 Cálculo de funciones de onda.</b>	<b>24</b>
2.1 Descripción del Método . . . . .	24
2.2 Bases de funciones con correlación angular. . . . .	26
2.3 Definición de un problema equivalente a un problema de autovalores. . . . .	26
2.4 Estados S. . . . .	27
2.5 Conclusiones . . . . .	28
<b>3 Funciones de onda tipo Hylleraas con las condiciones de cúspide correctas.</b>	<b>29</b>
3.1 Funciones de onda propuestas . . . . .	29
3.1.1 Solución para $D_0$ , $\phi_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12})$ . . . . .	30
3.1.2 Solución para $D_1$ , $\Omega_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12})$ . . . . .	35
3.2 Bases correlacionadas . . . . .	36
3.3 Conclusiones . . . . .	37

---

<b>4</b>	<b>Resultados para los estados S del átomo de Helio y su serie isoelectrónica.</b>	<b>38</b>
4.1	Funciones y notación . . . . .	39
4.2	Estado fundamental . . . . .	42
4.2.1	Funciones analíticas . . . . .	42
4.2.2	Funciones semianalíticas . . . . .	49
4.2.3	Funciones numéricas . . . . .	54
4.3	Estados Excitados S . . . . .	57
4.3.1	Funciones numéricas . . . . .	58
4.4	Conclusiones . . . . .	63
<b>5</b>	<b>Sistemas atómicos de tres cuerpos con masa nuclear finita.</b>	<b>64</b>
5.1	Estado Fundamental. . . . .	65
5.1.1	Iones negativos ${}^{\infty}H^{-}, H^{-}, D^{-}, T^{-}$ y muonio $Mu^{-}$ . . . . .	66
5.1.2	Sistemas exóticos . . . . .	69
5.1.3	Sistemas helioides . . . . .	73
5.1.4	Sistemas litioides . . . . .	76
5.2	Estado Fundamental y Estados Excitados S con $\Omega = 1$ . . . . .	78
5.3	Conclusiones . . . . .	82
<b>6</b>	<b>Electrones de la capa K para átomos neutros</b>	<b>83</b>
6.1	Teoría . . . . .	83
6.2	Resultados . . . . .	84
6.3	Conclusiones . . . . .	87
<b>7</b>	<b>Funciones de onda para diversos sistemas.</b>	<b>89</b>
7.1	Definiciones de las funciones estudiadas. . . . .	90
7.1.1	Funciones Sofisticadas . . . . .	90
7.1.2	Funciones Intermedias . . . . .	91
7.1.3	Funciones Sencillas . . . . .	92

---

7.1.4	Funciones propuestas. . . . .	94
7.2	Resultados . . . . .	96
7.2.1	Sistemas en la aproximación de masa nuclear infinita . . . . .	96
7.2.2	Sistemas con masa nuclear finita . . . . .	101
<b>8</b>	<b>Tablas con normalizaciones y coeficientes de las diferentes funciones presentadas.</b>	<b>105</b>
8.1	Sistemas con masa nuclear infinita . . . . .	105
8.1.1	$H^-$ . . . . .	105
8.1.2	$He$ . . . . .	109
8.1.3	Serie isoelectrónica . . . . .	112
8.2	Sistemas reales . . . . .	115
	<b>Conclusiones</b>	<b>118</b>
	<b>Apéndices</b>	<b>123</b>
	<b>A Operadores y Momento Angular</b>	<b>124</b>
	<b>Referencias</b>	<b>126</b>

# Indice de Figuras

1.1	Especificación de las coordenadas relativas . . . . .	22
3.1	Potencial de Eckart $V_E(r_{12})$ . . . . .	32
3.2	Comparación de los factores de correlación . . . . .	33
4.1	Energía de la función GR2nc . . . . .	51
4.2	Energía y coeficientes de la función GR2, calculados como funciones de la carga nuclear. También se incluyen los valores variacionales. . . . .	53
5.1	Valor medio de la energía y valor medio de las distancias electrón-núcleo y electrón-electrón, como función de la masa nuclear $m_3$ para sistemas exóticos. . . . .	71

# Prefacio

Esta Tesis se presenta como parte de los requisitos para optar al grado Académico de Doctor en Física, de la Universidad Nacional del Sur y no ha sido presentada previamente para la obtención de otro título en esta Universidad u otra. La misma contiene los resultados obtenidos en investigaciones llevadas a cabo en el ámbito del Departamento de Física durante el período del 7 de abril del 2006 y el 23 de junio del 2010, bajo la dirección del Dr. Gustavo Gasaneo y el Dr. Darío Mitnik del Instituto de Astronomía y Física del Espacio.

*Dedico estas páginas a la memoria de:*

*EMILIA, mi mamá, un ejemplo de lucha y fortaleza. Su mirada celeste  
cielo está en mi corazón.*

*AEDDA, mi querida suegra, una mujer muy especial a quien extraño mucho.*

# Agradecimientos

El empezar a escribir estas palabras de agradecimiento significa que he llegado al final de un largo camino. Me impresiona darme cuenta todos los cambios que han habido en mi vida en el transcurso de este recorrido.

Quiero agradecer a todas las personas que de una manera u otra me han ayudado en este proceso. En primer lugar quiero darle las gracias a mi director Dr. Gustavo Gasaneo por su constante apoyo. No sólo por contagiarme su entusiasmo por hacer física sino también por acompañarme y comprenderme en lo personal. A mi co-director Dr. Darío Mitnik por todo lo que me ha enseñado. A mis amigos con quienes he recorrido distintos tramos de este camino: a Yanina, por los días enteros de lucha compartida con los programas computacionales, a Seba por compartir conmigo el inicio de nuevos sueños y proyectos, a Claudia por el tiempo y los té compartidos en nuestra oficina, en los días buenos y malos, a Ana y Juan por los congresos y discusiones de las que hemos participado juntos y a la ayuda internacional del Dr. Ugo Ancarani con quien ha sido y seguirá siendo un gusto trabajar.

A mi esposo Aldo, con quien compartimos día a día el proyecto más importante de nuestras vidas: nuestra familia. Con lo que todo esto implica: acompañarnos, ayudarnos y complementarnos. A mis hijos Margarita, Agustín y Karina a quienes amo profundamente, por haberme otorgado el título más honorífico que puedo conseguir: el de mamá. Por ser cariñosos y buenos hijos. A mi papá y a mi hermana por estar siempre. Y al resto de mi familia quienes son fundamentales en mi vida.

Finalmente quiero agradecer al CONICET y a la Universidad Nacional del Sur por darme la posibilidad de dedicarme en forma casi exclusiva a este trabajo durante su desarrollo.

# Resumen

Los sistemas de tres cuerpos tienen un rol fundamental en la Física Atómica. Han sido motivo de estudio por muchos años y lo siguen siendo hoy por ser el sistema cuántico más simple con las mismas dificultades de resolución que los sistemas complejos. La dinámica de los sistemas se describe mediante la ecuación de Schrödinger. Esta es una ecuación diferencial que no es separable cuando se incluyen las interacciones entre todas las partículas. Debido al grado de dificultad que esto representa se desarrollaron diversos métodos para la obtención de soluciones aproximadas. Estas soluciones deben ser funciones suaves y regulares, incluso en aquellos puntos del espacio en los cuales los potenciales divergen.

En esta Tesis proponemos una metodología para hallar soluciones aproximadas para los estados ligados de sistemas de tres partículas cargadas. El método se basa en la construcción de la función de onda como una sumatoria de configuraciones correlacionadas. Cada configuración está formada por el producto de dos factores. El primero de ellos,  $\phi$ , diagonaliza los términos diagonales de la energía cinética y los potenciales de interacción. Este factor  $\phi$ , a su vez, está formado por el producto de funciones hidrogénicas y un factor de distorsión  $\chi$  que depende explícitamente de la coordenada asociada a la distancia entre las partículas cuyas interacciones son repulsivas. El segundo factor,  $\Omega$ , complementa a  $\phi$  resolviendo los términos no diagonales de la energía cinética. Proponemos dos bases de funciones de onda aproximadas, GR y C3, que se diferencian en el factor de distorsión  $\chi$ . En la primera base se usan funciones que incluyen el apantallamiento inter-electrónico producido por el núcleo sobre los electrones. En la segunda se utiliza una función obtenida por continuación analítica de la función C3, usada para el tratamiento del continuo de tres cuerpos.

La metodología que proponemos nos permite: i) construir funciones de onda de prueba simples y precisas que satisfacen las condiciones de cúpide de doble coalescencia, ii) obtener un conjunto ortogonal de estados que describen la estructura atómica del sistema, y iii)

---

transformar la ecuación de Schrödinger en un conjunto de ecuaciones algebraicas para los coeficientes de la expansión.

# Abstract

The three-body systems play a fundamental role in Atomic Physics. They have been studied from many years because they are the simplest of many quantum systems having the complexity of many-body problems. The dynamic of these systems is described by the Schrödinger equation. When the attractive and repulsive interactions between the particles are included, this differential equation is non-separable. Therefore, many methods have been developed in order to obtain approximated solutions. These solutions must be regular in all the space, included those points where the Coulomb potentials diverge.

In this Thesis we propose a methodology to obtain approximated bound state solutions to the problem of three charged particles with general masses. The method is based on a decomposition of the three-body wave function in a sum of doubly correlated configurations. Each configuration is formed by a product of two factors. The first of them,  $\phi$  diagonalizes the diagonal terms of the kinetic energy and the interaction potentials. It is formed by the product of two body atomic functions, and a distortion factor  $\chi$ , which depends explicitly on the coordinate associated with the distance between the particles with repulsive interactions. The second factor is proposed as the complement to the first to solve the non-diagonal components of the kinetic energy. We propose two approximated wave function basis, GR and C3, with different distortion factor. The functions of the first proposal include the screening of the nucleus over the electrons. The second uses a function obtained by the analytical continuation of the C3 function, used to treat the continuous spectrum of three-body.

The methodology proposed here allows us to: i) construct simple and precise wave functions with the correct cusp conditions, ii) obtain a set of orthogonal states that describe the system, iii) convert the Schrödinger equation in a set of algebraic equations for the coefficients.

# Introducción

La gran revolución en la física, que tuvo lugar durante las primeras décadas del siglo XX, condujo a un detallado entendimiento de la forma en que los átomos y moléculas pueden absorber y emitir luz y otra radiación (su espectro). En consecuencia, comprender la relación entre el espectro y la estructura del sistema resultó ser muy importante para el desarrollo de distintas ramas de la física.

Para estudiar la estructura de los elementos se utilizan herramientas desarrolladas en la mecánica cuántica. Una de estas herramientas es la ecuación de Schrödinger, una ecuación diferencial de segundo orden cuya solución representa la función de onda del sistema. Sólo se conoce la solución exacta de esta ecuación para sistemas de dos partículas. Un ejemplo de estos sistemas, es el átomo de Hidrógeno (H) que es el único de los más de 118 elementos de la tabla periódica para el que se conoce una función de onda atómica analítica. En el caso de sistemas con más partículas los términos de interacción han hecho imposible, hasta el momento, obtener una solución exacta y cerrada. A pesar de ello, el problema es de gran relevancia en la Física Atómica y Molecular. En particular, el problema de tres cuerpos muestra ciertas propiedades cualitativas que no están presentes en el caso de dos cuerpos, pero que sí aparecen en problemas que involucran cuatro o más partículas.

El estudio de distintos átomos y moléculas de tres cuerpos ha sido motivo de muchos trabajos de investigación que han dado origen a diversas propuestas de funciones de onda aproximadas. Estas propuestas pueden organizarse en dos grandes grupos: los que incluyen explícitamente todas las coordenadas interpartículas y los que sólo incluyen las coordenadas asociadas a las distancias entre las partículas cuyas interacciones son atractivas. Se puede comprobar que las funciones construídas con los métodos del primer grupo presentan una convergencia más rápida hacia los valores exactos de las diferentes magnitudes (como la energía) que aquellas que no incluyen todas las coordenadas relativas. Como ejemplos del

primer grupo podemos mencionar el método de semiseparabilidad (*Pluvinage 1950, Dulieu et. al 1989, Le Sech 1997*), el método transcorrelacionado (*Boys y Handy 1969, Umezawa et. al 2003, 2006*), etc. y son ejemplos del segundo grupo los métodos de Hartree-Fock (*Fock 1930, 1954*), Hartree-Fock multiconfiguracional (*Thakkar y Koga 1994*) y Configuración Interacción (*Bransden y Joachain 2003*).

Para poder agrupar las distintas funciones existentes en la literatura, implementamos un método de clasificación que consiste en denominar a las funciones como sofisticadas, intermedias o sencillas. Esta clasificación se basa esencialmente en la relación que cada función tiene entre el número de términos que incluye cada tipo y la calidad de la función de onda obtenida. La calidad de la función expresa la medida en que la función propuesta describe o incluye las distintas propiedades de la solución exacta.

Si bien no se conocen las autofunciones exactas del Hamiltoniano del problema de tres cuerpos, se conocen bien sus propiedades. Un conocimiento profundo de estas propiedades permite construir funciones de onda aproximadas que las incluyan y acelerar así la convergencia. Estas características a las que hacemos mención son de tipo global y local. Ejemplos de las propiedades globales son: el valor medio de la energía, la relación del virial entre la energía cinética y potencial y el comportamiento asintótico. Como ejemplo de propiedades locales se destacan los comportamientos de la función cuando las partículas se encuentran a distancia nula (conocidas como condiciones de cúspide de coalescencia o condiciones de Kato (*Kato 1951a, 1951b, 1957*)). Construir funciones de onda que satisfagan todas estas propiedades simultáneamente no es una tarea sencilla.

Basándonos en nuestro sistema de clasificación, realizamos a continuación una descripción somera de cada tipo de función, considerando funciones que incluyen explícitamente todas las coordenadas interpartículas.

**Funciones sofisticadas:** son funciones que se obtienen mediante cálculos altamente sofisticados que requieren de cientos o miles de parámetros variacionales. Resultan ser altamente precisas en el cálculo del valor de la energía de los estados fundamental y excitados. Si bien verifican las condiciones de Kato numéricamente, no cumplen con estas condiciones de manera formal. En esta dirección y a fines de los años 50 se destacó el trabajo de Pekeris (*Pekeris 1958*) al que luego siguieron *Thakkar 1994, Drake 1994, 2005, Goldman 1998, Korobov 2000, 2002 y Schwartz 2006*, quienes obtuvieron el valor de la energía media del estado

fundamental del He con 13, 17, 18, 19, 22, 25 y 36 cifras significativas, respectivamente.

**Funciones intermedias:** son funciones que siguen siendo altamente correlacionadas y precisas pero con un número de parámetros menor (no más de 30 o 40). No tienen el comportamiento asintótico correcto y fallan en la descripción de propiedades locales, tales como las condiciones de cúspide en los puntos de doble coalescencia. Dentro de esta clasificación se encuentran las funciones desarrolladas por Hylleraas y Undheim en los años treinta, las de Chandrasekhar y Herzberg, y las de Kinoshita en los años 50 (*Chandrasekhar et al. 1953, 1955, Kinoshita 1957*).

**Funciones sencillas:** son funciones con dos o tres parámetros variacionales, obviamente no tan precisas como las sofisticadas e intermedias, pero que tienen una expresión analítica sencilla. Esto a su vez permite, en general, obtener expresiones analíticas de valores medios de distintos operadores. Por esta razón, este tipo de funciones no sólo son útiles desde un punto de vista científico sino también desde lo pedagógico. En muchos casos estas funciones se construyen de manera tal que satisfagan algunas condiciones de la solución exacta. En esta línea de trabajo se han destacado las propuestas de funciones realizadas por Bonham y Kohl en los años 60, y las de Myers, Patil y Le Sech en la década del noventa (*Bonham y Kohl 1966, Myers et al. 1991, Le Sech 1990, 1997, Patil 2004*).

La motivación para el desarrollo de los distintos tipos de funciones aproximadas reside principalmente en, i) la descripción cada vez más precisa de la estructura del sistema que se quiere estudiar; ii) su uso en el estudio de diferentes procesos físicos como lo son los procesos de colisiones.

Las funciones sofisticadas son utilizadas para calcular valores de energía con alta precisión, que son necesarias para calcular correcciones perturbativas de alto orden en estructuras atómicas o moleculares. Sin embargo, por su complejidad es muy dificultosa su aplicación, por ejemplo en procesos de colisiones.

Las funciones intermedias, por otra parte han sido utilizadas para realizar cálculos de diferentes procesos como doble fotoionización, simple ionización y doble ionización de Helio por impacto de electrones entre otros (*Joulakian y Dal Cappello 1993, Kheifets y Bray 1998, 2004, Jones et al. 2004, Ancarani et al. 2004, 2008*).

Sin embargo, para hacer factible la evaluación de las secciones eficaces de estos procesos utilizando funciones intermedias, ha sido necesario el uso de computadoras muy poderosas

o clusters de procesadores. Por este motivo, obtener funciones sencillas y precisas, que cumplan con propiedades de la función exacta, es de mucha utilidad, especialmente para los cálculos de colisiones y la extensión de éstos a sistemas y procesos más complejos.

El primer objetivo de esta Tesis consiste en proponer un método para la construcción de funciones de onda sencillas, precisas y con las condiciones de cúspide correctas para el estado fundamental y los estados excitados de sistemas de tres cuerpos con masas generales. El método se basa en escribir las funciones de onda como producto de dos factores: el primero diagonaliza los términos diagonales de la energía cinética y los potenciales de interacción, el segundo permite acelerar la convergencia de la función de onda a partir de la inclusión de mayor correlación radial y angular en la propuesta. El segundo objetivo consiste en aplicar las funciones obtenidas, en el cálculo de energías medias y otras cantidades físicas para distintos sistemas.

Organizamos esta Tesis de la siguiente manera. La parte I, incluye hasta el capítulo 6 y la parte II, los capítulos 7 y 8. En el primer capítulo presentaremos algunas generalidades para el tratamiento del problema de tres cuerpos, estudiaremos la ecuación diferencial que lo rige, la escribiremos en las coordenadas relativas, y estudiaremos algunas propiedades de sus soluciones. En el segundo capítulo propondremos un método para obtener soluciones para sistemas de tres cuerpos de masas generales y momento angular general. En el capítulo tercero proponemos funciones de onda para estados S ( $L=0$ ), con una estructura que favorece la comprensión de la física del problema. Presentaremos dos tipos de funciones diferenciadas por el factor de correlación. El primer tipo incluye sólo parámetros lineales, que permiten resolver el problema como un problema de autovalores. El segundo tipo incluye, además, parámetros no-lineales. En el cuarto capítulo calcularemos propiedades locales y globales mediante cálculos analíticos y numéricos. En los capítulos 4 y 5 calcularemos la energía del estado fundamental y algunos estados excitados, para el átomo de He y su serie isoelectrónica, y para sistemas atómicos de tres cuerpos de masas generales. En el sexto capítulo aplicamos nuestras funciones al estudio de electrones en la capa K de átomos neutros.

La parte II contiene dos capítulos. En el séptimo capítulo realizamos un compendio sistemático de todas las funciones mencionadas en la parte I. Allí se catalogan y ordenan las funciones según su precisión y se comparan diversas características. Y en el octavo capítulo se presentan tablas detalladas con los valores de los coeficientes y las normalizaciones compi-

ladas de la literatura. También presentamos detalladamente los coeficientes de las funciones que proponemos en este trabajo. Finalmente en las conclusiones resumimos lo estudiado y aportado a lo largo de esta Tesis.

# Parte I

# Capítulo 1

## El problema de tres cuerpos

Vamos a considerar el caso general de tres partículas cargadas de masa  $m_1$ ,  $m_2$  y  $m_3$  y cargas  $Z_1$ ,  $Z_2$  y  $Z_3$ , respectivamente. La ecuación de Schrödinger no relativista e independiente del tiempo es:

$$H\Psi_{tot} = E_{tot}\Psi_{tot}, \quad (1.1)$$

donde  $H = T_{tot} + V$  es el Hamiltoniano del sistema,  $T_{tot}$  el operador energía cinética,  $V$  el potencial y  $E_{tot}$  la energía del mismo. Esta es una ecuación diferencial de segundo orden en derivadas parciales. Dado que el sistema está libre de fuerzas externas la cantidad de movimiento del centro de masa (cm) se conserva. Desde el punto de vista de la mecánica cuántica esto implica que existen dos cantidades de movimiento del sistema que se conservan. La dirección del momento del centro de masa  $\hat{K}_{cm}$  y su módulo  $K_{cm} = \sqrt{2m_t E_{cm}}$  pueden ser elegidas como cantidades que conmutan con el Hamiltoniano  $H$ , donde  $m_{tot}$  es la masa total del sistema y  $E_{cm}$  representa la energía del centro de masa. La existencia de cantidades que se conservan está directamente asociada con la separabilidad de la ecuación (*Miller 1977*). De esta manera, es factible proponer una función de onda  $\Psi_{tot}$  como producto de dos funciones, la primera,  $\Phi$ , como función del vector posición del centro de masa,  $\mathbf{R}$ ; y la segunda,  $\Psi$ , expresada en función de las coordenadas internas

$$\Psi_{tot} = \Phi\Psi \quad (1.2)$$

Reemplazando la  $\Psi_{tot}$ , dada por (1.2), en (1.1) se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$-\frac{1}{2m_{tot}}\nabla_R^2\Phi(\mathbf{R}) = E_{cm}\Phi(\mathbf{R}) \quad (1.3)$$

$$[T + V]\Psi = E\Psi \quad (1.4)$$

donde  $E_{tot} = E_{cm} + E$  y  $T_{tot} = T_{cm} + T$ . La ecuación (1.3) muestra que el centro de masa se mueve como una partícula libre:

$$\Phi(\mathbf{R}) = N_{cm}e^{i\mathbf{K}_{cm}\cdot\mathbf{R}} \quad (1.5)$$

con una masa igual a la masa total del sistema y una energía cinética  $E_{cm}$ . Por otro lado, la ecuación (1.4) describe el movimiento relativo de las partículas con una energía asociada,  $E$ .

En esta Tesis nos concentramos en el estudio de las soluciones de la ecuación (1.4) correspondientes a energías negativas. En las siguientes secciones estudiaremos las características de esta ecuación.

## 1.1 Existencia de soluciones y condiciones de cúspide.

En 1951, *Kato (1951a, 1951b)* demostró que la ecuación de Schrödinger para un conjunto finito de partículas que interactúan entre sí a través de potenciales coulombianos, tiene solución. Es decir, que todo hamiltoniano asociado a átomos, moléculas o iones tiene un conjunto completo de autofunciones del espectro discreto y/o continuo.

Habiéndose establecido la existencia de las soluciones, surge inmediatamente la pregunta de la regularidad de las mismas en los distintos puntos singulares de los potenciales. En trabajos posteriores, *Kato (1957)*, estudió el comportamiento de las soluciones de la ecuación de ondas del problema de N-cuerpos. Demostró que bajo ciertas condiciones sobre los potenciales, las soluciones de la ecuación de Schrödinger son acotadas y continuas y además tienen derivada de primer orden, excepto posiblemente en las singularidades del potencial. Encontró un conjunto de condiciones que deben satisfacer las soluciones del problema. Esas condiciones definen el tipo de no-analiticidad de la función de onda. Debemos tener en

cuenta que la regularidad de la función de onda y su derivada se asocia con la regularidad (continuidad en general) de las magnitudes medibles de un sistema. En conclusión Kato demostró que la función de onda (y su gradiente) deben ser lo suficientemente regulares como para permitir que la densidad de probabilidad sea una función suave y siempre bien definida. De esta manera las magnitudes físicamente medibles también estarán bien definidas.

### Condiciones de cúspide:

Las condiciones de cúspide surgen como consecuencia que la interacción coulombiana entre partículas cargadas diverge cuando la distancia entre ellas es nula. En el caso que el número de partículas interactuando sea dos, estas condiciones se conocen con el nombre de condiciones de cúspide de doble coalescencia. Como resultado, debe existir una divergencia compensatoria en la energía cinética de manera que la suma entre las energías cinética y potencial, sea finita. Esta divergencia se manifiesta como una cúspide en la función de onda cuando la separación entre las partículas es cero. La función de onda presenta así un conjunto de discontinuidades en la derivada en los puntos en que cada uno de los potenciales presenta divergencia. *Kato (1951)* concluyó que en el límite en el que dos partículas de masas  $m_i$  y  $m_j$  y cargas  $Z_i$  y  $Z_j$  se acercan entre ellas y el resto de las distancias a otras partículas permanecen mayores que cero, se tiene que cumplir:

$$\left( \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial r_{ij}} \right)_{\mathbf{r}_{ij}=0} = Z_i Z_j \mu_{ij} \Psi(\mathbf{r}_{ij} = 0) \quad (1.6)$$

donde  $\mu_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$  es la masa reducida del subsistema de dos partículas y  $\bar{\Psi}$  es el valor promedio de la función de onda  $\Psi$  tomado sobre una esfera infinitesimalmente pequeña centrada en  $r_{ij} = 0$ .

Existen singularidades que envuelven a más de dos partículas, por ejemplo el caso del átomo de helio cuando los dos electrones se acercan simultáneamente al núcleo. El estudio de átomos multielectrónicos y sus puntos de coalescencia puede encontrarse en los siguientes trabajos: *Hoffmann-Ostehhof et al. 1981, 1992, Johnson 1981, Arias Saavedra y otros 1994, Heilmann et al. 1995, Gálvez et al. 1995.*

## 1.2 Separabilidad y sistema de coordenadas.

Si bien todo el análisis desarrollado por Kato es importante pues brinda un marco matemático para la búsqueda de funciones de onda que resuelvan la ecuación de Schrödinger, éste no presenta una metodología matemática para encontrar estas soluciones.

Desde el punto de vista físico la separabilidad de una ecuación es la forma de asociar una magnitud medible de la naturaleza que se conserva en el tiempo, con una propiedad matemática. Cuando se trata el problema de tres cuerpos desde un sistema de laboratorio resulta evidente la posibilidad de separar la dinámica del centro de masa de la dinámica interna, observada desde el mismo centro de masas del sistema. Esta separación está asociada al hecho de que dicho centro de masas está libre de fuerzas externas.

El Hamiltoniano del problema de los tres cuerpos es no-separable. Por esta razón, para encontrar la solución se aplican métodos aproximados de resolución mediante la definición de modelos. El objetivo de muchos estudios de sistemas de tres o más cuerpos ha sido poder encontrar soluciones aproximadas introduciendo explícitamente la interacción entre todas las partículas. Se han aplicado distintos métodos para encontrar soluciones aproximadas, de gran utilidad para el estudio de las características generales del sistema. El tipo de aproximación que se utiliza, determina la elección del sistema de coordenadas con el cual trabajar.

El operador energía cinética  $T$  en coordenadas cartesianas tiene la siguiente forma:

$$T = -\frac{1}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{1}{2m_2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2m_3}\nabla_3^2 \quad (1.7)$$

donde las  $m_i$  con  $i = 1, 2, 3$ , son las masas de las tres partículas. Sin embargo, este no es el sistema más adecuado para visualizar la física del sistema. Por esta razón lo expresamos en los vectores relativos  $\mathbf{r}_{31}$ ,  $\mathbf{r}_{32}$  y  $\mathbf{r}_{12}$ , con los cuales el operador  $T$  se escribe (*Frolov y Smith 1996*),

$$T = -\frac{1}{2\mu_{32}}\nabla_{32}^2 - \frac{1}{2\mu_{31}}\nabla_{31}^2 - \frac{1}{2\mu_{12}}\nabla_{12}^2 - \frac{1}{m_3}\nabla_{32}\cdot\nabla_{31} - \frac{1}{m_2}\nabla_{32}\cdot\nabla_{12} - \frac{1}{m_1}\nabla_{12}\cdot\nabla_{31} \quad (1.8)$$

donde las masas  $\mu_{k,n} = \frac{1}{m_k} + \frac{1}{m_n} = \frac{m_k+m_n}{m_k m_n}$  con  $k = 1, 2, 3$  y  $n(\neq k) = 1, 2, 3$ . La ecuación de Schrödinger resulta ser función de 9 variables (asociadas de a tres a cada uno de los vectores  $\mathbf{r}_{ij}$ ) de las cuales sólo 6 son independientes. Dado que hay un número infinito de sistemas

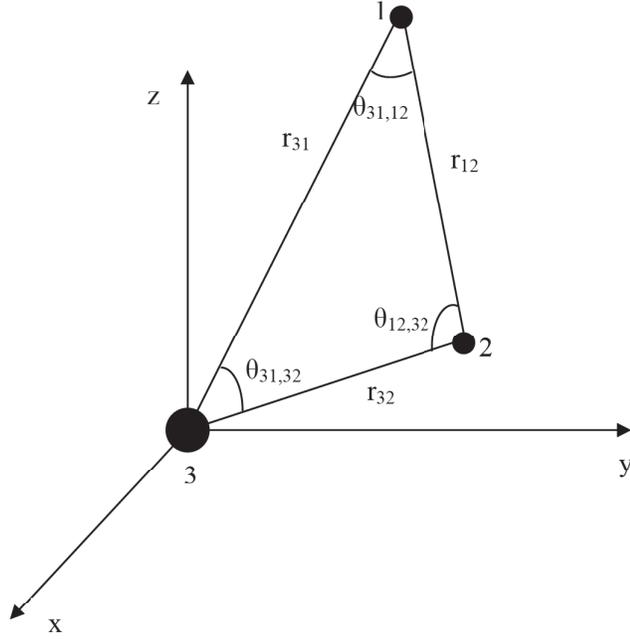


Figura 1.1: Especificación de las coordenadas relativas

de coordenadas, cuando se comienza el estudio de un sistema en particular se debe decidir cuál de dichos sistemas es el más conveniente.

Las seis coordenadas independientes se pueden separar en 3 coordenadas externas, que describen la orientación del triángulo formado por tres partículas; y tres coordenadas internas que especifican el tamaño y la forma del triángulo. Se han estudiado varios tipos de coordenadas internas, y en el momento de elegir cuál utilizar deben considerarse las características particulares de cada sistema.

En esta Tesis trabajamos en coordenadas relativas porque estas son las coordenadas que permiten observar de forma más directa las propiedades físicas de las autofunciones, en sistemas de tres cuerpos. De las 9 coordenadas relativas que resultan de  $\mathbf{r}_{31}$ ,  $\mathbf{r}_{32}$  y  $\mathbf{r}_{12}$ , tomaremos como independientes los módulos que están determinados por las relaciones  $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  ( $r_{31} \in [0, +\infty)$ ,  $r_{32} \in [0, +\infty)$  y  $|r_{32} - r_{31}| \leq r_{12} \leq r_{32} + r_{31}$  (iguales desigualdades existen para  $r_{31}$  y  $r_{32}$ )); y tres ángulos de Euler (*Yang et al. 1997*). De la figura (1.1) y con el teorema del coseno se puede obtener:

$$\cos(\theta_{32,31}) = \frac{r_{31}^2 + r_{32}^2 - r_{12}^2}{2 r_{31} r_{32}} = \frac{\mathbf{r}_{32} \cdot \mathbf{r}_{31}}{r_{32} r_{31}} \quad (1.9)$$

$$\cos(\theta_{32,12}) = \frac{r_{32}^2 + r_{12}^2 - r_{31}^2}{2 r_{32} r_{12}} = \frac{\mathbf{r}_{32} \cdot \mathbf{r}_{12}}{r_{32} r_{12}} \quad (1.10)$$

$$\cos(\theta_{31,12}) = \frac{r_{31}^2 + r_{12}^2 - r_{32}^2}{2 r_{31} r_{12}} = \frac{\mathbf{r}_{31} \cdot \mathbf{r}_{12}}{r_{31} r_{12}}. \quad (1.11)$$

Como coordenadas externas, por lo general, se eligen los ángulos de Euler  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  (ver *Edmonds A. R. 1960*) que especifican la orientación de las partículas respecto de un sistema de coordenadas fijo. Estos representan rotaciones alrededor de ejes mutuamente perpendiculares, fijos al cuerpo. En las coordenadas elegidas, el Hamiltoniano resulta:

$$\begin{aligned} H = & \left[ -\frac{1}{2\mu_{32}} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{32}^2} + \frac{2}{r_{32}} \frac{\partial}{\partial r_{32}} + \frac{1}{r_{32}^2} \nabla_{\Omega_{32}}^2 \right) + V_{32} \right] + \\ & \left[ -\frac{1}{2\mu_{31}} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{31}^2} + \frac{2}{r_{31}} \frac{\partial}{\partial r_{31}} + \frac{1}{r_{31}^2} \nabla_{\Omega_{31}}^2 \right) + V_{31} \right] + \\ & \left[ -\frac{1}{2\mu_{12}} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} + \frac{1}{r_{12}^2} \nabla_{\Omega_{12}}^2 \right) + V_{12} \right] + \\ & \left[ -\frac{1}{m_3} \left( \frac{\mathbf{r}_{32} \cdot \mathbf{r}_{31}}{r_{32} r_{31}} \frac{\partial^2}{\partial r_{32} \partial r_{31}} + \frac{\mathbf{r}_{32}}{r_{32}} \frac{\partial}{\partial r_{32}} \left( \frac{1}{r_{31}} \nabla_{\Omega_{31}} \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{1}{r_{32}} \nabla_{\Omega_{32}} \left( \frac{\mathbf{r}_{31}}{r_{31}} \frac{\partial}{\partial r_{31}} \right) + \frac{1}{r_{32} r_{31}} \nabla_{\Omega_{32}} \cdot \nabla_{\Omega_{31}} \right) \right] + \\ & \left[ -\frac{1}{m_2} \left( \frac{\mathbf{r}_{32} \cdot \mathbf{r}_{12}}{r_{32} r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_{32} \partial r_{12}} + \frac{\mathbf{r}_{32}}{r_{32}} \frac{\partial}{\partial r_{32}} \left( \frac{1}{r_{12}} \nabla_{\Omega_{12}} \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{1}{r_{32}} \nabla_{\Omega_{32}} \left( \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right) + \frac{1}{r_{32} r_{12}} \nabla_{\Omega_{32}} \cdot \nabla_{\Omega_{12}} \right) \right] + \\ & \left[ -\frac{1}{m_1} \left( \frac{\mathbf{r}_{31} \cdot \mathbf{r}_{12}}{r_{31} r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_{31} \partial r_{12}} + \frac{\mathbf{r}_{31}}{r_{31}} \frac{\partial}{\partial r_{31}} \left( \frac{1}{r_{12}} \nabla_{\Omega_{12}} \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{1}{r_{31}} \nabla_{\Omega_{31}} \left( \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right) + \frac{1}{r_{31} r_{12}} \nabla_{\Omega_{31}} \cdot \nabla_{\Omega_{12}} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.12)$$

# Capítulo 2

## Cálculo de funciones de onda.

### Introducción

El objetivo de este capítulo es introducir un método para construir funciones de onda sencillas con las condiciones de cúspide correctas, para sistemas de tres cuerpos de masas generales. Consiste en proponer la solución a la ecuación de Schrödinger (1.4) como una combinación lineal de configuraciones con funciones de onda con correlación angular.

### 2.1 Descripción del Método

Cuando en la ecuación de Schrödinger (1.4) se reemplaza la energía cinética por su expresión en coordenadas relativas (ecuación (1.8)), y el potencial  $V$  por la suma de tres potenciales  $V = V_{32} + V_{31} + V_{12}$ , resultan las siguientes expresiones:

$$[D_0 + D_1 - E_c]\Psi(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) = 0, \quad (2.1)$$

donde los operadores  $D_0$  y  $D_1$  están dados por

$$D_0 \equiv \left[ -\frac{1}{2\mu_{31}} \nabla_{31}^2 + V_{31} - E_{31} \right] + \left[ -\frac{1}{2\mu_{32}} \nabla_{32}^2 + V_{32} - E_{32} \right] + \quad (2.2)$$

$$\left[ -\frac{1}{2\mu_{12}} \nabla_{12}^2 + V_{12} - E_{12} \right],$$

$$D_1 \equiv \frac{Z_3 Z_1}{r_{31}} - V_{31} + \frac{Z_3 Z_2}{r_{32}} - V_{32} + \frac{Z_1 Z_2}{r_{12}} - V_{12} - \frac{1}{m_3} \nabla_{32} \cdot \nabla_{31} - \frac{1}{m_2} \nabla_{32} \cdot \nabla_{12} - \frac{1}{m_1} \nabla_{21} \cdot \nabla_{31}. \quad (2.3)$$

La energía  $E$  está escrita como una suma de energías parciales  $E = E_0 + E_c$ , con  $E_0 = E_{31} + E_{32} + E_{12}$  y una energía de correlación  $E_c$ . El término  $D_0$  en la ecuación (2.1) no acopla las coordenadas, éste representa tres problemas de dos cuerpos. Los productos de los gradientes en el término  $D_1$  sumado a los términos que no fueron resueltos en el operador  $D_0$ , acoplan el movimiento de los pares de partículas y determinan que la ecuación resulte ser no-separable. En el caso que los potenciales  $V_{31}$ ,  $V_{32}$  y  $V_{12}$  sean los potenciales coulombianos ( $\frac{Z_3 Z_1}{r_{31}}$ ,  $\frac{Z_3 Z_2}{r_{32}}$  y  $\frac{Z_1 Z_2}{r_{12}}$  respectivamente), y el momento angular sea igual a cero, el operador  $D_1$  solo incluye las derivadas cruzadas.

Observando la ecuación (2.1), su forma sugiere como posible estructura para la función de onda el producto de dos factores: uno que resuelve exactamente la ecuación

$$D_0 \phi_\nu(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) = 0, \quad (2.4)$$

donde  $\nu$  representa los números cuánticos asociados a la resolución al problema. El otro factor tiene en cuenta el acoplamiento entre las coordenadas. En términos matemáticos la función de onda se puede escribir de la siguiente manera:

$$\Psi_\nu(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) = \phi_\nu(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) \Omega_\nu(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) \quad (2.5)$$

La solución de la ecuación (2.4) es conocida porque es la solución de una ecuación separable en tres problemas de dos cuerpos, resolubles. Y una propuesta posible para la función  $\Omega_\nu(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12})$  es una serie de funciones del tipo:

$$\Omega_\nu(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) = \sum_{i,j,k \neq 1} c_{i,j,k}^{(\nu)} f_{1i}^{(\nu)}(\mathbf{r}_{31}) f_{2j}^{(\nu)}(\mathbf{r}_{32}) f_{3k}^{(\nu)}(\mathbf{r}_{12}) \quad (2.6)$$

## 2.2 Bases de funciones con correlación angular.

Una propuesta de solución aproximada a la ecuación de Schrödinger (2.1) consiste en una combinación lineal de distintas configuraciones atómicas. Está basado en la expansión de la función de onda en términos de un producto de funciones radiales de un electrón y armónicos esféricos para describir la parte angular. Este método es conocido como Configuración Interacción (CI) (ver *Bransden y Joachain 1990*). Tiene la característica que en las funciones involucradas no se incluye explícitamente la coordenada interelectrónica,  $r_{12}$ . Su eficiencia depende de tomar un número importante de términos en la suma y aún así los resultados que se obtienen tienen un punto de saturación.

En esa misma línea de trabajo definimos el método de *Configuración Interacción con Correlación Angular* (CICA), en el que escribimos la solución a la ecuación de Schrödinger (2.1) como una combinación lineal de configuraciones con funciones de onda con correlación angular, quedando la función de onda escrita de la siguiente manera:

$$\Psi = \sum_{l_1, l_2, n_1, n_2} c_{n_1, l_1, n_2, l_2} \Psi_{n_1, l_1, n_2, l_2}(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) \quad (2.7)$$

Las dos diferencias principales que se pueden observar entre el bien conocido y utilizado método CI y nuestra propuesta CICA es que: (i) el método CICA agrega correlación angular incluyendo explícitamente la coordenada  $r_{12}$  en la función de onda, (ii) la presencia de la función  $\Omega_{n_1, n_2, n_{12}}$  incluye tanto correlación angular como correlación radial, adicional. Ambas diferencias influyen directamente sobre la convergencia en los cálculos de energías y otras magnitudes físicas.

## 2.3 Definición de un problema equivalente a un problema de autovalores.

La resolución del problema consiste en obtener los coeficientes que definen la función de onda aproximada propuesta para cada sistema estudiado. Uno de los métodos más conocidos y que más se aplica es el método variacional que se puede utilizar para optimizar parámetros lineales y no-lineales. Cuando los coeficientes usados son lineales, las ecuaciones que resultan son equivalentes a las que se obtienen de un problema de autovalores (*Bransden y Joachain 2003*).

Esto implica que con la diagonalización del sistema de ecuaciones se obtienen directamente las energías y los coeficientes de un dado número de funciones bases.

Los coeficientes de la ecuación (2.7) se obtienen resolviendo el problema generalizado de autovalores

$$\sum_{l_1, l_2, n_1, n_2, i, j, k} \left[ \widehat{H} - E_c \widehat{S} \right] c_{i,j,k}^{(n_1, l_1, n_2, l_2)} = 0, \quad (2.8)$$

donde  $\widehat{S}$  es la matriz de solapamiento

$$S_{ijk,lmn}^{n_1, l_1, n_2, l_2, n'_1, l'_1, n'_2, l'_2} = \left\langle \Psi_{l,m,n}^{(n'_1, l'_1, n'_2, l'_2)}(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) \left| \Psi_{i,j,k}^{(n_1, l_1, n_2, l_2)}(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) \right. \right\rangle, \quad (2.9)$$

y  $\widehat{H}$  es la matriz Hamiltoniana

$$H_{ijk,lmn}^{n_1, l_1, n_2, l_2, n'_1, l'_1, n'_2, l'_2} = \left\langle \Psi_{l,m,n}^{(n'_1, l'_1, n'_2, l'_2)}(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) \left| \widehat{H} \left| \Psi_{i,j,k}^{(n_1, l_1, n_2, l_2)}(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12}) \right. \right. \right\rangle. \quad (2.10)$$

La energía del sistema  $E$  está dada por

$$E = E_{12} + E_{31} + E_{32} + \langle E_c \rangle \quad (2.11)$$

donde  $\langle E_c \rangle$  se obtiene directamente de la diagonalización en el caso que todos los coeficientes de las funciones sean lineales. En caso contrario, en el que hayan también coeficientes no-lineales, la energía  $\langle E_c \rangle$  resulta de la optimización de la ecuación (2.8) respecto de los mismos. El implementar un procedimiento de optimización implica que en el proceso de minimización se realiza un número grande de diagonalizaciones y esto significa una dificultad mayor en la resolución numérica.

## 2.4 Estados S.

En esta Tesis estudiaremos estados S. En este caso el operador energía cinética de la ecuación de Schrödinger de dimensión seis se reduce a 3 y da lugar a la ecuación de Hylleraas dado que se remueven los ángulos de Euler. De esta manera, los operadores  $D_0$  y  $D_1$  sólo dependen de las variables radiales de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
D_0 \equiv & \left[ -\frac{1}{2\mu_{31}} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{31}^2} + \frac{2}{r_{31}} \frac{\partial}{\partial r_{31}} \right) + V_{31} - E_{31} \right] \\
& + \left[ -\frac{1}{2\mu_{32}} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{32}^2} + \frac{2}{r_{32}} \frac{\partial}{\partial r_{32}} \right) + V_{32} - E_{32} \right] \\
& + \left[ -\frac{1}{2\mu_{12}} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right) + V_{12} - E_{12} \right]
\end{aligned} \tag{2.12}$$

$$D_1 \equiv \frac{Z_1 Z_3}{r_{31}} - V_{31} + \frac{Z_2 Z_3}{r_{32}} - V_{32} + \frac{Z_1 Z_2}{r_{12}} - V_{12} - \nu_1 t_1 \frac{\partial^2}{\partial r_{31} \partial r_{12}} - \nu_2 t_2 \frac{\partial^2}{\partial r_{32} \partial r_{12}} - \nu_3 t_3 \frac{\partial^2}{\partial r_{31} \partial r_{32}} \tag{2.13}$$

donde  $\nu_j = 1/m_j$  con  $(j = 1, 2, 3)$  y las expresiones de los  $t_i$ , con  $i = 1, 2, 3$  fueron presentadas en las ecuaciones (1.9), (1.10) y (1.11) de la sección 1.2.

$$t_1 = \frac{r_{31}^2 + r_{12}^2 - r_{32}^2}{2r_{31}r_{12}} \quad t_2 = \frac{r_{32}^2 + r_{12}^2 - r_{31}^2}{2r_{32}r_{12}} \quad t_3 = \frac{r_{31}^2 + r_{32}^2 - r_{12}^2}{2r_{31}r_{32}} \tag{2.14}$$

Dado que consideramos estados S, la función de onda propuesta como solución de la ecuación (2.1),  $\Psi_{n_1, l_1, n_2, l_2}(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{32}, \mathbf{r}_{12})$ , la nombramos  $\Psi_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12})$ .

## 2.5 Conclusiones

*Hemos propuesto un método de semiseparabilidad para obtener soluciones aproximadas para la ecuación (2.1). Esta metodología es aplicable para todo sistema de tres cuerpos con masas  $m_1, m_2$  y  $m_3$ . Es decir, que no sólo es aplicable al átomo de helio y su serie isoelectrónica, sino también a sistemas exóticos (Lin (1995)). La función de onda aproximada se escribe como el producto de dos factores. A diferencia de lo propuesto por Pluvinage, en nuestra metodología el primer factor resuelve exactamente la interacción atractiva y también la repulsiva. Este método se puede extender a sistemas de más cuerpos, ya que en todos los casos es posible separar la ecuación de Schrödinger en un término que no acople las coordenadas,  $D_0$ , y un término que sí las acople,  $D_1$ .*

# Capítulo 3

## Funciones de onda tipo Hylleraas con las condiciones de cúspide correctas.

### Introducción

Durante nuestra investigación hemos realizado un seguimiento de los trabajos publicados en el tema de sistemas de tres cuerpos. Del resultados de esta recopilación (sintetizada en el capítulo 7 de esta Tesis) se puede inferir que la búsqueda de funciones de onda aproximadas para sistemas de tres cuerpos, con las condiciones matemáticas y físicas de la función exacta, ha sido y sigue siendo de mucho interés.

Si bien en la literatura existen diversas propuestas de funciones de onda que cumplen con las condiciones de doble coalescencia, hasta ahora no hay funciones precisas como las de Hylleraas que las cumplan. En este capítulo presentamos un conjunto de funciones de tipo Hylleraas, para estados  $S$ , con dos alternativas para el factor de correlación angular y con la descripción correcta en los puntos de doble coalescencia.

### 3.1 Funciones de onda propuestas

Como ya hemos mostrado en el capítulo anterior, la función de onda que proponemos como solución a la ecuación de Schrödinger (1.4) a través de nuestro método (ecuación (2.5)) es el

producto de dos factores:

$$\Psi_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = \phi_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) \Omega_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) \quad (3.1)$$

A continuación detallamos y definimos cada uno de los factores.

### 3.1.1 Solución para $D_0$ , $\phi_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12})$

En esta sección estudiaremos el primer factor de la ecuación (3.1) que es solución de la ecuación

$$D_0 \phi_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = 0. \quad (3.2)$$

A partir de la definición de  $D_0$ , puede verse que la ecuación (3.2) no acopla las coordenadas, y por lo tanto es separable. Así, la función  $\phi_{n_1, n_2}$  se puede escribir como el producto de tres factores:

$$\phi_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = \varphi_{n_1}(r_{31}) \varphi_{n_2}(r_{32}) \chi(r_{12}) \quad (3.3)$$

Cuando los potenciales  $V_{31}$  y  $V_{32}$  son potenciales coulombianos,  $-Z/r_{31}$  y  $-Z/r_{32}$  respectivamente, las soluciones exactas de los dos primeros términos de la ecuación (3.2) son las funciones hidrogenoides:

$$\varphi_{n_j}(r_{ij}) = \sqrt{\frac{n_j!}{2n_j(n_j-1)!} \left(\frac{2Z\mu_{ij}}{n_j}\right)^3} e^{-\frac{Z\mu_{ij}}{n_j} r_{ij}} F\left[1-n_j, 2, 2\frac{Z\mu_{ij}}{n_j} r_{ij}\right] \quad (3.4)$$

donde  $F[a, b, z]$  es la función hipergeométrica confluyente, *Abramowitz 1970*, y  $E_{ij} = -\frac{\mu_{ij} Z^2}{2n_{ij}^2}$ , las energías correspondientes a sistemas coulombianos de dos cuerpos.

Con estos potenciales coulombianos los cuatro primeros términos de la ecuación (2.13) se cancelan entre sí, resultando:

$$D_1 \equiv \frac{1}{r_{12}} - V_{12} - \nu_1 t_1 \frac{\partial^2}{\partial r_{31} \partial r_{12}} - \nu_2 t_2 \frac{\partial^2}{\partial r_{32} \partial r_{12}} - \nu_3 t_3 \frac{\partial^2}{\partial r_{31} \partial r_{32}}. \quad (3.5)$$

**Factor de correlación angular,  $\chi(r_{12})$** 

Una forma posible de tener en cuenta los efectos de correlación es a partir de la introducción de una función que generalmente se conoce como función de tipo Jastrow (*Jastrow 1955*). Estas funciones son definidas de diferentes maneras, pero lo más usual es utilizar una función de prueba, que se pueda parametrizar de manera sencilla y que contenga información del sistema en estudio.

Si  $V_{12}$  es el potencial coulombiano,  $1/r_{12}$ ; la solución del tercer término de la ecuación (3.2) es la solución coulombiana del continuo, función de Pluvinage:

$$\chi_P(\beta, r_{12}) = e^{-i\beta\mu_{12}r_{12}} F \left[ 1 - \frac{i}{2\beta}, 2, 2i\beta\mu_{12}r_{12} \right] \quad (3.6)$$

con la que la energía  $E_{12} = \beta^2$  siendo  $\beta$  un parámetro a optimizar.

Esta función presenta nodos como es típico de cualquier función del continuo. Sin embargo, no hay una razón física para la presencia de dichos nodos en un factor de distorsión encargado de representar la correlación angular. Hay una forma de evitar esos nodos sin significado físico, y es tomando  $E_{12} = 0$ . Esta aproximación ha sido usada, por ejemplo, en *Colavecchia et. al (2007)*. Pero fijar  $E_{12} = 0$  tiene el efecto de eliminar el parámetro  $\beta$ , que como vamos a ver tiene un gran efecto en el cálculo de la energía del sistema.

En esta Tesis proponemos dos posibles alternativas como factores de correlación diferentes a la función de onda coulombiana del continuo. El primero, lo llamaremos  $\chi_E$  (*Rodriguez y Gasaneo 2005 y Rodriguez, Gasaneo y Mitnik 2007*). Y el segundo,  $\chi_{C3}$  que fue propuesto por *Gasaneo y Ancarani (2007)*.

**i) Factor  $\chi_E(r_{12})$** 

En primer lugar, proponemos el factor de correlación angular  $\chi_E(r_{12})$  considerando al potencial  $V_{12}$  igual a un caso particular del potencial de Eckart, (*Galindo y Pascual (1989)*):

$$V_E(r_{12}) = b \frac{e^{-\beta\mu_{12}r_{12}}}{1 + ce^{-\beta\mu_{12}r_{12}}}. \quad (3.7)$$

En la Figura (3.1) se grafica el potencial de Eckart como función de la coordenada  $r_{12}$ , para diferentes valores de los parámetros  $b, \beta$  y  $c$ . A grandes distancias este po-

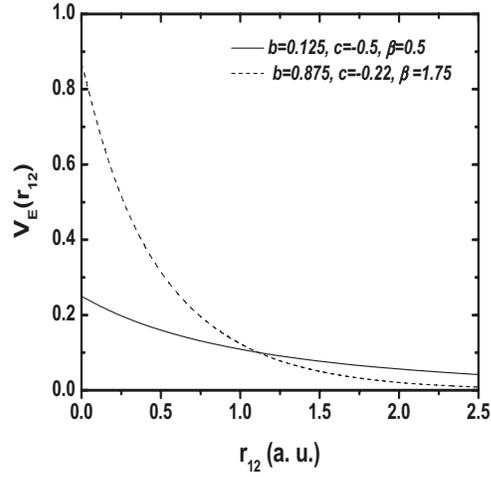


Figura 3.1: Potencial de Eckart  $V_E(r_{12})$

tencial tiene un comportamiento exponencial decreciente,  $e^{-\beta r_{12}}$ , que representa el apantallamiento que produce el núcleo en la interacción entre las partículas livianas.

La solución de energía  $E_{12} = 0$  puede escribirse en términos de la función hipergeométrica de Gauss  ${}_2F_1[a, b, c, z]$  de la siguiente manera (*Erderlyi (1953)*)

$$\chi_E(\beta, b, c, r_{12}) = \frac{2\beta + 1}{2\beta} {}_2F_1 \left[ \frac{i}{\beta} \sqrt{\frac{b}{c}}, -\frac{i}{\beta} \sqrt{\frac{b}{c}}, 1, -ce^{-2\beta\mu_{12}r_{12}} \right] \quad (3.8)$$

donde se asume que  $b, \beta > 0$  y  $c > -1$ . La constante adelante de la función  ${}_2F_1$  se ha introducido por conveniencia. En la figura (3.2) se grafica la función  $\chi_E(\beta, b, c, r_{12})$  como función de  $r_{12}$ . Como se puede ver en la figura, a grandes valores de la coordenada, las funciones  $\chi_E(r_{12})$  y  $\chi_P(r_{12})$  tienen un comportamiento completamente diferente. El factor  $\chi_E$  tiene un comportamiento monótonamente creciente acercándose a una constante. Según *Rothaan (1960)* este debe ser el comportamiento para un factor de correlación, manifestando que la función tiene que ser separable cuando los electrones están muy lejos entre sí. Sin embargo, existen estudios posteriores (*Popov y Ancarani 2000, Klar 2001*) que muestran que el factor de correlación no necesariamente tiene que converger a una constante. Ambas funciones presentan un comportamiento similar en la región de mayor probabilidad dada por el valor medio  $\langle r_{12} \rangle$ . Para el caso del

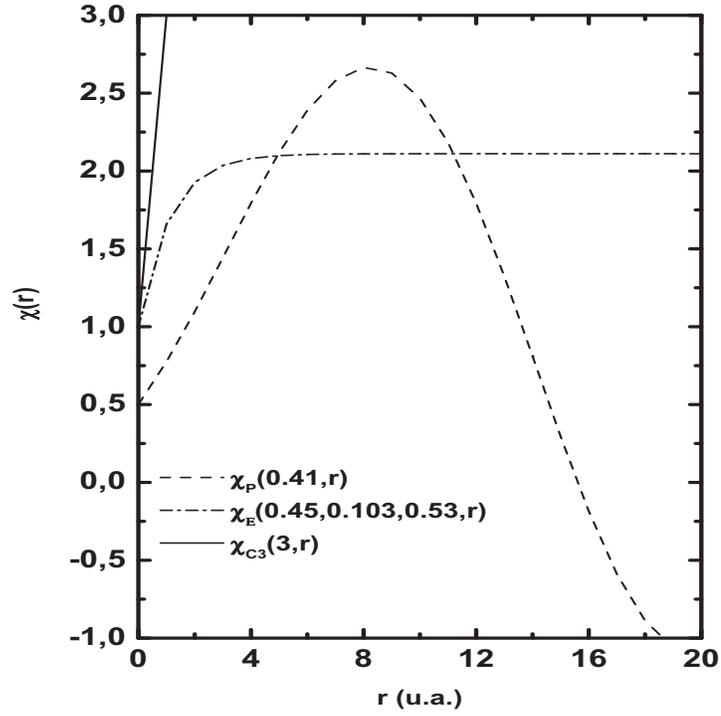


Figura 3.2: Comparación de los factores de correlación

He  $\langle r_{12} \rangle \approx 1.4$  u.a..

Eligiendo el parámetro  $b = -c\beta^2$  y usando la relación  ${}_2F_1[-1, 1, 1, z] = 1 - z$ , entonces

$$\begin{aligned} \chi_E(\beta, -c\beta^2, c, r_{12}) &= \frac{2\beta + 1}{2\beta} {}_2F_1[-1, 1, 1, -ce^{-2\beta\mu_{12}r_{12}}] \\ &= \frac{2\beta + 1}{2\beta} (1 + ce^{-2\beta\mu_{12}r_{12}}). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Definiendo  $c = -\frac{1}{1+2\beta}$  la solución de energía  $E_{12} = 0$ ,  $\chi_E$  está dada por:

$$\begin{aligned} \chi_E\left(\beta, \frac{\beta^2}{1+2\beta}, -\frac{1}{1+2\beta}, r_{12}\right) &= \frac{2\beta + 1}{2\beta} {}_2F_1\left[-1, 1, 1, \frac{e^{-2\beta\mu_{12}r_{12}}}{1+2\beta}\right] \\ &= \frac{2\beta + 1 - e^{-2\beta\mu_{12}r_{12}}}{2\beta}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Al introducir el factor  $\chi_E$  como factor de correlación angular en la función  $\phi$ , se está

incluyendo en esta función un parámetro libre  $\beta$ , que debe fijarse por métodos variacionales.

Se puede comprobar fácilmente que esta propuesta para el primer factor  $\phi_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12})$  de la función de onda de prueba  $\Psi_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12})$ , satisface las condiciones de cúspide de doble coalescencia, dadas por la ecuación (1.6).

ii) Factor  $\chi_{C3}(r_{12})$

En *Gasaneo y Ancarani (2007)* proponen una función que tiene la siguiente forma:

$$\chi_{C3}(n_{12}, r_{12}) = {}_1F_1 \left[ -n_{12}, 2, -2 \frac{Z\mu_{12}}{n_{12}} r_{12} \right] \quad (3.11)$$

Los primeros términos de la función son:

$$\begin{aligned} \chi_{C3}(1, r_{12}) &= 1 + Z\mu_{12}r_{12} \\ \chi_{C3}(2, r_{12}) &= 1 + Z\mu_{12}r_{12} + \frac{1}{6}Z^2\mu_{12}^2r_{12}^2 \\ \chi_{C3}(3, r_{12}) &= 1 + Z\mu_{12}r_{12} + \frac{2}{9}Z^2\mu_{12}^2r_{12}^2 + \frac{1}{81}Z^3\mu_{12}^3r_{12}^3 \\ \chi_{C3}(4, r_{12}) &= 1 + Z\mu_{12}r_{12} + \frac{1}{4}Z^2\mu_{12}^2r_{12}^2 + \frac{1}{48}Z^3\mu_{12}^3r_{12}^3 + \frac{2}{1875}Z^4\mu_{12}^4r_{12}^4 \end{aligned}$$

La función  $\chi_{C3}$  es solución de una ecuación como la dada por el tercer término de la ecuación (2.2)

$$H_{C3}^D \chi_{C3} = \left[ -\frac{1}{2\mu_{12}} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right) + V_{12} - 2\kappa \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right] \chi_{C3} = 0 \quad (3.12)$$

donde el término  $2\kappa \frac{\partial}{\partial r_{12}}$  resulta de hacer la continuación analítica de  $k_{12}$  reemplazándolo por  $i\kappa$  en el Hamiltoniano  $C3$  para los estados del espectro continuo (*Ancarani y Gasaneo 2007*). El parámetro  $\kappa$  está dado por  $\kappa = -\frac{\mu_{12}Z}{2n_{12}}$ , donde  $n_{12}$  puede ser considerado un número cuántico al igual que  $n_1$  y  $n_2$ . Esto tiene sentido debido a que la función que se busca depende de las tres coordenadas relativas  $r_{31}$ ,  $r_{32}$  y  $r_{12}$ . Los

distintos ordenes de la función  $\chi_{C3}$  tienen en común el término  $1 + Z\mu_{12}r_{12}$  que indica que todos satisfacen la condición de cúspide correcta entre las partículas 1 y 2.

Se puede observar que el orden  $n_{12} = 1$ , del factor de correlación  $\chi_{C3}$  coincide con el factor de correlación propuesto por *Patil (2004)* para el caso del átomo de Helio, que resulta ser  $1 + \frac{r_{12}}{2}$ .

### 3.1.2 Solución para $D_1$ , $\Omega_{n_1, n_2}(r_{31}, r_{32}, r_{12})$

Como solución a los términos que aparecen en el operador  $D_1$  proponemos la función  $\Omega_{n_1, n_2}$ . Reiteramos que este operador está formado por derivadas cruzadas, que representan la interacción entre los pares de partículas, y aquellos términos que no fueron resueltos en la (3.2) (por ejemplo:  $\frac{1}{r_{12}} - V_{12}$  con  $V_{12} = V_E$  cuando se trabaja con el factor de correlación angular  $\chi_E$ , o  $2\kappa\frac{\partial}{\partial r_{12}}$  cuando se trabaja con el factor  $\chi_{C3}$ ).

Como la función  $\phi$ , está formada por productos de funciones Coulombianas, ésta naturalmente satisface las condiciones dadas por las ecuaciones (1.6). Así, la función  $\Psi$  cumplirá las condiciones de Kato si la función  $\Omega$ , cerca de los puntos de coalescencia de dos partículas, se comporta como

$$\Omega \longrightarrow 1 + O(r_{31}^2, r_{32}^2, r_{12}^2). \quad (3.13)$$

En varios de los códigos computacionales actuales que evalúan procesos colisionales se utilizan funciones similares a las de *Chandrasekhar (1953)*. Por lo tanto nuestro objetivo es construir funciones similares a estas. Para ello proponemos para la función  $\Omega$ , la serie de potencias

$$\Omega_{n_1, n_2, n_{12}}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = \sum_{i, j, k \neq 1} c_{i, j, k}^{(n_1, n_2, n_{12})} \Omega_{i, j, k}^{n_1, n_2, n_{12}}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) \quad (3.14)$$

$$= \sum_{i, j, k \neq 1} c_{i, j, k}^{(n_1, n_2, n_{12})} r_{31}^i r_{32}^j r_{12}^k. \quad (3.15)$$

Los coeficientes  $c$  deben estar restringidos por la condición que la serie de potencia no incluya potencias de orden uno de las coordenadas, porque de ser así no se cumplirían las condiciones

de Kato. Este hecho también se observa en otras propuestas (*Le Sech 1997, Dubieu et al. 1989, Moumeni et al. 1990*) en la que funciones de apantallamiento  $\sinh(\lambda r)/r$  o  $\cosh(\lambda r)$  excluyen explícitamente las potencias de orden uno de las coordenadas.

## 3.2 Bases correlacionadas

Hemos presentado los dos factores del producto que forman la función  $\Psi$ . También hemos presentado las funciones de correlación  $\chi_E$  y  $\chi_{C3}$ . Podemos ahora definir dos bases alternativas para el estudio de tres partículas de estado  $S$ . La primera, construída en términos de las funciones GR (*Rodriguez y Gasaneo 2005*),  $\{\Psi_{GR}(n_1, n_2, \beta_{n_1, n_2})\}_{NL}$  que llamamos no lineal y abreviamos NL:

$$\Psi_{GR}^{(n_1, n_2, \beta_{n_1, n_2})} = \sum_{i, j, k \neq 1} c_{i, j, k}^{(n_1, n_2)} \psi_{i, j, k}^{(n_1, n_2)} \quad (3.16)$$

donde

$$\psi_{i, j, k}^{(n_1, n_2)} = \varphi_{n_1}(r_{31}) \varphi_{n_2}(r_{32}) \chi_E^{(n_1, n_2)} r_{31}^i r_{32}^j r_{12}^k \quad (3.17)$$

que son las funciones donde el factor de correlación angular,  $\chi_E$  de la ecuación (3.11), es el que resuelve exactamente el potencial de Eckart. Diferentes valores de parámetros  $\beta_{n_1, n_2}$  se usan para cada par de valores de  $n_1$  y  $n_2$ , con la condición  $\beta_{n_1, n_2} = \beta_{n_2, n_1}$  impuesta por la simetría. La inclusión de parámetros variacionales no lineales en una base implica el uso de técnicas de optimización que aumenta la dificultad de la resolución numérica del problema.

La segunda,  $\{\Psi_{C3}(n_1, n_2, n_{12})\}_{LP}$  que llamamos libre de parámetros no lineales y abreviamos LP, está definida en términos de las  $\Psi_{C3}$  :

$$\Psi_{C3}^{(n_1, n_2, n_{12})} = \sum_{i, j, k \neq 1} c_{i, j, k}^{(n_1, n_2, n_{12})} \psi_{i, j, k}^{(n_1, n_2, n_{12})} \quad (3.18)$$

donde

$$\psi_{i, j, k}^{(n_1, n_2, n_{12})} = \varphi_{n_1}(r_{31}) \varphi_{n_2}(r_{32}) \chi_{C3}^{(n_{12})} r_{31}^i r_{32}^j r_{12}^k \quad (3.19)$$

Con las bases que proponemos, escribimos la solución a la ecuación de Schrödinger (2.1) a

tráves del método Configuración Interacción que ahora incluye Correlación Angular (CICA) (ecuación(2.7)). Con cada una de ellas, la función de onda aproximada queda escrita de la siguiente manera:

$$\Psi_{NL} = \sum_{n_1, n_2} c_{n_1, n_2} \Psi_{GR}^{(n_1, n_2, \beta_{n_1, n_2})} \quad (3.20)$$

$$\Psi_{LP} = \sum_{n_1, n_2, n_{12}} b_{n_1, n_2, n_{12}} \Psi_{C3}^{(n_1, n_2, n_{12})} \quad (3.21)$$

Debemos resaltar que en ambos casos, cada elemento de la base cumple con las condiciones de Kato entre dos partículas. En consecuencia las funciones  $\Psi_{NL}$  y  $\Psi_{LP}$ , también las cumplen.

### 3.3 Conclusiones

*Basándonos en el método de Configuración Interacción con Correlación Angular desarrollado en el capítulo 2, proponemos dos alternativas de funciones tipo Hylleraas, como funciones de onda de prueba para sistemas de tres cuerpos en estados  $S$ , es decir con momento angular total cero. Las dos propuestas tienen la misma estructura base y se diferencian en la forma de representar la correlación angular, a través de dos factores de correlación distintos,  $\chi_E$  (3.10) y  $\chi_{C3}$  (3.11) que son soluciones de potenciales distintos en la coordenada  $r_{12}$ . El primer factor,  $\chi_E$  es solución del potencial de Eckart de ecuación (3.7) y depende de parámetros no-lineales  $\beta_{n_1 n_2}$ . Debido a la no-linealidad de estos parámetros, el implementar un procedimiento de optimización para obtener la energía media del sistema implica que en el proceso de minimización se realiza un número grande de diagonalizaciones. El segundo factor,  $\chi_{C3}$  tiene la ventaja que al ser todos sus coeficientes lineales, con una única diagonalización se obtienen todos los autovalores, es decir los valores de las energías.*

# Capítulo 4

## Resultados para los estados S del átomo de Helio y su serie isoelectrónica.

### Introducción

En este capítulo presentamos cálculos de energías y otras magnitudes físicas de interés, que dan muestra que cumplimos con nuestro objetivo de construir funciones relativamente simples con buena precisión y con las condiciones de doble coalescencia correctas.

Realizamos los cálculos con las funciones propuestas:  $\Psi_{GR}$  y  $\Psi_{C3}$  que estructuralmente son muy similares excepto por los factores de correlación angular,  $\chi_E$  y  $\chi_{C3}$ . Estudiamos funciones con distintos grados de dificultad según el número de términos que tenga la serie de potencias.

Dividimos el capítulo en dos secciones. En la primera sección estudiamos el estado fundamental del átomo de Helio y su serie isoelectrónica con una única configuración (sin mezclar estados). Realizamos el estudio con tres tipos de funciones según cómo se pueden obtener los parámetros:

- (i) funciones analíticas: se obtienen expresiones analíticas en función de la carga nuclear para la energía y la función de onda,

- (ii) funciones semianalíticas: se dan expresiones analíticas para la energía y la función de onda en términos de la carga nuclear  $Z$ , pero la funcionalidad de éstas en  $Z$  se obtiene a partir de fiteos de los valores obtenidos variacionalmente,
- (iii) funciones numéricas: por el número de términos en la función, tanto la energía como la función de onda sólo se obtienen en forma numérica.

En la segunda sección realizamos el estudio de los estados excitados S de átomos de dos electrones.

## 4.1 Funciones y notación

En este capítulo realizamos el estudio de los estados S del átomo de Helio, y del estado fundamental de la serie isoelectrónica del mismo. Trabajamos en la aproximación de masa nuclear ( $m_3$ ), infinita. Por esto la cantidad  $\nu_3 = 1/m_3$  es cero y el último término de la ecuación (2.13) se anula. La masa del electrón es  $m_e = 1$  en unidades atómicas, y las masas reducidas  $\mu_{3i} = m_i m_3 / (m_i + m_3)$  y  $\mu_{12} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  resultan ser 1 y 1/2 respectivamente. Para todos los sistemas estudiados en este capítulo las cargas de las dos partículas más livianas son  $Z_1 = Z_2 = -1$  y la carga nuclear  $Z_3 = Z$ .

Las funciones de onda aproximadas que nos proponemos estudiar dentro del marco del método de *Configuración-Interacción con Correlación Angular* tienen la siguiente forma:

$$\Psi_{GR} = \sum_{n_1, n_2} \varphi(n_1, r_{31}) \varphi(n_2, r_{32}) \frac{2\beta_{n_1, n_2} + 1 - e^{-\beta_{n_1, n_2} r_{12}}}{2\beta_{n_1, n_2}} \Omega_{n_1, n_2, \beta_{n_1, n_2}}^{cc}(r_{31}, r_{32}, r_{12}), \quad (4.1)$$

$$\Psi_{C3} = \sum_{n_1, n_2, n_{12}} \varphi(n_1, r_{31}) \varphi(n_2, r_{32}) {}_1F_1 \left[ -n_{12}, 2, -\frac{r_{12}}{n_{12}} \right] \Omega_{n_1, n_2, n_{12}}^{cc}(r_{31}, r_{32}, r_{12}), \quad (4.2)$$

donde denominamos

$$\Omega_{n_1, n_2, t}^{cc}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = \sum_{i, j, k \neq 1} c_{i, j, k}^{(n_1, n_2, t)} r_{31}^i r_{32}^j r_{12}^k, \quad (4.3)$$

$$t = \begin{cases} \beta_{n_1, n_2} & \text{si es la base GR.} \\ n_{12} & \text{si es la base C3.} \end{cases}$$

y  $cc$  indica el número de configuraciones correlacionadas.

La diferencia entre las distintas funciones  $\Omega$  está relacionada con las distintas potencias y combinaciones en el producto de las coordenadas:  $r_{31}^i r_{32}^j r_{12}^k$ . La propuesta más general en esta tesis es la función  $\Omega^{47}$  de 47 términos:

$$\begin{aligned}
\Omega_{n_1, n_2, t}^{47}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = & c_{000}^{n_1, n_2, t} + c_{200}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 + c_{020}^{n_1, n_2, t} r_{32}^2 + c_{220}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^2 + \\
& c_{300}^{n_1, n_2, t} r_{31}^3 + c_{030}^{n_1, n_2, t} r_{32}^3 + c_{002}^{n_1, n_2, t} r_{12}^2 + c_{320}^{n_1, n_2, t} r_{31}^3 r_{32}^2 + c_{230}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^3 + \\
& c_{202}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{12}^2 + c_{022}^{n_1, n_2, t} r_{32}^2 r_{12}^2 + c_{302}^{n_1, n_2, t} r_{31}^3 r_{12}^2 + c_{032}^{n_1, n_2, t} r_{32}^3 r_{12}^2 + \\
& c_{402}^{n_1, n_2, t} r_{31}^4 r_{12}^2 + c_{042}^{n_1, n_2, t} r_{32}^4 r_{12}^2 + c_{400}^{n_1, n_2, t} r_{31}^4 + c_{040}^{n_1, n_2, t} r_{32}^4 + \\
& c_{222}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^2 r_{12}^2 + c_{003}^{n_1, n_2, t} r_{12}^3 + c_{223}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^2 r_{12}^3 + c_{004}^{n_1, n_2, t} r_{12}^4 + \\
& c_{420}^{n_1, n_2, t} r_{31}^4 r_{32}^2 + c_{240}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^4 + c_{430}^{n_1, n_2, t} r_{31}^4 r_{32}^3 + c_{340}^{n_1, n_2, t} r_{31}^3 r_{32}^4 + \\
& c_{322}^{n_1, n_2, t} r_{31}^3 r_{32}^2 r_{12}^2 + c_{232}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^3 r_{12}^2 + c_{422}^{n_1, n_2, t} r_{31}^4 r_{32}^2 r_{12}^2 + c_{242}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^4 r_{12}^2 + \\
& c_{203}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{12}^3 + c_{023}^{n_1, n_2, t} r_{32}^2 r_{12}^3 + \\
& c_{303}^{n_1, n_2, t} r_{31}^3 r_{12}^3 + c_{033}^{n_1, n_2, t} r_{32}^3 r_{12}^3 + c_{403}^{n_1, n_2, t} r_{31}^4 r_{12}^3 + c_{043}^{n_1, n_2, t} r_{32}^4 r_{12}^3 + \\
& c_{423}^{n_1, n_2, t} r_{31}^4 r_{32}^2 r_{12}^3 + c_{243}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^4 r_{12}^3 + c_{503}^{n_1, n_2, t} r_{31}^5 r_{12}^3 + c_{053}^{n_1, n_2, t} r_{32}^5 r_{12}^3 + \\
& c_{204}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{12}^4 + c_{024}^{n_1, n_2, t} r_{32}^2 r_{12}^4 + c_{304}^{n_1, n_2, t} r_{31}^3 r_{12}^4 + c_{034}^{n_1, n_2, t} r_{32}^3 r_{12}^4 + \\
& c_{234}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^3 r_{12}^4 + c_{405}^{n_1, n_2, t} r_{31}^4 r_{12}^5 + c_{045}^{n_1, n_2, t} r_{32}^4 r_{12}^5.
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Las funciones  $\Omega^3, \Omega^7, \Omega^{15}$  y  $\Omega^{21}$  que estudiamos están contenidas en la  $\Omega^{47}$  y cada una de ellas está formada por los 3, 7, 15 y 21 primeros términos. En caso de sistemas simétricos, es decir  $m_1 = m_2$  y  $Z_1 = Z_2$  los coeficientes cumplen con las siguientes condiciones:

$$c_{ijk}^{n_1 n_2 t} = c_{jik}^{n_2 n_1 t}. \tag{4.5}$$

Por esto, las funciones  $\Omega^3, \Omega^7, \Omega^{15}$ ,  $\Omega^{21}$  y  $\Omega^{47}$  resultan con 2, 5, 9, 14 y 27 coeficientes independientes. Hay que aclarar que en el caso de la base GR el coeficiente  $c_{000}^{11t}$  se ha fijado en 1. De esta manera el número de coeficientes de la función  $\Omega^{cc}$  es el mismo para las dos bases cuando  $n_{12} = 1$ .

Otras funciones que estudiamos son:

$$\Omega_{n_1, n_2, t}^5(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = c_{000}^{n_1, n_2, t} + c_{200}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 + c_{020}^{n_1, n_2, t} r_{32}^2 + c_{400}^{n_1, n_2, t} r_{31}^4 + c_{040}^{n_1, n_2, t} r_{32}^4 \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} \Omega_{n_1, n_2, t}^{10}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = & c_{000}^{n_1, n_2, t} + c_{200}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 + c_{020}^{n_1, n_2, t} r_{32}^2 + c_{220}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^2 + \\ & c_{300}^{n_1, n_2, t} r_{31}^3 + c_{030}^{n_1, n_2, t} r_{32}^3 + c_{002}^{n_1, n_2, t} r_{12}^2 + c_{202}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{12}^2 + \\ & c_{022}^{n_1, n_2, t} r_{32}^2 r_{12}^2 + c_{222}^{n_1, n_2, t} r_{31}^2 r_{32}^2 r_{12}^2 \end{aligned} \quad (4.7)$$

que también están contenidas en la  $\Omega^{47}$  pero sus términos no aparecen en forma ordenada. Notamos las distintas funciones de onda de prueba de la siguiente manera:

$$\Psi_{GR.ca.cc-N} \quad (4.8)$$

cuando son funciones con la base GR, y

$$\Psi_{C3.ca.cc.n_{12}-N} \quad (4.9)$$

cuando se trabaja con la base C3.

*ca*: indica las distintas configuraciones atómicas que la función de onda tiene en cuenta.

Se emplean además la siguiente notación, para las configuraciones a utilizar

*I* :  $1s1s$  (estado fundamental).

*II* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s)$

*III* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + 2s2s$

*IV* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s)$

*V* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s) + 2s2s$

*VI* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s) + (1s4s + 4s1s)$

*VII* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s) + (1s4s + 4s1s) + 2s2s$

*cc*: indica cuál de las funciones  $\Omega$  ha sido utilizada.

*N*: es el número total de coeficientes de la función, incluyendo los lineales y los no-lineales.

## 4.2 Estado fundamental

Para el estudio del estado fundamental podemos evaluar sólo el primer término de las funciones expresadas en (4.1) y (4.2), es decir sin sumar sobre las distintas configuraciones atómicas. Por esta razón, reemplazamos las funciones hidrogenoides generales por sus expresiones para el caso del estado fundamental, resultando:

$$\Psi_{GR.L.cc.N}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = e^{-Z(r_{31}+r_{32})} \frac{2\beta + 1 - e^{-\beta_{1,1}r_{12}}}{2\beta} \Omega_{1,1,\beta_{1,1}}^{cc}(r_{31}, r_{32}, r_{12}). \quad (4.10)$$

$$\Psi_{C3.L.cc.n_{12}.N}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = e_1^{-Z(r_{31}+r_{32})} F_1 \left[ -n_{12}, 2, -\frac{r_{12}}{n_{12}} \right] \Omega_{1,1,n_{12}}^{cc}(r_{31}, r_{32}, r_{12}). \quad (4.11)$$

Por el principio de exclusión de Pauli los electrones del estado fundamental deben tener spin antiparalelo. Por lo tanto, las funciones  $\Psi$  tienen que ser simétricas bajo el intercambio de las coordenadas espaciales de los electrones. Esto implica que  $c_{i,j,k}^{(n_1, n_2, \beta_{n_1, n_2})} = c_{j,i,k}^{(n_1, n_2, \beta_{n_1, n_2})}$  y  $c_{i,j,k}^{(n_1, n_2, n_{12})} = c_{j,i,k}^{(n_1, n_2, n_{12})}$ . Además, para cumplir dicha simetría, las series de potencias tiene que incluir las mismas combinaciones de valores en los índices  $i$  y  $j$ .

Si bien obtener un valor preciso de la energía media es una prueba importante, ésto no es suficiente para establecer la calidad de una función de onda. Los valores medios de otras cantidades pueden utilizarse en tal sentido, probando su calidad en distintas regiones del espacio. Calculamos varias cantidades radiales que dependen fuertemente de la forma de la función de onda, y que están involucradas en el cálculo de otras cantidades físicas. Los valores medios  $\langle r_{3j} \rangle$  y  $\frac{1}{\langle r_{3j} \rangle}$  ( $\langle r_{12} \rangle$  y  $\frac{1}{\langle r_{12} \rangle}$  respectivamente) son muy sensibles al comportamiento de la función de onda de prueba cerca del núcleo (cerca del punto de coalescencia *electrón – electrón* respectivamente). Por otro lado, en las cantidades  $\langle r_{3j}^2 \rangle$ ,  $\langle r_{3j}^4 \rangle$ ,  $\langle r_{12}^2 \rangle$  y  $\langle r_{12}^4 \rangle$  influye significativamente el comportamiento asintótico de la función. También son de interés los valores medios de cantidades como: i) la susceptibilidad magnética  $\chi = -\frac{\langle r^2 \rangle}{6} = -\frac{\langle r_{31}^2 + r_{32}^2 \rangle}{6}$  y ii) la correlación angular  $\langle \mathbf{r}_{31} \cdot \mathbf{r}_{32} \rangle$  que es el coseno del ángulo entre los versores  $\hat{\mathbf{r}}_{31}$  y  $\hat{\mathbf{r}}_{32}$

### 4.2.1 Funciones analíticas

Se denominan funciones analíticas a aquellas funciones que por su simplicidad permiten obtener expresiones analíticas tanto para la energía media como para otras cantidades físicas.

Estas funciones son útiles para realizar estudios de procesos de colisiones, facilitando el cálculo de los elementos de matriz que involucran integrales multi-dimensionales. También son útiles desde un punto de vista pedagógico permitiendo diversos estudios de la estructura atómica y como una herramienta valiosa para el aprendizaje de la aplicación y uso del método variacional. En esta línea ha trabajado *Patil (1990, 1999, 2003 y 2004)* quien en sus diversas publicaciones ha investigado la posibilidad de construir funciones de onda sencillas que contengan algunas de las condiciones matemáticas que éstas deben satisfacer. Considerando lo expuesto, proponemos una función de onda simple libre de parámetros que (i) satisface todas las condiciones de cúspide en los puntos de doble coalescencia; (ii) permite expresiones analíticas para la energía del estado fundamental y los valores medios de otras cantidades; (iii) resulta en valores de energía aceptables para toda la secuencia incluyendo el ión hidrógeno,  $H^-$ . El resultado puede ser considerado como una función de onda de fácil uso alternativo al modelo de partícula independiente.

### **Funciones libres de parámetros para el estado fundamental de átomos de dos electrones.**

**Modelo de partícula independiente.** En el modelo de partículas independientes (IPM) (*Bransden y Joachain 2003*) con una carga efectiva  $Z_{eff}$ , la función de onda es:

$$\Psi_{IPM} = e^{-Z_{eff}(r_{31}+r_{32})}. \quad (4.12)$$

Esta es la función con la que típicamente se ilustra la aplicación del principio variacional y se encuentra que la energía media del estado fundamental es mínima para  $Z_{eff} = Z - \frac{5}{16}$ ,

$$E_{IPM}(Z) = - \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2. \quad (4.13)$$

Las energías calculadas para  $Z = 1 - 3$  están dadas en la Tabla 4.1. Como es bien sabido, este tipo de función no predice ningún estado ligado para el  $H^-$ . La función de onda  $\Psi_{IPM}$  no satisface las condiciones de Kato de dos partículas (1.6) con las cargas  $Z_1 = Z_2 = -1$  y  $Z_3 = Z$  y las masas reducidas  $\mu_{31} = \mu_{32} = 1$ ,  $\mu_{12} = 1/2$ .

**Modelo de Myers.** Myers y colaboradores (*Myers et al. 1991*) propusieron la siguiente función de onda

$$\Psi_{Myers} = e^{-Z(r_{31}+r_{32})} e^{r_{12}/2}. \quad (4.14)$$

La energía puede ser determinada analíticamente, (*Myers et al. 1991*),

$$E_{Myers}(Z) = \frac{(1 - 8Z + 28Z^2 - 64Z^3)(2Z - 1)}{4(1 - 10Z + 32Z^2)}. \quad (4.15)$$

Las energías calculadas para  $Z = 1 - 3$  están dadas en la Tabla 4.1. Excepto para el ión  $H^-$  las energías son apenas un poco mejor que las obtenidas con IPM. Al igual que en el caso anterior no predice ningún estado ligado para el ión hidrógeno. Por construcción, dado que la carga del exponente de la función de onda  $\Psi_{Myers}$  es  $Z$ , ésta satisface las dos condiciones de Kato electrón núcleo (1.6). Adicionalmente el factor de correlación  $e^{\frac{r_{12}}{2}}$  permite describir correctamente el comportamiento de la función de onda cuando los dos electrones están muy cerca uno del otro.

**Modelo de Patil** Consideramos ahora la función de onda sugerida por *Patil (2004)*

$$\Psi_{Patil} = e^{-Z(r_{31}+r_{32})} \left(1 + \frac{r_{12}}{2}\right) \quad (4.16)$$

Obsérvese que el factor de correlación angular  $\left(1 + \frac{r_{12}}{2}\right)$  es la función  $\chi_{C3}$  para  $n_{12} = 1$ . Obtenemos la siguiente expresión analítica para la energía:

$$E_{Patil}(Z) = \frac{(35 - 16Z - 100Z^2 - 64Z^3)Z}{4(24 + 35Z + 16Z^2)} \quad (4.17)$$

y las energías calculadas para  $Z = 1 - 3$  están dadas en la Tabla 4.1. Al igual que con las dos funciones de onda anteriores, esta función tampoco predice ningún estado ligado para el ión hidrógeno. La función de onda  $\Psi_{Patil}$  satisface las tres condiciones de Kato de dos partículas (1.6). El factor de correlación  $(1 + r_{12}/2)$  simula la repulsión electrón-electrón, ya que disminuye la amplitud de la función de onda cuando los electrones están muy cerca entre ellos.

**Función de onda propuesta: ARG** Queremos construir una función de onda simple, precisa y que satisfaga las condiciones de Kato en los puntos de doble coalescencia de dos cuerpos. Consideramos la función  $\Psi_{C3.I.cc.n_{12}-N}$  de la ecuación (3.18) con  $n_{12} = 1$  y la función  $\Omega^3$  representada por los tres primeros términos de la ecuación (4.4). Al coeficiente del término independiente lo fijamos en 1 y por la simetría de los sistemas de la serie isoelectrónica los coeficientes de los otros dos términos son iguales,  $c_{200} = c_{020}$ . De esta manera proponemos la función  $\Psi_{C3.I.2.1.1}(r_{31}, r_{32}, r_{12})$  a la que nombraremos de la misma manera que en nuestro trabajo *Ancarani, Rodriguez y Gasaneo 2007, ARG*:

$$\Psi_{ARG} = N_{ARG} e^{-Z(r_{31}+r_{32})} \left(1 + \frac{r_{12}}{2}\right) [1 + c_{200} (r_{31}^2 + r_{32}^2)], \quad (4.18)$$

donde el coeficiente  $c_{200}$  tiene que ser determinado. La energía media  $\langle E \rangle$  y la constante de normalización  $N_{ARG}$  pueden ser obtenidas analíticamente en términos de  $c_{200}$  y  $Z$ ,

$$N_{ARG} = \frac{4Z^6}{\pi\sqrt{A}}, \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} E_{ARG} = & -\frac{Z}{4A} [Z^4 (-35 + 16Z + 100Z^2 + 64Z^3) \\ & + c_{200} Z^2 (-567 + 864Z + 1792Z^2 + 768Z^3) \\ & + \frac{3}{8} c_{200}^2 (-10065 + 19968Z + 27612Z^2 + 8704Z^3)], \end{aligned} \quad (4.20)$$

con

$$\begin{aligned} A = & 9c_{200}^2 (460 + 3355Z/8 + 112Z^2) + 3c_{200} Z^2 (168 + 189Z + 64Z^2) \\ & + Z^4 (24 + 35Z + 16Z^2). \end{aligned} \quad (4.21)$$

Notar que cuando  $c_{200} = 0$ , se obtienen los resultados dados por Patil (*Patil 2004*).

Optimizando respecto de  $c$  encontramos que el valor óptimo es,

$$c_{200}(Z) = \frac{2Z^2}{3D} (B + \sqrt{C}), \quad (4.22)$$

donde

$Z$	$-E_{IPM}$	$-E_{Myers}$	$-E_{Patil}$	$-E_{exacta}$	$-E_{ARG}$	$N_{ARG}$	$c_{200}(Z)$
1	0.47266	0.4674	0.4833	0.5277	0.5198	0.0768	0.094723
2	2.8477	2.8555	2.8766	2.9037	2.8954	1.3784	0.087863
3	7.2227	7.2346	7.2555	7.2799	7.2667	5.7974	0.0934
4	13.5977	13.6115	13.631	13.6556	13.6384	15.2383	0.09906
5	21.9727	21.9877	22.0054	22.0310	22.0108	31.6109	0.104123
6	32.3477	32.3634	32.3796	32.4062	32.3837	56.8255	0.108659
7	44.7227	44.739	44.7538	44.7814	44.7571	92.7923	0.112798
8	59.0977	59.1144	59.128	59.1566	59.1307	141.421	0.116641
9	75.4727	75.4897	75.5023	75.5317	75.5045	204.623	0.120262
10	93.8477	93.865	93.8766	93.9068	93.8786	284.307	0.123714

Tabla 4.1: Las energías medias exactas (Drake 2005), para  $Z = 1 - 10$ , son comparadas con las obtenidas con las funciones de onda del Modelo de Partícula Independiente (IPM) (ecuación (7.13)), Myers (ecuación (4.14)), Patil (ecuación (4.16)) y la función de onda propuesta  $\Psi_{ARG}$  (ecuación (4.18)). Al final se dan los valores de  $c_{200}(Z)$  y la norma  $N_{ARG}$ .

$$B = 18105 + 37824Z + 3696Z^2 - 32658Z^3 - 20816Z^4 - 2^{12}Z^5, \quad (4.23)$$

$$C = 128388465 + 654660864Z + 1335335040Z^2 + 1461805344Z^3 \quad (4.24)$$

$$+1466560608Z^4 + 2129749520Z^5 + 2529169358Z^6$$

$$+1813502944Z^7 + 755300608Z^8 + 171573248Z^9 + 2^{24}Z^{10},$$

$$D = -98910 - 43776Z + 304160Z^2 + 413413Z^3 + 192512Z^4 + 2^{15}Z^5. \quad (4.25)$$

La energía  $E_{ARG}$  y la constante de normalización  $N_{ARG}$  tienen expresiones analíticas muy largas que no es conveniente dar. Para su evaluación, es mas fácil calcular el coeficiente  $c_{200}(Z)$  de (4.22) y reemplazar su valor en (4.21) y (4.19). Los valores de  $c_{200}(Z)$ ,  $N_{ARG}$  y  $E_{ARG}$  están dados en la Tabla 4.1 para  $Z = 1 - 10$ . También podemos obtener expresiones analíticas para los valores medios de varias cantidades radiales y angulares, calculadas con la función de onda propuesta  $\Psi_{ARG}$ .

$$\langle r_{3i} \rangle = \frac{1}{2^5 Z A} [8Z^4(192 + 245Z + 96Z^2) + 24cZ^2(1680 + 1701Z + 512Z^2) \quad (4.26)$$

$$+ 45c^2(8832 + 7381Z + 1792Z^2)],$$

$$\langle r_{3i}^2 \rangle = \frac{3}{8Z^2A} [2Z^4(168 + 189Z + 64Z^2) + 3cZ^2(3680 + 3355Z + 896Z^2) + 15c^2(8808 + 6721Z + 1472Z^2)] , \quad (4.27)$$

$$\left\langle \frac{1}{r_{3i}} \right\rangle = \frac{Z}{4A} [8Z^4(9 + 15Z + 8Z^2) + 4cZ^2(312 + 385Z + 144Z^2) + 3c^2(3000 + 2919Z + 832Z^2)] , \quad (4.28)$$

$$\langle r_{12} \rangle = \frac{1}{32ZA} [8Z^4(315 + 384Z + 140Z^2) + 2016cZ^2(33 + 32Z + 9Z^2) + 9c^2(73359 + 58880Z + 13420Z^2)] , \quad (4.29)$$

$$\langle r_{12}^2 \rangle = \frac{3}{8Z^2A} [8Z^4(100 + 105Z + 32Z^2) + 96cZ^2(270 + 231Z + 56Z^2) + 3c^2(101840 + 73359Z + 14720Z^2)] , \quad (4.30)$$

$$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle = \frac{Z}{32A} [8Z^4(35 + 64Z + 40Z^2) + 24cZ^2(189 + 256Z + 112Z^2) + 9c^2(3355 + 3584Z + 1192Z^2)] , \quad (4.31)$$

con  $i = 1, 2$ .

$$\langle r^4 \rangle = \frac{9}{32Z^4A} [4Z^4(3680 + 3355Z + 896Z^2) + 80cZ^2(8808 + 6721Z + 1472Z^2) + 15c^2(779520 + 509327Z + 93952Z^2)] , \quad (4.32)$$

$$\langle \hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2 \rangle = -\frac{1}{8A} [8Z^4(6 + 5Z) + 8cZ^2(120 + 77Z) + 3c^2(2480 + 1287Z)] . \quad (4.33)$$

En la Tabla 4.2, se comparan los valores numéricos calculados para  $Z = 1 - 3$  con las cuatro funciones de onda simples antes mencionadas y con los resultados numéricos “exactos” dados en *Drake 2005*. Para  $Z = 1$ , si el estado ligado no ha sido predicho, no incluimos los valores medios (como sucede con las funciones de onda IPM, Myers y Patil). A pesar de su simplicidad, la función de onda  $\Psi_{ARG}$  da resultados considerablemente satisfactorios para los valores medios, excepto posiblemente para  $H^-$ . Las cantidades  $\langle r_{3i} \rangle$  y  $\left\langle \frac{1}{r_{3i}} \right\rangle$  (respectivamente,  $\langle r_{12} \rangle$ ,

$Z$		$\langle r_{3i} \rangle$	$\langle r_{3i}^2 \rangle$	$\langle \frac{1}{r_{3i}} \rangle$	$\langle r_{12} \rangle$	$\langle r_{12}^2 \rangle$	$\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle$	$\langle r^4 \rangle$	$\langle \hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2 \rangle$
1	<i>ARG</i>	2.31896	7.3499	0.68838	3.70934	16.4819	0.34526	354.940	-0.15412
	<i>Exact</i>	2.71018	11.9137	0.68326	4.41269	25.2020	0.31102	—	-0.68731
2	<i>IPM</i>	0.88889	1.0535	1.6875	1.2963	2.107	1.05469	7.76901	0
	<i>Myers</i>	0.93769	1.19667	1.65138	1.50153	2.80122	0.89449	10.2286	-0.17431
	<i>Patil</i>	0.84335	0.95174	1.79747	1.29984	2.07911	1.02215	6.21865	-0.10127
	<i>ARG</i>	0.92667	1.17104	1.67393	1.43755	2.56009	0.93166	9.74334	-0.10499
	<i>Exact</i>	0.92947	1.19348	1.68832	1.42207	2.51644	0.94582	7.6 <sup>a</sup>	-0.06457
3	<i>IPM</i>	0.55814	0.41536	2.6875	0.81395	0.83072	1.67969	1.20767	0
	<i>Myers</i>	0.57432	0.44565	2.66409	0.89189	0.99151	1.51544	1.40695	-0.11197
	<i>Patil</i>	0.54670	0.40018	2.76923	0.83242	0.85836	1.61264	1.10953	-0.07692
	<i>ARG</i>	0.57253	0.44361	2.67550	0.87455	0.95225	1.5433	1.39764	-0.07868
	<i>Exact</i>	0.57277	0.44628	2.68792	0.86231	0.92706	1.56772	1.03 <sup>a</sup>	-0.01725

Tabla 4.2: Valores medios para diferentes cantidades físicas calculadas con las cuatro funciones simples para carga nuclear  $Z = 1, 2$  y  $3$ . Los valores “exactos” son reportados en el trabajo de *Drake 2005* y (a) de *Patil 1990*.

y  $\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle$ ) son bastante sensibles al comportamiento de la función de onda cerca del núcleo (y cerca del punto de coalescencia electrón-electrón, respectivamente); el comportamiento correcto de la función  $\Psi_{ARG}$  en estas regiones se refleja en los valores medios obtenidos. Por otro lado, los valores medios  $\langle r_{3i}^2 \rangle$  y  $\langle r^4 \rangle$ , se obtienen con menor precisión; esto se puede entender fácilmente porque estas cantidades evalúan el comportamiento de las funciones de onda a largas distancias respecto del núcleo, y la  $\Psi_{ARG}$  no posee el comportamiento asintótico correcto.

La función de onda  $\Psi_{ARG}$  (4.18), es una función libre de parámetros. Las energías que se obtienen para  $Z = 1 - 10$ , son mejores a las dadas por otros modelos similares. Contrariamente a lo que ocurre con dichas funciones, la  $\Psi_{ARG}$  predice un estado ligado para  $H^-$ . Adicionalmente, por construcción,  $\Psi_{ARG}$  satisface las tres condiciones de Kato (1.6)

### 4.2.2 Funciones semianalíticas

En la sección anterior mostramos una función de la clase  $\Psi_{C3.I.cc.n_{12}N}$  (ecuación (3.18)) con potencias hasta orden 2, y dimos expresiones analíticas para el coeficiente  $c_{200}$ , la energía media y la normalización. Ahora, trabajaremos con una función de la clase  $\Psi_{GR.ca.cc-N}$  (3.16) cuya diferencia está dada en el factor de correlación. Reemplazándolo en la Ecuación (3.17), la función  $\Psi_{GR.I-3.2}$  (que en el trabajo *Rodriguez, Gasaneo y Mitnik 2007* se la nombra  $\Psi_{GR2}$ ), resulta

$$\Psi_{GR2}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = e^{-Z(r_{31}+r_{32})} \frac{1 + 2\beta - e^{-\beta r_{12}}}{2\beta} [1 + c_{200}(r_{31}^2 + r_{32}^2)]. \quad (4.34)$$

La presencia del parámetro no lineal  $\beta$  hace que, a diferencia de la función  $\Psi_{ARG}$ , no se pueda resolver en forma completamente analítica para obtener la función expresada solo como función de  $Z$ . Sin embargo, es posible encontrar  $\beta(Z)$ ,  $c_{200}(Z)$  y los valores medios de energía  $\langle E \rangle(Z)$  a través de un fiteo de los valores obtenidos variacionalmente.

De acuerdo a la ecuación (3.17),  $\Psi_{GR}$  se define como la suma de productos de potencias y exponenciales. Con estas funciones simples las integrales que definen los elementos de la matriz hamiltoniana  $H_{i,j,k,i',j',k'}^{(1,1,1,1)}$  y el solapamiento  $S_{i,j,k,i',j',k'}^{(1,1,1,1)}$  se pueden realizar analíticamente. El cálculo de las energías no sólo incluye la diagonalización de las ecuaciones (2.8) como en el caso anterior sino que también su optimización respecto a  $\beta$ . La diagonalización puede ser hecha analíticamente hasta ecuaciones de  $4 \times 4$ , pero la optimización tiene que ser hecha numéricamente. El problema se puede simplificar si: i) no se incluye el factor de correlación angular  $\chi_E(r_{12})$  o ii) se dispone de una expresión analítica para el parámetro  $\beta$ . En cualquiera de estas dos situaciones se puede generar expresiones completamente analíticas para la función  $\Psi_{GR2}$ . La posibilidad de tener expresiones analíticas para  $\beta$  como función de la carga  $Z$  reduce considerablemente la dificultad para resolver las ecuaciones (2.8). En este caso el problema se reduce a la solución de un problema de autovalores generalizado estándar para el que hay muchos métodos y códigos numéricos.

De las situaciones mencionadas, la más simple resulta cuando no se incluye el factor de correlación angular  $\chi_E(r_{12})$  en la función de onda de la Ecuación (3.17), y se considera la función  $\Psi_{GR2}$ . A las funciones asociadas con este caso las llamaremos  $\Psi_{GR2nc}$  (nc por no correlacionada)

$Z$	$\langle -E \rangle_{GR2nc}$	$\langle -E_{HF} \rangle^*$	$E_{exacta}$
1	0.497016	—	0.5277
2	2.87212	2.8616	2.9037
3	7.24313	7.2364	7.2799
4	13.6154	13.6112	13.6556
5	21.9886	21.9862	22.0309
6	32.3624	32.3611	32.4062
7	44.7364	44.7361	44.7814
8	59.1107	59.1111	59.1566
9	75.4852	75.4861	75.5317
10	93.8597	93.8611	93.9068

\* T. Koga et al. (1995)

Tabla 4.3: valores de las energías del átomo de He y su serie isoelectrónica, calculadas con la función  $\Psi_{GR2nc}$  (Ecuación (4.35)) y con los métodos de Hartree-Fock (*T. Koga et. al 1995*)

$$\Psi_{GR2nc}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = e^{-Z(r_{31}+r_{32})} \left[ 1 + c_{200}^{(GR2nc)} (r_{31}^2 + r_{32}^2) \right] \quad (4.35)$$

Las expresiones analíticas correspondientes al coeficiente  $c_{200}^{(GR2nc)}$  y la energía  $E^{(GR2nc)}$  son:

$$c_{200}^{(GR2nc)} = \frac{48Z^2}{256Z - 393 + \sqrt{65536Z^2 - 53760Z + 73233}}, \quad (4.36)$$

$$E^{(GR2nc)} = -\frac{1}{1152}Z \left( 896Z - 615 + \sqrt{65536Z^2 - 53760Z + 73233} \right). \quad (4.37)$$

La función de onda no-correlacionada  $\Psi_{GR2nc}$  satisface las condiciones de cúspide electrón-núcleo, pero no satisface la de electrón-electrón. Dado que no se incluye el factor de correlación  $\chi_E(r_{12})$  se verá que los valores de  $E^{(GR2nc)}$  no son tan buenos como lo obtenidos con la función  $\Psi_{GR2}$ , pero sí son comparables o mejores a los obtenidos por los métodos de Hartree-Fock. En la Tabla 4.3, mostramos los valores obtenidos con la ecuación (4.37) y para comparación los correspondientes cálculos con Hartree-Fock (*Koga 1995*), para la secuencia isoelectrónica de He hasta  $Z = 10$ . La precisión de las energías calculadas van de  $3.4 \times 10^{-2}$  para  $Z = 1$  hasta  $4.7 \times 10^{-4}$  para  $Z = 10$ .

En la Figura 4.1 graficamos el coeficiente  $c_{200}^{(GR2nc)}$  y la energía  $E^{(GR2nc)}$  como función de la carga nuclear. De la figura se puede ver que  $c_{200}^{(GR2nc)}$  parece ser una función lineal, pero como se puede inferir de la definición de  $c_{200}^{(GR2nc)}$  el comportamiento lineal se alcanza asintóticamente para valores de carga nuclear altos. Para valores de carga bajos,  $c_{200}^{(GR2nc)}$  se

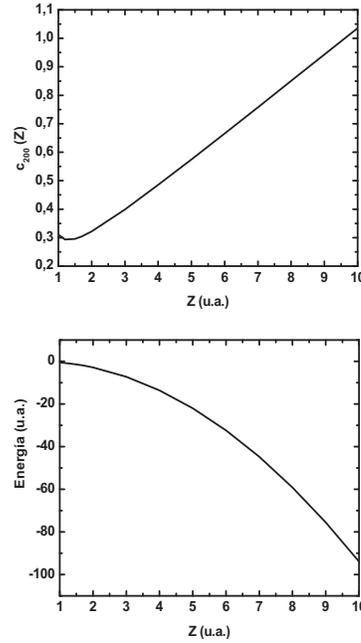


Figura 4.1: Energía de la función GR2nc

aparta considerablemente del comportamiento lineal.

El segundo tipo de simplificación del problema está conectado con la posibilidad de encontrar expresiones analíticas para el parámetro  $\beta$  como función de la carga. Como ya mencionamos, es posible resolver analíticamente las integrales correspondientes a los elementos de matriz del hamiltoniano  $H_{i,j,k;i,j,k}^{(1,1,1,1)}$  y el solapamiento  $S_{i,j,k;i,j,k}^{(1,1,1,1)}$  y obtener expresiones analíticas para las energías que vienen de determinantes de  $4 \times 4$ . Sin embargo, es muy difícil o imposible encontrar expresiones analíticas para el valor óptimo del parámetro no-lineal  $\beta$ . Por esta razón proponemos una aproximación semi-analítica.

En la Figura 4.2 graficamos los valores obtenidos para  $\beta$  y el coeficiente  $c_{200}$  como funciones de la carga nuclear. Podemos ver a grandes rasgos que se ven como funciones lineales y se pueden obtener buenas aproximaciones con fiteos lineales. Esto estaría en acuerdo con el trabajo de *Kleinekathöfer et. al 1996*. Sin embargo, un estudio cuidadoso del comportamiento de  $\beta$  y  $c_{200}$  como funciones de  $Z$  muestra que el comportamiento no es exactamente lineal, sólo lo es para cargas altas. Un comportamiento similar fue observado en  $c_{200}^{(GR2nc)}$ , (ecuación (4.36)), cuando la estudiamos como función de la carga. Por esto, para ajustar  $\beta(Z)$  y  $c_{200}(Z)$  no usamos fiteos lineales, sino funciones similares a las usadas para  $c_{200}^{(GR2nc)}$ .

$$\beta^{(GR2)}(Z) = \frac{Z^2}{77.8498 - 66.0392 Z + \sqrt{4737.8518Z^2 - 10436.7557Z + 5922.2474}}, \quad (4.38)$$

$$c_{200}^{(GR2)}(Z) = \frac{1.9945Z^2}{-16.3362 + 32.969Z + \sqrt{4.93401Z^2 - 19.5053Z + 22.0567}}, \quad (4.39)$$

Para la energía  $E^{(GR2)}(Z)$ , proponemos una función analítica similar a la que se obtuvo para  $E^{(ncGR2)}$

$$E^{(GR2)}(Z) = -Z \left( 0.599107 + 0.033295Z - \sqrt{1.067596 Z^2 - 0.051764 Z + 0.312009} \right). \quad (4.40)$$

Estas definiciones son válidas para todo el rango de cargas nucleares. Los valores obtenidos con  $\beta^{(GR2)}(Z)$ ,  $c_{200}^{(GR2)}(Z)$  y  $E^{(GR2)}(Z)$  hasta  $Z = 10$  están tabulados en la Tabla 4.4; el acuerdo con los resultados optimizados variacionalmente es excelente (ver Figura 4.2). También se puede ver a partir de la tabla que los valores obtenidos para la secuencia iso-electrónica de dos electrones están en mucho mejor acuerdo con los resultados numéricos exactos de *Drake (2005)*, que los obtenidos con la función no correlacionada  $\Psi_{GR2nc}$  con ecuaciones (4.35), (4.36) y (4.37). La precisión de la energías calculadas van de  $1.4 \times 10^{-2}$  para  $Z = 1$ , a  $2.5 \times 10^{-5}$  para  $Z = 10$ . Las definiciones de  $\beta^{(GR2)}(Z)$  y  $c_{200}^{(GR2)}(Z)$  nos permiten tener una expresión analítica para toda la función de onda  $\Psi_{GR2}$  de ecuación (4.34) y para todas las cargas nucleares. Como ejemplo la energía  $E^{(GR2)}$  correspondiente a  $Ti^{20+}(Z = 22)$  es 470.395 u.a. que es mejor que el valor reportado por *Koga et al. 1995* obtenido con el método de Hartree-Fock.

$Z$	$\beta^{(GR2)}(Z)$	$c_{200}^{(GR2)}(Z)$	$-E^{(GR2)}(Z)$	$-E_{exact}$
1	0.0374	0.1029	0.5199	0.5277
2	0.4435	0.1556	2.9013	2.9037
3	0.8122	0.2102	7.27776	7.2799
4	1.1726	0.2651	13.6535	13.6556
5	1.5313	0.3208	22.0289	22.0309
6	1.8895	0.3767	32.4043	32.4062
7	2.2475	0.4329	44.7794	44.7814
8	2.6055	0.4892	59.1545	59.1566
9	2.9634	0.5456	75.5295	75.5317
10	3.3214	0.6021	93.9044	93.9068

Tabla 4.4: valores de los coeficientes y la energía media obtenidos con la función de onda propuesta,  $\Psi_{GR2}$  para la secuencia electrónica de dos electrones.

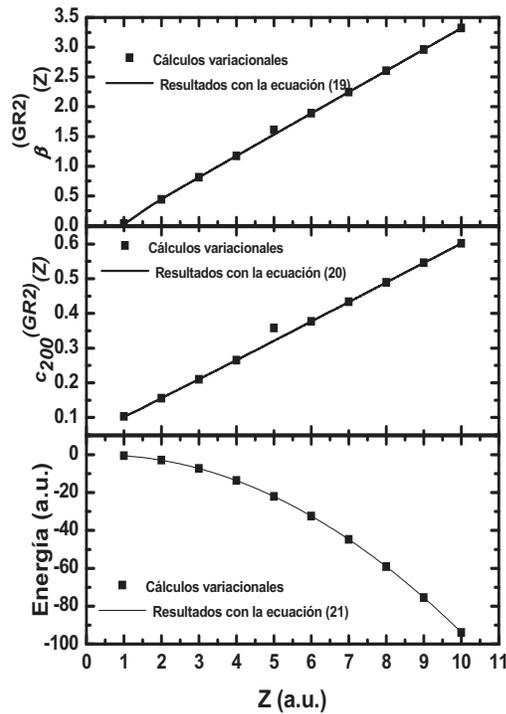


Figura 4.2: Energía y coeficientes de la función GR2, calculados como funciones de la carga nuclear. También se incluyen los valores variacionales.

### 4.2.3 Funciones numéricas

Se pueden obtener funciones de onda altamente correlacionadas agregando más términos en la serie de potencias que define a  $\Omega$ . Esto hace que aumente el número de coeficientes y sea imposible encontrar expresiones analíticas para dichos coeficientes, la energía o la norma de la función de onda. En la Tabla 4.5 presentamos los valores medios de las energías del estado fundamental del átomo de He y el ión  $H^-$  con las funciones  $\Psi_{GR}$  con  $N = 3, 5, 9, 14$  y 27 parámetros (tanto el valor de la normalización como de los coeficientes de cada una de las funciones están dadas en la parte II de la Tesis). En nuestro estudio, tratamos de mantener el grado de la expansión lo más bajo posible. La primera función tabulada en las tablas es  $\Psi_{GRI5.3}$ . La primera función que incluye potencias hasta orden 3 es la función  $\Psi_{GRI7.5}$  con 4 parámetros lineales. Todas las funciones tabuladas satisfacen todas las condiciones de cúspide de Kato de dos cuerpos.

Las funciones para el átomo de He, tabuladas en la Tabla 4.5, son propuestas alternativas a las funciones de Hylleraas con 6-, 10-, 14- y 20-parámetros dadas por *Green et al. (1953)*, por *Chandrasekhar et al. (1953,1955)* y por *Hart y Herzberg (1957)*, respectivamente. Las energías medias reportadas son similares a las obtenidas con las funciones numeradas 9 y 10 del trabajo de *Bonham y Kohl (1966)*, y son mejores que las presentadas por *Le Sech (1997)*, *Moumeni et. al (1990)* y *Siebbeles et. al (1993)*. La función más precisa ( $\Psi_{GRI47.27}$ ) de las presentadas en la Tabla 4.5 alcanza precisiones en las energías de  $4.3 \times 10^{-5}$ .

Para el caso del ión  $H^-$ , nuestras funciones están tabuladas en la Tabla 4.5. Las energías que obtenemos están en muy buen acuerdo con las energías calculadas por *Henrich (1944)* ( $-0.527559$  u.a., obtenida con una función de 11-parámetros) y por *Hart y Herzberg* ( $-0.527645$  u.a., con 20-parámetros). En 1997, *Qiu et. al (1997)* reportaron una función de 43-parámetros (los parámetros no están publicados) para estudiar emisión de uno y dos electrones del  $H^-$  tras la absorción de fotones de alta energía. Esta función, escrita en términos de las coordenadas de Hylleraas, da una energía de  $-0.52768$  u.a., y no satisface las condiciones de cúspide en los puntos de doble coalescencia. Nuestra mejor función  $\Psi_{GR}$  produce casi la misma energía, con un número de parámetros considerablemente menor y con las condiciones de cúspide correctas.

El mismo tipo de estudio ha sido realizado con las funciones  $\Psi_{C3}$  cuyos resultados se presentan en la Tabla 4.6. Usamos valores de  $n_{12} \leq 2$  para todos los casos, con lo que la

	$Z$	$\Psi_{GR.I.5.3}$	$\Psi_{GR.I.7.5}$	$\Psi_{GR.I.15.9}$	$\Psi_{GR.I.21.14}$	$\Psi_{GR.I.47.27}$	<i>Exacto</i>
$\langle -E \rangle$	1	0.52576	0.52532	0.52653	0.52743	0.52767	0.5277
	2	2.90196	2.90286	2.90327	2.90342	2.90359	2.90372
$\langle r_{3i} \rangle$	1	2.54844	2.48061	2.59291	2.63703	2.68987	2.71018
	2	0.93214	0.92893	0.92927	0.92970	0.929594	0.92947
$\langle r_{3i}^2 \rangle$	1	9.56148	8.94859	10.3122	10.7723	11.5406	11.9137
	2	1.19928	1.18977	1.19245	1.19443	1.19397	1.19348
$\left\langle \frac{1}{r_{3i}} \right\rangle$	1	0.68420	0.69695	0.69016	0.68421	0.68375	0.68326
	2	1.67931	1.68703	1.68815	1.68729	1.68880	1.68832
$\langle r_{12} \rangle$	1	4.09253	3.98482	4.20121	4.27402	4.37397	4.41269
	2	1.42146	1.41951	1.42121	1.42217	1.42220	1.42207
$\langle r_{12}^2 \rangle$	1	20.5317	19.3107	22.2379	22.987	24.47063	25.202
	2	2.52059	2.50277	2.51403	2.51776	2.51729	2.51644
$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle$	1	0.32459	0.32982	0.32089	0.31577	0.31209	0.31102
	2	0.94863	0.94783	0.94694	0.94633	0.94603	0.94582

Tabla 4.5: valores de la energía media obtenidos con la función de onda propuesta,  $\Psi_{GR}$  para el átomo de He y el ión hidrógeno.

función hipergeométrica  ${}_1F_1$  de ecuación (3.11) tiene hasta potencias 2 en  $r_{12}$ . El número total de coeficientes para el estado fundamental se puede obtener con la relación  $N = n_{12}(N - 1)$  (usamos  $(N - 1)$  debido a que en el valor  $N$  está contado el parámetro  $\beta$  que no está incluido en las funciones  $\Psi_{C3}$ ). Esta relación también es útil para determinar cuáles funciones  $\Psi_{GR}$  son comparables con las  $\Psi_{C3}$ , desde el punto de vista que tienen la misma combinación de potencias en la función  $\Omega$  (ecuación (3.15)).

Cabe aclarar que cada función utilizada en la Tabla 4.5 tiene su correspondiente en la Tabla 4.6, en relación a que están formadas con la misma función  $\Omega$  y se diferencian en la función de correlación angular neta  $\chi$ . Por ejemplo,  $\Psi_{C3.I.15.2.18}$  es la correspondiente de  $\Psi_{GR.I.15.9}$  porque ambas están formadas con  $\Omega^{15}$ . Si comparamos la energía obtenida con la función más sencilla de la Tabla 4.6,  $\Psi_{C3.I.5.2.6}$  con la obtenida con la función  $\Psi_{GR.I.5.3}$  (ambas formadas con la función  $\Omega^5$ , se puede observar que para el átomo de Helio la segunda es más precisa,  $-2.90190$  u.a. y  $-2.90196$  u.a. respectivamente. Este resultado se invierte para el  $H^-$ ,  $\langle -E \rangle_{\Psi_{C3.I.5.2.6}} = 0.526228$  u.a. y  $\langle -E \rangle_{\Psi_{GR.I.5.3}} = 0.525758$  u.a..

Cuando comparamos funciones más sofisticadas, como el caso de la  $\Psi_{GR.I.21.14}$  y su correspondiente  $\Psi_{C3.I.21.2.28}$  (formadas con  $\Omega^{21}$ ) observamos el mismo comportamiento para el  $He$  y el  $H^-$ . Las energías son  $\langle -E \rangle_{\Psi_{GR.I.21.14}} = 0.527432$  u.a. y  $\langle -E \rangle_{\Psi_{C3.I.21.2.28}} = 0.527544$  u.a. para el ión hidrógeno; y  $\langle -E \rangle_{\Psi_{GR.I.21.14}} = 2.90342$  u.a. y  $\langle -E \rangle_{\Psi_{C3.I.21.2.28}} = 2.90359$  u.a.

	$Z$	$\Psi_{C3.I.5.2.6}$	$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	$\Psi_{C3.I.21.2.28}$	<i>Exacto</i>
$\langle -E \rangle$	1	0.526228	0.525971	0.527341	0.527544	0.5277
	2	2.9019	2.90307	2.90339	2.90356	2.90372
$\langle r_{3i} \rangle$	1	2.58835	2.53055	2.65744	2.66674	2.71018
	2	0.931785	0.929412	0.929542	0.929595	0.929472
$\langle r_{3i}^2 \rangle$	1	10.0858	9.49529	11.0617	11.1969	11.9137
	2	1.19878	1.19191	1.19353	1.19382	1.19348
$\left\langle \frac{1}{r_{3i}} \right\rangle$	1	0.683407	0.692456	0.684685	0.68379	0.683262
	2	1.67981	1.68668	1.6877	1.68769	1.68832
$\langle r_{12} \rangle$	1	4.16804	4.07839	4.31346	4.32982	4.41269
	2	1.42076	1.42116	1.42188	1.42211	1.42207
$\langle r_{12}^2 \rangle$	1	21.5372	20.5144	23.5464	23.8048	25.202
	2	2.51299	2.51294	2.51629	2.5168	2.51644
$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle$	1	0.320225	0.325429	0.314372	0.313621	0.3110215
	2	0.946807	0.946877	0.946162	0.946002	0.945818

Tabla 4.6: valores de la energía media obtenidos con la función de onda propuesta,  $\Psi_{C3}$  para el átomo de He y el ión hidrógeno.

para el átomo de Helio. A partir de los valores de las Tablas 4.5 y 4.6, podemos concluir que la base C3 tiene una convergencia más rápida hacia los valores exactos de la energía y otras cantidades radiales, que la base GR. Si bien es cierto, que ante la misma función  $\Omega$ , las funciones de la base C3 tienen el doble de coeficientes, estos son lineales y tanto los coeficientes como las energías se obtienen en forma directa diagonalizando la matriz hamiltoniana. Las funciones de la base GR, tienen un coeficiente no lineal pero se forman con menor número de parámetros, y su estructura es más compacta al momento de tener que utilizarlas en la resolución de problemas físicos que las involucren.

Utilizando la base C3, también realizamos el cálculo de la energía del estado fundamental de la serie isoelectrónica. En la Tabla 4.7 mostramos el resultado obtenido para los distintos sistemas. Si comparamos las energías calculadas con la función  $\Psi_{C3.I.7.2.10}$ , tabuladas en la Tabla 4.7, con el valor exacto, obtenemos que las precisiones relativas correspondientes a las distintas cargas son:  $1.03 \times 10^{-4}$ ,  $6.59 \times 10^{-5}$ ,  $4.08 \times 10^{-5}$ ,  $2.47 \times 10^{-5}$ ,  $2.01 \times 10^{-5}$ ,  $1.52 \times 10^{-5}$ ,  $1.19 \times 10^{-5}$  y  $9.58 \times 10^{-6}$  respectivamente, y se puede observar que la precisión aumenta a medida que aumenta la carga nuclear  $Z$ .

	$Z$	$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	<i>Exacta</i>
$Li^+$	3	7.27916	7.27952	7.27991
$Be^{2+}$	4	13.6547	13.6551	13.6556
$B^{3+}$	5	22.0301	22.0305	22.0310
$C^{4+}$	6	32.4054	32.4058	32.4062
$N^{5+}$	7	44.7805	44.7810	44.7814
$O^{6+}$	8	59.1557	59.1561	59.1566

Tabla 4.7: valores de la energía media obtenidos con la función de onda propuesta,  $\Psi_{C3}$  para la serie isoelectrónica del átomo de He.

### 4.3 Estados Excitados S

En esta sección extendemos el uso de las bases  $C3$  y  $GR$  a estados excitados S del átomo de He y su serie isoelectrónica. En el caso del ión  $H^-$  (que es el primer ión de la serie), la repulsión electrón-electrón tiene mayor peso que la interacción electrón-núcleo, y esto tiene como consecuencia que el espectro discreto sólo está formado por el estado fundamental y los estados doblemente excitados. Por esto, en lo que sigue cuando discutimos los estados excitados de átomos de dos electrones asumimos implícitamente que estamos tratando con  $Z \geq 2$ .

Una función de onda de prueba de un estado excitado debe ser ortogonal a todas las funciones de onda de todos los autoestados con energías más bajas. Esta condición no siempre se satisface automáticamente. Si para el cálculo de las energías medias de los estados excitados se utiliza el método variacional de Rayleigh-Ritz (*Bransden y Joachain 2003*) las autofunciones del Hamiltoniano no necesariamente resultan ser ortogonales. Sin embargo, si se conoce la autofunción del estado de menor energía y se propone una función de prueba para el estado excitado, se puede obtener por el método de Gram-Schmidt (*Mathews J. y Walker R. L.*) una función ortogonal que puede ser usada para obtener una cota superior de  $E_1$ , la energía exacta del primer estado excitado. Cuando se resuelve el problema generalizado de autovalores (ecuación (2.8)), una única diagonalización provee energías y funciones de onda, para un número de estados excitados, que forman un conjunto ortogonal.

Utilizando el método CICA que presentamos en el capítulo anterior proponemos funciones para los primeros estados excitados S, incluyendo estados doblemente excitados, con distinto números de parámetros.

### 4.3.1 Funciones numéricas

Aplicamos el método CICA, con las bases GR y C3, para construir funciones de onda aproximadas para los primeros estados S del átomo de Helio, con múltiples configuraciones. Esto se obtiene sumando sobre los números cuánticos  $n_1$  y  $n_2$  en las series de las ecuaciones (4.1) y (4.2), e implica incluir correlación tanto angular como radial.

En primer lugar estudiamos los estados excitados S con la base *GR* (ecuación (3.20)). El factor  $\chi_E$  (ecuación (3.10)) tiene una estructura fija que no permite incluir diferentes grados de correlación angular. Por esto, la inclusión de mayor correlación angular y radial se realiza a través del factor  $\Omega$  (ecuación (4.3)). En la Tabla 4.8 presentamos los valores medios de las energías del estado fundamental y de los primeros estados excitados S del átomo de He cuando se incluyen las configuraciones 1s1s, 1s2s, 2s1s, 1s3s, 3s1s, 1s4s y 4s1s. Si bien, para cada estado se debe optimizar un coeficiente  $\beta_{n_1, n_2}$  este procedimiento puede resultar muy complicado debido que al no ser ortogonales las funciones la energía del estado puede caer a la energía de un estado anterior. Por esta razón, realizamos los cálculos para todos los estados con un único valor para el coeficiente no-lineal, fijado en el valor obtenido optimizando la energía del estado fundamental con una sola configuración,  $\beta_{n_1, n_2} = \beta_{1,1} = \beta$  (es decir con las funciones descritas en la sección anterior).

Los resultados están separados en tres grupos definidos por la función  $\Omega$  usada en la serie de potencias, identificadas con el subíndice *cc*. En los tres grupos se observa el mismo comportamiento: las energías medias de los distintos niveles van resultando con mayor precisión al ser incluida su configuración en la función de onda. Por ejemplo, se calcula la precisión del valor de la energía media del estado  $4^3S$  triplete con las funciones  $\Psi_{IV.3.8}$  y  $\Psi_{VI.3.11}$ , resultando  $3.1 \times 10^{-2}$  y  $1.4 \times 10^{-3}$  respectivamente. Esto implica que la precisión aumenta en un orden de magnitud cuando se incluye la configuración 1s 4s en la función de onda.

Si ahora comparamos los valores de las energías obtenidos con funciones de los distintos grupos, es decir con la misma configuración pero distinta función  $\Omega$ , se puede ver que la función  $\Psi_{VII.7.31}$  es la más precisa, con una precisión relativa igual a  $1.7 \times 10^{-4}$ ,  $4.6 \times 10^{-5}$ ,  $2.8 \times 10^{-5}$ ,  $9.7 \times 10^{-6}$ ,  $9.7 \times 10^{-6}$ ,  $6.9 \times 10^{-5}$ ,  $1.7 \times 10^{-4}$  y  $1.2 \times 10^{-2}$  para cada estado, respectivamente.

La base *C3*, por otro lado, permite incluir distintos grados de correlación angular, simplemente variando  $n_{12}$ . Para comparar resultados hemos realizado cálculos con funciones de

$\Psi_{ca.cc.N}$	$\beta$	$\langle E \rangle_{1S}$	$\langle E \rangle_{2^3S}$	$\langle E \rangle_{2^1S}$	$\langle E \rangle_{3^3S}$	$\langle E \rangle_{3^1S}$	$\langle E \rangle_{4^3S}$	$\langle E \rangle_{4^1S}$
<i>II</i> _3_5	0.4435	2.90230	2.17364	2.14154	1.93714	1.86590	0.56291	0.613914
<i>IV</i> _3_8	0.4435	2.90239	2.17487	2.14575	2.06618	2.05602	1.97366	1.94785
<i>VI</i> _3_11	0.4435	2.90242	2.17487	2.14575	2.06861	2.06120	2.03373	2.02878
<i>III</i> _5_11	0.451	2.90247	2.17485	2.14550	2.04550	2.02484	1.83547	1.78219
<i>V</i> _5_16	0.451	2.90259	2.17489	2.14577	2.06838	2.06053	2.01767	2.00614
<i>VII</i> _5_21	0.451	2.90266	2.17489	2.14578	2.06862	2.06122	2.03643	2.03342
<i>II</i> _7_12	0.70	2.90310	2.17504	2.1454	2.0355	2.01017	1.77734	1.71045
<i>III</i> _7_17	0.70	2.90314	2.17504	2.14543	2.0355	2.0102	1.77735	1.71048
<i>V</i> _7_24	0.70	2.90319	2.17513	2.14591	2.06853	2.06084	2.02415	2.01548
<i>VII</i> _7_31	0.70	2.90321	2.17513	2.14591	2.06867	2.06125	2.03637	2.03325
<i>Exact</i>		2.90372	2.17523	2.14597	2.06869	2.06127	2.03651	2.03359

Tabla 4.8: Energías de los primeros estados excitados S del átomo de Helio con la base *GR*.

$\Psi_{ca.cc.n_{12}.N}$	$\langle E \rangle_{1S}$	$\langle E \rangle_{2^3S}$	$\langle E \rangle_{2^1S}$	$\langle E \rangle_{3^3S}$	$\langle E \rangle_{3^1S}$	$\langle E \rangle_{4^3S}$	$\langle E \rangle_{4^1S}$
<i>II</i> _1_2_4	2.89514	2.15315	2.09784	1.67733	1.56735		
<i>III</i> _1_2_6	2.89524	2.15315	2.09881	1.67733	1.58113		
<i>IV</i> _1_2_6	2.89567	2.17249	2.14172	2.04397	2.02038	1.86911	1.80458
<i>V</i> _1_2_8	2.89576	2.17249	2.14173	2.04397	2.02086	1.86911	1.80488
<i>VI</i> _1_2_8	2.89624	2.17294	2.14224	2.06735	2.05884	2.01457	2.00380
<i>VII</i> _1_2_10	2.89630	2.17294	2.14226	2.06735	2.05885	2.01457	2.00390
<i>Exact</i>	2.90372	2.17523	2.14597	2.06869	2.061272	2.03651	2.03359

Tabla 4.9: Energías de los primeros estados excitados S del átomo de Helio con la base *C3*, con  $\Omega = 1$ .

onda con y sin el factor  $\Omega$ . En las tablas 4.9 y 4.10 mostramos los resultados con las funciones  $\Omega = 1$  y  $\Omega^3$  (contenida en la ecuación (4.5)) y con  $n_{12} = 1, 2$ . La primera de las propuestas para la función de onda aproximada tiene la ventaja de tener un número reducido de términos y no contener coeficientes a determinar variacionalmente. Por otro lado, las energías de la tabla 4.10 son obtenidas con la función  $\Omega^3$  que incluye mayor correlación radial. Si comparamos los resultados para los estados  $2^3S$ ,  $3^1S$  y  $4^1S$  con las funciones más precisas de ambas tablas, es decir  $\Psi_{VII.1.2.10}$  y  $\Psi_{VII.3.2.26}$ , las precisiones resultan ser  $1.0 \times 10^{-3}$ ,  $1.2 \times 10^{-3}$ ,  $1.4 \times 10^{-2}$  y  $9.2 \times 10^{-5}$ ,  $3.0 \times 10^{-5}$ ,  $7.5 \times 10^{-4}$  respectivamente, es decir que el haber incluido mayor correlación aumenta en dos ordenes de magnitud la precisión de los valores de energías buscados.

En la tabla 4.11 mostramos que los resultados mejoran notablemente si: i) se aumenta el valor de  $n_{12}$ , ii) se incluyen las configuraciones del estado al que se le quiere calcular la energía. El primer punto se puede comprobar comparando las tres primeras filas de la tabla cuyos resultados se obtienen aumentando  $n_{12}$  desde 2 hasta 4. Lo mismo se puede observar

$\Psi_{ca.cc.n_{12}-N}$	$\langle E \rangle_{1S}$	$\langle E \rangle_{2^3S}$	$\langle E \rangle_{2^1S}$	$\langle E \rangle_{3^3S}$	$\langle E \rangle_{3^1S}$	$\langle E \rangle_{4^3S}$	$\langle E \rangle_{4^1S}$
<i>II</i> _3_2_10	2.90264	2.17502	2.14566	2.05968	2.04621	1.94593	1.92044
<i>III</i> _3_2_14	2.90267	2.17502	2.14568	2.0597	2.04628	1.94607	1.92066
<i>IV</i> _3_2_16	2.90270	2.17503	2.14577	2.06863	2.06117	2.03284	2.02773
<i>V</i> _3_2_20	2.90274	2.17503	2.14578	2.06863	2.06117	2.03284	2.02774
<i>VI</i> _3_2_22	2.90249	2.17503	2.14573	2.06864	2.06121	–	–
<i>VII</i> _3_2_26	2.90266	2.17503	2.14576	2.06864	2.06121	2.03575	2.03207
<i>Exact</i>	2.90372	2.17523	2.14597	2.06869	2.061272	2.03651	2.03359

Tabla 4.10: Energías de los primeros estados excitados S del átomo de Helio con la base  $C3$ , con la función  $\Omega$ .

$\Psi_{ca.cc.n_{12}-N}$	$n_{12}$	$\langle E \rangle_{1S}$	$\langle E \rangle_{2^3S}$	$\langle E \rangle_{2^1S}$	$\langle E \rangle_{3^3S}$	$\langle E \rangle_{3^1S}$	$\langle E \rangle_{4^3S}$	$\langle E \rangle_{4^1S}$
<i>II</i> _3_2_10	1,2	2.90264	2.17502	2.14566	2.05968	2.04621	1.94593	1.92044
<i>II</i> _3_3_15	1,2,3	2.90302	2.17520	2.14587	2.06310	2.05139	1.97012	1.94969
<i>II</i> _3_4_20	1,2,3,4	2.90320	2.17521	2.1459	2.06517	2.05469	1.98833	1.97178
<i>IV</i> _3_2_16	1,2	2.90270	2.17503	2.14577	2.06863	2.06117	2.03284	2.02773
<i>IV</i> _3_3_24	1,2,3	2.90305	2.17521	2.14591	2.06868	2.06124	2.03453	2.03021
<i>Exact</i>		2.90372	2.17523	2.14597	2.06869	2.06127	2.03651	2.03359

Tabla 4.11: Energías de los primeros estados excitados S del átomo de Helio con la base  $C3$ , variando el valor de  $n_{12}$ .

con las dos últimas filas. El segundo punto se puede verificar comparando los valores para las energías del estado  $3^1S$ , 2.05139 y 2.06124 obtenidas con las funciones de configuración atómica *II* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s)$  y *IV* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s)$ , siendo el valor aceptado como “exactos” el valor 2.06127.

De la misma manera que calculamos la energía del estado fundamental y los primeros estados excitados para el átomo de Helio, también lo hacemos para su serie isoelectrónica. En la tabla 4.12 mostramos los valores de energía obtenidos con la función  $\Psi_{VII.3.2.26}$  y los comparamos con los calculados por *Drake 2005* y *Can et al. 1992*.

Z	$\langle -E \rangle_{1S}$	$\langle -E \rangle_{2^3S}$	$\langle -E \rangle_{2^1S}$	$\langle -E \rangle_{3^3S}$	$\langle -E \rangle_{3^1S}$	$\langle -E \rangle_{4^3S}$	$\langle -E \rangle_{4^1S}$
2	2.90266	2.17503	2.14576	2.06864	2.06121	2.03575	2.03207
	2.90372 <sup>a</sup>	2.17523 <sup>a</sup>	2.14597 <sup>a</sup>	2.06869 <sup>a</sup>	2.06127 <sup>a</sup>	2.03651 <sup>a</sup>	2.03359 <sup>a</sup>
3	7.27858	5.11034	5.04039	4.75198	4.73361	4.63702	4.62954
	7.27991	5.11073	5.04088	4.75208	4.73376	4.63714	4.62978
4	13.6541	9.29664	9.18417	8.54682	8.51708	8.30039	8.28836
	13.6556	9.29717	9.18487	8.54697	8.51731	8.30045	8.28849
5	22.0294	14.7333	14.5776	13.4529	13.4117	13.0263	13.0096
	22.0310	14.7339	14.5785	13.4531	13.4120	13.0263	13.0097
6	32.4046	21.4200	21.2210	19.4702	19.4174	18.8146	18.7933
	32.4062	21.4207	21.2220	19.4704	19.4178	18.8147	18.7935
7	44.7797	29.3569	29.1143	26.5986	26.5343	25.6656	25.6395
	44.7814	29.3577	29.1154	26.5988	26.5347	25.6657	25.6397
8	59.1548	38.5438	38.2575	34.8381	34.7624	33.5790	33.5483
	59.1566	38.5446	38.2587	34.8384	34.7628	33.5791	33.5485
9	75.5299	48.9807	48.6508	44.1888	44.1015	42.5549	42.5195
	75.5317	48.9816	48.6521	44.18910	44.1020	42.5550	42.5197
10	93.9049	60.6677	60.2940	54.6506	54.5517	52.5933	52.5533
	93.9068	60.6686	60.2953	54.6509	54.5522	52.5935	52.5535

Tabla 4.12: Energías de los primeros estados excitados S de la serie isoelectrónica del átomo de He con la base  $C3$ , con el factor  $\Omega^3$ . <sup>a</sup> Drake 2005, el resto de los valores son reportados del trabajo de Can et al. 1992.

$\Psi_{GR.ca.cc.N}$	$\beta$	$\langle E \rangle_{1S}$	$\langle E \rangle_{2^3S}$	$\langle E \rangle_{2^1S}$	$\langle E \rangle_{3^3S}$	$\langle E \rangle_{3^1S}$	$\langle E \rangle_{2^2S}$
<i>IV_3_8</i>	0.4435	2.90239	2.17487	2.14575	2.06618	2.05602	0.52559
<i>V_3_10</i>	0.4435	2.90254	2.17487	2.14576	2.06618	2.05603	0.73719
<i>IV_5_13</i>	0.451	2.90259	2.17489	2.14577	2.06838	2.06053	0.72277
<i>V_5_16</i>	0.451	2.90259	2.17489	2.14577	2.06838	2.06053	0.73666
<i>IV_7_19</i>	0.70	2.90317	2.17513	2.14588	2.06853	2.06083	0.70465
<i>V_7_24</i>	0.70	2.90319	2.17513	2.14591	2.06853	2.06084	0.77063
$\Psi_{C3.ca.cc.n12.N}$							
<i>IV_1_2_6</i>	–	2.89567	2.17249	2.14172	2.04397	2.02038	
<i>V_1_2_8</i>	–	2.89576	2.17249	2.14173	2.04397	2.02086	0.77522
<i>IV_3_2_26</i>	–	2.90270	2.17503	2.14577	2.06863	2.06117	0.77211
<i>V_3_2_32</i>	–	2.90274	2.17503	2.14578	2.06863	2.06117	0.77576
<i>Exact</i>		2.90372	2.17523	2.14597	2.06869	2.06127	0.7776

Tabla 4.13: Energía del primer estado doblemente excitado S del átomo de He con las bases *GR* y *C3*.

### Estados doblemente excitados $2s^2$

Para finalizar este capítulo realizamos un estudio del primer estado doblemente excitado del He. En la tabla 4.13 se muestran los valores de energía del estado  $2s^2 \ ^1S$  obtenidos con las bases *GR* y *C3*. Se calcula con las configuraciones atómicas *IV* ( $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s)$ ) y *V* ( $IV + 2s2s$ ), se puede notar que la inclusión de la configuración  $2s2s$  no modifica la precisión de las energías de los primeros estados S. Sin embargo, se observa que las energías del estado  $2s^2$  calculadas con las funciones de onda que incluyen el  $2s2s$  tienen buen acuerdo con los valores  $-0.7685$  u.a. y  $-0.7776$  u.a. reportados por *Lipsky et al. (1977)* y *Dulieu et al. (1989)*, respectivamente.

---

## 4.4 Conclusiones

*En este capítulo aplicamos el método de configuración interacción con correlación angular (CICA), y construimos funciones de onda para el estado fundamental y los primeros estados excitados del átomo de He y su serie isoelectrónica. Todas las funciones propuestas satisfacen las condiciones de cúspide donde el potencial coulombiano diverge y tienen un número de coeficientes moderado. Esto ha sido motivado, entre otras razones, por el deseo de proveer a la comunidad colisionista de funciones de onda sencillas pero con precisión similar a las tradicionales funciones de Hylleraas, y que cumplan con las condiciones de Kato.*

# Capítulo 5

## Sistemas atómicos de tres cuerpos con masa nuclear finita.

### Introducción

Desde el punto de vista teórico el problema de los tres cuerpos es muy importante porque éste presenta la mayoría de las propiedades del problema de muchos cuerpos. El problema no es trivial y sus soluciones no son conocidas. Por esta razón, el problema se comienza a tratar bajo ciertas aproximaciones. En el capítulo anterior se realizaron todos los cálculos en la aproximación de masa nuclear infinita, esto implica que los términos del hamiltoniano multiplicados por  $1/m_3$  sean nulos resultando así un operador más sencillo. En el caso mencionado, el término  $\frac{1}{m_3}\nabla_{32} \cdot \nabla_{31}$  incluido en el operador  $D_1$  (ecuación (2.3)) es nulo.

Los estados ligados de diferentes sistemas reales (teniendo en cuenta la masa) han sido motivo de estudio y se han propuesto funciones de onda aproximadas de diferentes características (*Frolov y Yeregin 1989, Frolov y Smith Jr. 1995, Frolov 1998, Frolov 2000, Patil 2006*).

En este capítulo construimos funciones de onda altamente correlacionadas para sistemas atómicos de tres cuerpos, con masas generales, en los que una de las partículas está cargada positivamente y es más pesada que las otras dos que están cargadas negativamente. Las funciones de onda son construídas con el método CICA presentado en el Capítulo 2. La eficiencia de nuestro método es demostrada considerando los siguientes sistemas atómicos:

sistemas tipo hidrogenoides cargados negativamente ( ${}^{\infty}\text{H}^-$ ,  $\text{T}^-$ ,  $\text{D}^-$ ,  ${}^1\text{H}^-$  y  $\text{Mu}^-$ ); sistemas exóticos, sistemas neutros tipo helioides ( $e^-e^-{}^{\infty}\text{He}^{+2}$ ,  $e^-e^-{}^4\text{He}^{+2}$ ,  $e^-e^-{}^3\text{He}^{+2}$ ,  $e^-{}^{\mu^-}{}^{\infty}\text{He}^{+2}$ ,  $e^-{}^{\mu^-}{}^4\text{He}^{+2}$  y  $e^-{}^{\mu^-}{}^3\text{He}^{+2}$ ), y sistemas tipo-ion-litoides cargados positivamente ( $e^-e^-{}^{\infty}\text{Li}^{+3}$ ,  $e^-e^-{}^7\text{Li}^{+3}$ ,  $e^-e^-{}^6\text{Li}^{+3}$ ,  $e^-{}^{\mu^-}{}^{\infty}\text{Li}^{+3}$ ,  $e^-{}^{\mu^-}{}^7\text{Li}^{+3}$  and  $e^-{}^{\mu^-}{}^6\text{Li}^{+3}$ ). Las energías calculadas con funciones con un número moderado de parámetros lineales, son de una calidad intermedia entre los valores altamente precisos presentados por Frolov ( *Frolov 2006*), y los obtenidos con funciones de onda simples como los dados en los trabajos de *Flores y Rivas-Silva 1999* y *Ancarani y Gasaneo 2008*. Una de las ventajas del método CICA es que genera funciones de onda que satisfacen naturalmente las condiciones de cúspide de Kato. Entonces las funciones de onda que construimos son (i) suficientemente simples y precisas para ser usadas en cálculos de colisiones atómicas; (ii) satisfacen exactamente las condiciones de cúspide de doble coalescencia. Para la mayoría de los sistemas que estudiamos en la literatura, no hay funciones de onda con estas características.

En este capítulo presentamos nuestros resultados para los sistemas mencionados esto incluye la expresión explícita de las funciones de onda, los valores medios de la energía y otras cantidades físicas, y las comparaciones detalladas de estos valores con valores “exactos” de referencia, cuando estos estén disponibles.

## 5.1 Estado Fundamental.

En este capítulo aplicamos el método CICA, a sistemas tipo hidrogenoides cargados negativamente ( $Z = 1$ ); sistemas neutros tipo helioides ( $Z = 2$ ), y sistemas litoides cargados positivamente ( $Z = 3$ ). Dado que en esta sección consideramos el estado fundamental de los distintos sistemas, al construir las funciones de onda con las ecuaciones (3.20) y (3.21), los números cuánticos  $n_1$  y  $n_2$  se fijan en 1. Con el objetivo de proponer funciones aproximadas que sean razonablemente simples y suficientemente precisas, realizamos todos los cálculos con  $n_{12} = 1, 2$ .

Proponemos funciones de onda con distintas calidades, definidas con 14, 18, 20 y 30 parámetros. Se debe notar que cuando las dos partículas livianas son idénticas, los coeficientes deben satisfacer las relaciones de simetría discutidas en el capítulo 4, reduciéndose el número de coeficientes. De esta manera las funciones de 20 y 30 parámetros resultan con 14 y 18,

respectivamente.

Al igual que en el capítulo 4, testeamos la calidad de la función de onda de prueba calculando la energía media del estado fundamental y los valores medios de otras cantidades físicas. En la Parte II de esta Tesis, presentamos los coeficientes lineales  $c_{ijk}^{n_1 n_2 n_{12}}$  y las constantes de normalización de las funciones de onda de la ecuación (4.2) con  $\Omega^{10}$  y  $\Omega^{15}$  (con ecuaciones (4.8) y (4.4)) respectivamente) para todos los sistemas mencionados. Para poder comparar nuestros resultados numéricos con los valores de referencia dados por Frolov (*Frolov 1998* y *Frolov 2000*), consideramos los mismos valores para las masas, que fueron sacados de *Cohen y Taylor 1998*. Para los iones tipo hidrogenoides se tiene: la masa del protón  $m_p = 1836.152701 m_e$ , la masa del deuterio  $m_d = 3670.483014 m_e$ , la masa del tritio  $m_t = 5496.92158 m_e$  y la masa muónica  $m_\mu = 206.768262 m_e$ . Para el núcleo de  $He^{2+}$ , usamos  $m_3 = 7294.2996$  para el  ${}^4He^{2+}$  y  $m_3 = 5495.8852$  para el  ${}^3He^{2+}$ . Y para los núcleos  $Li^{3+}$  utilizamos los mismos valores que Frolov (en *Frolov 2006*)  $m_3 = 10961.8968$  para  ${}^6Li^{3+}$  y  $m_3 = 12786.3927$  para  ${}^7Li^{3+}$ .

### 5.1.1 Iones negativos ${}^\infty H^-, H^-, D^-, T^-$ y muonio $Mu^-$

En primer lugar consideramos los iones tipo-hidrogenoides, compuestos por dos electrones y una tercera partícula más pesada con carga  $z_3 = Z = 1$ :  ${}^\infty H^-, H^-, D^-, T^-$  y muonio  $Mu^-$ . Todos estos sistemas tienen la particularidad que poseen un único estado ligado (el fundamental), un estado singlete con  $L = 0$  y sólo difieren entre ellos en su masa nuclear. Como ya mencionamos, dada la simetría del sistema, las funciones de onda resultan ser  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.18}$  con 14 y 18 coeficientes lineales, respectivamente. En la Tabla 5.1, las energías medias y los valores medios de las cantidades radiales obtenidas con las funciones  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.18}$  son comparados con los valores reportados por Frolov *1998* obtenidos con 800 funciones de base. La energía media obtenida para el sistema  $Mu^-$  tiene una precisión relativa de  $7.8 \times 10^{-4}$ . Precisiones similares se obtienen para el resto de los sistemas considerados en la tabla. Consideramos que es un muy buen resultado teniendo en cuenta el bajo número de términos usados en la base. Recientemente, *Flores-Rivero y Rivas-Silva (1999)* propusieron funciones de onda para estos iones. Ellos comparan sus funciones denominadas Eckart-Gaussiana con funciones de onda de Hylleraas de 4 y 10 términos, llamadas  $\Psi_{S4}$  y  $\Psi_{S10}$  respectivamente. La función de onda  $\Psi_{S10}$  da un valor de energía media de  $-0.526701$

u.a. para el  $D^-$  y  $-0.526751$  u.a. para  $T^-$ . Debe mencionarse, que a diferencia de las muestras, estas funciones de prueba no satisfacen las condiciones de cúspide. Estos autores no publicaron los valores de los coeficientes no-lineales de las funciones con las que realizan sus cálculos.

Como ya mencionamos, las funciones de onda aproximadas que proponemos se pueden mejorar sistemáticamente, sin dejar de satisfacer las condiciones de doble coalescencia incluyendo: (i) más correlación angular, aumentando el valor de  $n_{12}$ , o (ii) más términos en  $\Omega$ . Por ejemplo, para el ión  ${}^\infty H^-$  el valor de la energía obtenida con la función  $\Psi_{C3J.10.2.14}$  y  $n_{12}$  hasta 2 es  $-0.526438$  u.a.; y si se usa  $n_{12} = 3$  (que implica que la función tiene 27 términos) la energía obtenida mejora a  $-0.526666$  u.a.. Por otro lado, cuando se incrementa el número de términos en  $\Omega$ , por ejemplo aumentando de 14 a 18 coeficientes lineales, se puede ver en la Tabla 5.1 que las energías obtenidas resultan más precisas. Esto pone en evidencia las contribuciones individuales de los factores de correlación  $\chi$  y  $\Omega$ . En la Tabla 5.1, también se puede ver que al aumentar el número de términos en  $\Omega$ , no sólo se obtienen mejores resultados para la energía sino también de los valores medios de las cantidades radiales.

		$Mu^-$	${}^1H^-$	$D^-$	$T^-$	${}^\infty H^-$
$\langle -E \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	0.52373	0.52613	0.52628	0.52633	0.52644
	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	0.52464	0.52703	0.52719	0.52724	0.52734
	Exact	0.52505	0.52744	0.52760	0.52765	0.52775
$\langle r_{3i} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	2.56767	2.5552	2.55441	2.55415	2.55362
	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	2.67316	2.65922	2.65833	2.65804	2.65744
	Exact	2.72718	2.71209	2.71114	2.71082	2.71018
$\langle r_{3i}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	9.88098	9.7846	9.77849	9.77646	9.77238
	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	11.1969	11.0769	11.0693	11.0668	11.0617
	Exact	12.0742	11.9317	11.9227	11.9197	11.9137
$\left\langle \frac{1}{r_{3i}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	0.68758	0.69073	0.69093	0.69099	0.69113
	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	0.68110	0.68428	0.68448	0.68455	0.68468
	Exact	0.67965	0.68285	0.68306	0.68312	0.68326
$\langle r_{12} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	4.13923	4.12060	4.11942	4.11903	4.11824
	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	4.33763	4.31619	4.31483	4.31437	4.31346
	Exact	4.43928	4.41569	4.41419	4.41369	4.41269
$\langle r_{12}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	21.2139	21.0264	21.0145	21.0105	21.0026
	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	23.8103	23.5761	23.5613	23.5564	23.5464
	Exact	25.5145	25.2372	25.2196	25.2138	25.2020
$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	0.32140	0.32292	0.32302	0.32305	0.32312
	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	0.31259	0.31417	0.31427	0.31430	0.31437
	Exact	0.30920	0.31081	0.31092	0.31095	0.31102

Tabla 5.1: Valores medios de energía y de varias cantidades radiales, para el estado fundamental de sistemas de tres cuerpos tipo hidrogenoides cargados negativamente, usando las funciones aproximadas  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.18}$ . Los valores obtenidos se comparan con los valores numéricos “exactos” reportados en *Frolov 1998*.

### 5.1.2 Sistemas exóticos

Al igual que los sistemas de tres cuerpos estudiados en la sección anterior, los sistemas exóticos que estudiamos tienen carga nuclear  $Z = 1$ . El ión positronio es el primer sistema de una lista de sistemas de la forma  $e^-e^-(nm_e)^+$  donde  $(nm_e)^+$  se refiere a partículas exóticas cuyas masas son  $n$  veces la masa del positrón, pero con la carga del positrón positiva (+).

Frolov notó que para los sistemas estudiados en esta sección se pueden obtener expresiones analíticas para los valores medios de la energía y cantidades radiales, como funciones de la masa de la partícula más pesada,  $m_3$  (Frolov 1998) a partir de la siguiente fórmula:

$$\langle X (^M H^-) \rangle = \langle X (\infty H^-) \rangle + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\alpha_j(X)}{m_3^j}. \quad (5.1)$$

$X (\infty H^-)$  representa cualquiera de las cantidades físicas asociadas con los sistemas de tres cuerpos que consideramos y los  $\alpha_j(X)$  son los coeficientes de la expansión de dichas cantidades en potencias inversas de la masa nuclear del sistema. Usaremos este resultado para dar expresiones analíticas aproximadas para algunos valores medios. En primer lugar, transformamos la serie infinita de ecuación (5.1) en una serie finita,

$$\langle X (^M H^-) \rangle \simeq \langle X (\infty H^-) \rangle + \sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j(X)}{m_3^j}. \quad (5.2)$$

Ahora, fiteamos los valores numéricos previamente obtenidos utilizando la suma de ecuación (5.2). Se probaron diferentes números de términos en la suma, hasta que los valores de la expansión coincidieron con la última figura de los resultados variacionales obtenidos. La mejor aproximación en este caso correspondió a una serie con  $n = 6$ . Las expresiones obtenidas para los valores medios,  $\langle E (^{m_3} H^-) \rangle$ ,  $\langle r_{31} (^{m_3} H^-) \rangle$  y  $\langle r_{12} (^{m_3} H^-) \rangle$  como función de la masa nuclear  $m_3$  son:

$$\begin{aligned} \langle E (^{m_3} H^-) \rangle = & \langle E (\infty H^-) \rangle + \frac{0.561565}{m_3} - \frac{0.652826}{m_3^2} + \frac{0.81148}{m_3^3} \\ & - \frac{0.951078}{m_3^4} + \frac{0.785261}{m_3^5} - \frac{0.288451}{m_3^6} \end{aligned} \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \langle r_{31} ({}^{m_3}H^-) \rangle = & \langle r_{31} ({}^\infty H^-) \rangle + \frac{3.25472}{m_3} - \frac{1.10482}{m_3^2} + \frac{0.944598}{m_3^3} \\ & - \frac{0.617613}{m_3^4} + \frac{0.224979}{m_3^5} - \frac{0.025594}{m_3^6} \end{aligned} \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} \langle r_{12} ({}^{m_3}H^-) \rangle = & \langle r_{12} ({}^\infty H^-) \rangle + \frac{5.00743}{m_3} - \frac{1.92955}{m_3^2} + \frac{1.45085}{m_3^3} \\ & - \frac{0.661701}{m_3^4} - \frac{0.0359845}{m_3^5} - \frac{0.125899}{m_3^6} \end{aligned} \quad (5.5)$$

Otros valores medios pueden obtenerse procediendo de manera similar.

En la Figura 5.1 (a), (b) y (c) se grafican los valores medios dados por las ecuaciones (5.3), (5.4) y (5.5) como función de  $m_3$ . También se incluyen los valores numéricos dados en la Tabla 5.2. El acuerdo es tan bueno como se esperaba, debido a que los parámetros  $\alpha_j(X)$  de la ecuación (5.2) fueron ajustados para que los valores obtenidos con las ecuaciones (5.3), (5.4) y (5.5) tengan la misma precisión que los valores dados en las tablas.

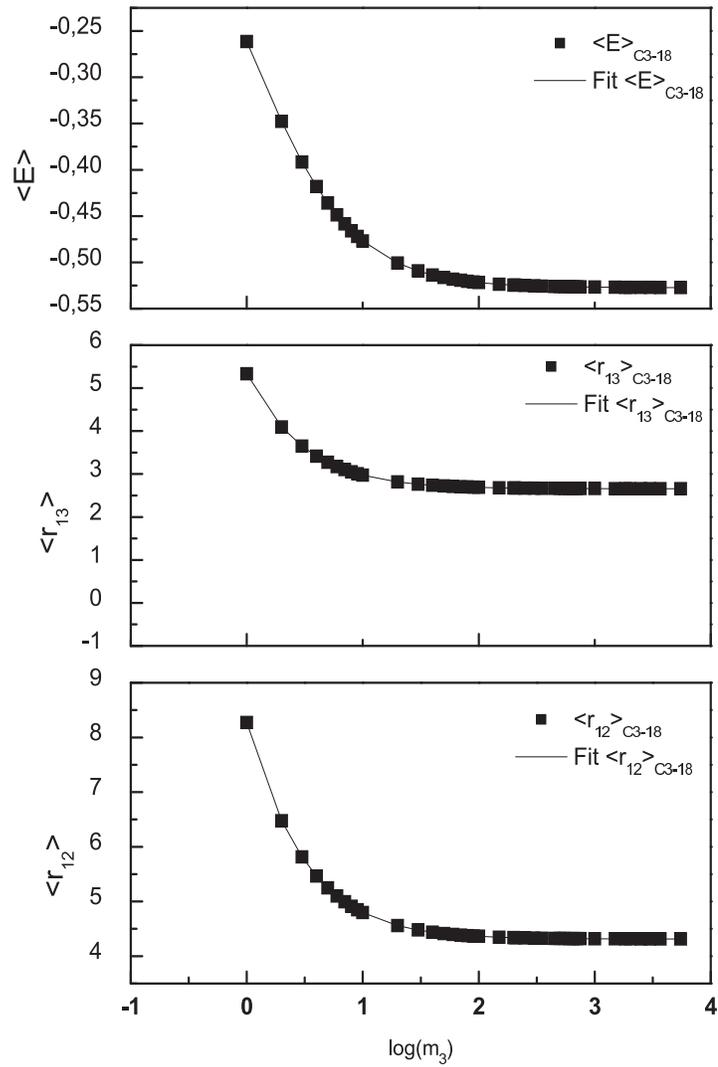


Figura 5.1: Valor medio de la energía y valor medio de las distancias electrón-núcleo y electrón-electrón, como función de la masa nuclear  $m_3$  para sistemas exóticos.

$n$	$-E_{C3.I.10.2.14}$	$-E_{C3.I.15.2.18}$	$-E_{Frolov}$
1	0.260484	0.261393	0.262005
2	0.346577	0.347743	0.348372
3	0.390335	0.391537	0.392141
4	0.416905	0.418095	0.418673
5	0.434773	0.43594	0.436497
6	0.447618	0.448763	0.449303
7	0.457301	0.458425	0.458951
8	0.464862	0.465968	0.466483
9	0.470931	0.472022	0.472526
10	0.47591	0.476987	0.477484
20	0.499796	0.500797	0.501254
30	0.508346	0.509317	0.509759
40	0.512741	0.513696	0.514309
50	0.515418	0.516363	0.516793
60	0.51722	0.518158	0.518585
70	0.518515	0.519449	0.519872
80	0.519491	0.520421	0.520843
90	0.520253	0.52118	0.521601
100	0.520864	0.521789	0.522209
200	0.523635	0.524549	0.524964
1000	0.525875	0.52678	0.527191
$\infty$	0.526438	0.527341	0.527751

Tabla 5.2: Se comparan los valores de energías medias del estado fundamental de los sistemas de la forma  $e^-e^-(nm_e)^+$  obtenidos con las funciones de onda aproximadas  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.18}$  con los valores numéricos “exactos” calculados por *Frolov 1998*.

### 5.1.3 Sistemas helioides

En esta sección consideramos los siguientes sistemas neutros tipo helioides:  $e^-e^{-\infty}He^{+2}$ ,  $e^-e^{-4}He^{+2}$ ,  $e^-e^{-3}He^{+2}$ ,  $e^-\mu^{-\infty}He^{+2}$ ,  $e^-\mu^{-4}He^{+2}$  y  $e^-\mu^{-3}He^{+2}$  de carga nuclear  $Z = 2$ . Los resultados para las energías y otros valores medios obtenidos con las funciones  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.18}$  para los sistemas,  $e^-e^{-\infty}He^{+2}$ ,  $e^-e^{-4}He^{+2}$  y  $e^-e^{-3}He^{+2}$  son prácticamente los mismos dentro del grado de precisión considerado. Por esta razón, sólo presentamos los resultados con la más sencilla de las funciones,  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$ . En la Tabla 5.4 se muestran los valores medios calculados, de la energía y otras cantidades físicas. La precisión de los cálculos para los sistemas con masa nuclear finita resulta ser similar a la reportada para el sistema  $e^-e^{-\infty}He^{+2}$ ,  $1.2 \times 10^{-4}$ . Para los valores medios restantes no hemos encontrado en la literatura resultados con los que podamos comparar.

Para los siguientes sistemas tipo helioides no-simétricos, donde uno de los electrones es cambiado por un muón:  $e^-\mu^{-\infty}He^{+2}$ ,  $e^-\mu^{-4}He^{+2}$  y  $e^-\mu^{-3}He^{+2}$  usamos las funciones de onda  $\Psi_{C3.I.10.2.20}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.30}$  que resultan de  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.18}$  pero sin la condición de simetría. En la Tabla 5.4 se puede observar la convergencia de los resultados en función del número de términos en la serie  $\Omega$ . Cuando comparamos con los resultados “exactos” la precisión relativa para el valor de energía que se obtiene con la función  $\Psi_{C3.I.10.2.20}$  para el sistema  $e^-\mu^{-\infty}He^{+2}$  es  $4.3 \times 10^{-8}$  y  $3.5 \times 10^{-8}$  con la función  $\Psi_{C3.I.15.2.30}$ , resultando ser del mismo orden. Sin embargo, si observamos en la Tabla 5.4, los valores medios de las cantidades radiales obtenidos con la función  $\Psi_{C3.I.15.2.30}$  son más precisos que aquellos que son calculados con la función más simple,  $\Psi_{C3.I.10.2.20}$ . Por ejemplo, la precisiones relativas de la cantidad  $\left\langle \frac{1}{r_{32}} \right\rangle$  calculadas con las funciones  $\Psi_{C3.I.15.2.30}$  y  $\Psi_{C3.I.10.2.20}$  son  $2.42 \times 10^{-6}$  y  $3,6 \times 10^{-2}$ . Si bien esta diferencia no se mantiene con todas las cantidades se puede ver que aunque los resultados obtenidos en el cálculo de la energía son de precisión similar, las cantidades radiales están mejor representadas por la función de mayor cantidad de términos,  $\Psi_{C3.I.15.2.30}$ , reafirmando así que no basta observar los valores de energía media para testear la calidad de una función. A estas mismas conclusiones llegamos para los sistemas en los que tomamos la masa nuclear finita,  $e^-\mu^{-4}He^{+2}$  y  $e^-\mu^{-3}He^{+2}$ . Hay que notar, que a diferencia de los sistemas de tres cuerpos estudiados previamente, los valores medios de  $r_{31}$  y  $r_{32}$  no son iguales debido a que ahora las partículas 1 y 2 son diferentes.

		$e^-e^-^\infty\text{He}^{+2}$	$e^-e^-^4\text{He}^{+2}$	$e^-e^-^3\text{He}^{+2}$
$\langle -E \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	2.90337	2.90295	2.90282
	<i>Exact</i>	2.90372	2.90330	2.90317
$\langle r_{3i} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	0.92947	0.92961	0.92965
	<i>Exact</i>	0.92947	–	–
$\langle r_{3i}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	1.19281	1.19316	1.19327
	<i>Exact</i>	1.19348	–	–
$\left\langle \frac{1}{r_{3i}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	1.68730	1.68706	1.68698
	<i>Exact</i>	1.68832	–	–
$\langle r_{12} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	1.42163	–	–
	<i>Exact</i>	1.42207	–	–
$\langle r_{12}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	2.51472	2.51534	2.51555
	<i>Exact</i>	2.51644	–	–
$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	0.94632	0.94620	0.94616
	<i>Exact</i>	0.94582	–	–

Tabla 5.3: Los valores medios de la energía y otras cantidades radiales del estado fundamental de los sistemas  $e^-e^-^\infty\text{He}^{+2}$ ,  $e^-e^-^4\text{He}^{+2}$  y  $e^-e^-^3\text{He}^{+2}$  obtenidos con la función  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.18}$  son comparados con los valores numéricos “exactos” dados en *Drake 2005*.

		$e^- \mu^{-\infty} \text{He}^{+2}$	$e^- \mu^{-4} \text{He}^{+2}$	$e^- \mu^{-3} \text{He}^{+2}$
$\langle -E \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	414.0365192	402.6372416	399.0423138
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	414.0365223	402.6372484	399.0423193
	<i>Exact</i>	414.0365369	402.6372630	399.0423368
$\langle r_{31} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	1.50053	1.49970	1.49945
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	1.49996	1.50016	1.50024
	<i>Exact</i>	1.49996	1.50016	1.50022
$\langle r_{31}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	2.99713	2.99500	2.99443
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	2.99955	3.00032	3.00070
	<i>Exact</i>	2.99986	3.00065	3.00090
$\left\langle \frac{1}{r_{31}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	1.00028	1.00002	0.999919
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	1.00003	0.99990	0.999835
	<i>Exact</i>	1.00004	0.99990	0.99986
$\langle r_{32} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	0.00377	0.00376	0.00376
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	0.00363	0.00373	0.00376
	<i>Exact</i>	0.00363	0.00373	0.00376
$\langle r_{32}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	0.000018898	0.00001890	0.00001889
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	0.000017542	0.00001855	0.00001889
	<i>Exact</i>	0.000017543	0.00001855	0.00001889
$\left\langle \frac{1}{r_{32}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	398.760	398.596	398.542
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	413.537	402.137	398.542
	<i>Exact</i>	413.536	402.137	398.532
$\langle r_{12} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	1.50054	1.49971	1.49945
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	1.49996	1.50017	1.50025
	<i>Exact</i>	1.49997	1.50017	1.50023
$\langle r_{12}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	2.99715	2.99502	2.99444
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	2.99955	3.00033	3.00072
	<i>Exact</i>	2.99987	3.00067	3.00009
$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	1.00026	0.99999	0.99989
	$\Psi_{C3.I.15.2.30}$	1.00003	0.99988	0.99982
	<i>Exact</i>	1.00002	0.99989	0.99985

Tabla 5.4: Los valores medios de la energía y otras cantidades radiales del estado fundamental de los sistemas  $e^- \mu^{-\infty} \text{He}^{+2}$ ,  $e^- \mu^{-4} \text{He}^{+2}$  y  $e^- \mu^{-3} \text{He}^{+2}$  obtenidos con las funciones  $\Psi_{C3.I.10.2.20}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.30}$ , son comparados con los valores “exactos” dados en el trabajo de Frolov (2000).

		$e^-e^-^\infty\text{Li}^{+3}$	$e^-e^-^7\text{Li}^{+3}$	$e^-e^-^6\text{Li}^{+3}$
$\langle -E \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$ <i>Exact</i>	7.27948 7.27991	7.27889 7.27989	7.27879 7.27989
$\langle r_{31} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$ <i>Exact</i>	0.57285 0.57277	0.57290 –	0.57291
$\langle r_{31}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$ <i>Exact</i>	0.44637 0.44628	0.44644 –	0.44645
$\left\langle \frac{1}{r_{31}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$ <i>Exact</i>	2.68651 2.68792	2.68629 –	2.68626
$\langle r_{12} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$ <i>Exact</i>	0.86224 0.86231	0.86230 –	0.86231
$\langle r_{12}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$ <i>Exact</i>	0.92709 0.92706	0.92721 –	0.92723
$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.14}$ <i>Exact</i>	1.56829 1.56772	1.56818 –	1.56816

Tabla 5.5: Los valores medios de la energía y otras cantidades radiales del estado fundamental de los sistemas  $e^-e^-^\infty\text{Li}^{+3}$ ,  $e^-e^-^7\text{Li}^{+3}$  y  $e^-e^-^6\text{Li}^{+3}$  obtenidos con la función  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$ , son comparados con los valores “exactos” dados en *Drake (2005)*.

### 5.1.4 Sistemas litioides

Consideramos los siguientes sistemas tipo iones de litio, cargados positivamente y con la carga nuclear  $Z = 3$ :  $e^-e^-^\infty\text{Li}^{+3}$ ,  $e^-e^-^7\text{Li}^{+3}$ ,  $e^-e^-^6\text{Li}^{+3}$ ,  $e^- \mu^-^\infty\text{Li}^{+3}$ ,  $e^- \mu^-^7\text{Li}^{+3}$  y  $e^- \mu^-^6\text{Li}^{+3}$ . Ambos núcleos,  $^7\text{Li}^{+3}$  y  $^6\text{Li}^{+3}$ , tienen 3 protones, y varía su número de neutrones, siendo éste 4 y 3 respectivamente.

Para los sistemas  $e^-e^-^\infty\text{Li}^{+3}$ ,  $e^-e^-^7\text{Li}^{+3}$  y  $e^-e^-^6\text{Li}^{+3}$  los resultados de las energías y otros valores medios obtenidos con las funciones  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$  y  $\Psi_{C3.I.15.2.18}$  son prácticamente iguales. Por esta razón, en la Tabla 5.5 sólo mostramos los valores medios obtenidos con la más sencilla de las dos funciones, la  $\Psi_{C3.I.10.2.14}$ . Cuando comparamos los resultados obtenidos con los valores de referencia “exactos” la energía media tiene, aproximadamente, una precisión relativa de  $5.9 \times 10^{-5}$ , para todos los sistemas.

Finalmente, para los sistemas de tres cuerpos no-simétricos:  $e^- \mu^-^\infty\text{Li}^{+3}$ ,  $e^- \mu^-^7\text{Li}^{+3}$  y  $e^- \mu^-^6\text{Li}^{+3}$  usamos la función  $\Psi_{C3.I.10.2.20}$ . Comparamos con los valores de referencia “exactos” y el valor de energía media obtenida tiene una precisión relativa de  $9.8 \times 10^{-8}$ . Lo mismo se observa con los otros sistemas de masa nuclear finita considerados. Cabe aclarar que para comparar nuestros resultados con los reportados por Frolov utilizando como valor de la masa del muón 206.7682838 u.a..

		$e^{-\mu^{-\infty}\text{Li}^+3}$	$e^{-\mu^{-7}\text{Li}^+3}$	$e^{-\mu^{-6}\text{Li}^+3}$
$\langle -E \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	932.45724	917.65013	915.23126
	<i>Exact</i>	–	917.65022	915.23135
$\langle r_{31} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	0.750004	0.750064	0.750074
	<i>Exact</i>	–	0.750041	0.750050
$\langle r_{31}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	0.749979	0.750098	0.750118
	<i>Exact</i>	–	0.750085	0.750104
$\left\langle \frac{1}{r_{31}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	2.00012	1.99996	1.99993
	<i>Exact</i>	–	1.99991	1.99989
$\langle r_{23} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	0.00241817	0.00245727	0.00246378
	<i>Exact</i>	–	0.00245727	0.00246377
$\langle r_{23}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	0.0000078	0.0000080	0.0000081
	<i>Exact</i>	–	0.0000080	0.0000081
$\left\langle \frac{1}{r_{23}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	620.305	610.434	608.821
	<i>Exact</i>	–	610.433	608.820
$\langle r_{12} \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	0.75001	0.75007	0.75008
	<i>Exact</i>	–	0.75005	0.75006
$\langle r_{12}^2 \rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	0.74999	0.75011	0.75012
	<i>Exact</i>	–	0.75009	0.75011
$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle$	$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	2.00006	1.99989	1.99987
	<i>Exact</i>	–	1.99986	1.99984

Tabla 5.6: Los valores medios de la energía y otras cantidades radiales del estado fundamental de los sistemas  $e^{-\mu^{-\infty}\text{Li}^+3}$ ,  $e^{-\mu^{-7}\text{Li}^+3}$  y  $e^{-\mu^{-6}\text{Li}^+3}$  obtenidos con la función  $\Psi_{C3.I.10.2.20}$ , son comparados con los valores “exactos” dados en *Frolov (2006)*.

## 5.2 Estado Fundamental y Estados Excitados S con

$$\Omega = 1.$$

En esta Sección obtenemos funciones de onda aproximadas para el estado fundamental y los primeros estados excitados S, para sistemas de masas generales. A diferencia de la Sección anterior, se fija el factor  $\Omega = 1$ . De esta manera toda la correlación angular se incluye a través del factor  $\chi_{C3}$  (ecuación (3.11)). Realizamos cálculos con  $n_1$  y  $n_2$  hasta 4, incluyendo las siguientes configuraciones:  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s) + (1s4s + 4s1s)$  y con  $n_{12}$  desde 1 hasta 5. Esto implica que para sistemas simétricos la función de onda aproximada resulta con 20 términos y para sistemas asimétricos con 35.

A los sistemas ya estudiados les sumamos sistemas donde las dos partículas cargadas negativamente son dos muones o un electrón y una antipartícula que se considera con la misma masa que la partícula, es decir:  $p^-$  ( $m_{p^-} = m_p$ ),  $d^-$  ( $m_{d^-} = m_d$ ) o  $t^-$  ( $m_{t^-} = m_t$ ).

En la tabla 5.7 reportamos los valores de energía media para el estado  $1^1S$  calculados con las funciones propuestas y los comparamos con los valores numéricamente “exactos” sacados de la literatura. Por ejemplo, la energía media del  $Mu^-$  tiene una precisión relativa de  $1.7 \times 10^{-3}$  y las energías del resto de los sistemas tipo hidrogenoides se obtienen con precisiones similares. También consideramos sistemas en los que los dos electrones son reemplazados por dos muones. Los resultados son comparados con los valores dados (en unidades muónicas) en el trabajo de *Frolov 1993*. Aclaremos que el sistema  $[e^- \mu^- \infty^+]$  no está incluido en la tabla porque no es estable (*Rodriguez et al. 2009*).

Para  $Z = 2$ , estudiamos una variedad de sistemas helioides. Cuando las dos partículas con carga negativa son electrones se obtiene la energía del estado fundamental del  ${}^\infty He$  con una precisión relativa de  $9 \times 10^{-4}$ , y se obtienen resultados similares cuando se consideran masas nucleares finitas.

Cuando se reemplaza un electrón por un muón en el He se tiene el sistema  $[e^- \mu^- He^{2+}]$  cuyo estado fundamental fue estudiado en detalle por *Frolov (2000)*. Los resultados obtenidos para el estado fundamental están en muy buen acuerdo con los valores de referencia, con precisiones relativas de  $3.7 \times 10^{-7}$ . Esto mismo se repite con los “cuasi átomos” en los que un electrón es reemplazado por un  $p^-$ , un  $d^-$  o un  $t^-$ .

En esta Sección también se estudian sistemas litioides ( $Z = 3$ ). En nuestros cálculos logramos

obtener la energía del ión  ${}^{\infty}Li^{3+}$  con una precisión relativa de  $4.6 \times 10^{-4}$ . Las energías de los dos isótopos  ${}^7Li^{3+}$  y  ${}^6Li^{3+}$  se obtienen con precisiones similares. El sistema que se obtiene al reemplazar en el  $Li^+$  un electrón por un muón [ $e^- \mu^- Li^{3+}$ ] ha sido estudiado por Frolov (2006). Nuestros resultados tienen una precisión relativa del orden de  $8.2 \times 10^{-7}$ .

Cuando resolvemos el problema de autovalores generalizado (ecuación (2.8)) con la base C3, una única diagonalización también provee de las energías y las funciones de onda para un número de estados excitados  $n^{1,3}S$ . Todas las funciones de onda construidas forman un conjunto ortogonal y su calidad depende de las configuraciones que se incluyan. En la tabla 5.8 mostramos los valores de energía obtenidos para los primeros estados excitados S de los mismos sistemas que los estudiados en la tabla 5.7, con  $Z = 2$  y  $Z = 3$ . Queremos destacar que en la literatura sólo hay disponibles resultados para unos pocos de los sistemas que hemos presentado. Para los sistemas de dos electrones, las precisiones relativas varían desde  $1.3 \times 10^{-4}$  ( $2^3S$ ) a  $3.4 \times 10^{-4}$  ( $4^1S$ ) y para los litioides dan un poco mejor. La energía del primer estado excitado del helio muónico ha sido estudiada con mucha precisión por Frolov (2002). Nuestros resultados tienen una precisión del orden de  $10^{-8}$  para masas nucleares finitas e infinitas. Para el resto de los sistemas no conocemos que existan resultados publicados con los cuales sea posible comparar.

$z_3 = 1$	$\langle -E \rangle$	$z_3 = 2$	$\langle -E \rangle$	$z_3 = 3$	$\langle -E \rangle$
${}^\infty\text{H}^- [e^-e^-{}^\infty^+]$	0.526860162 0.527751017 <sup>a</sup>	$[e^-e^-{}^\infty\text{He}^{2+}]$	2.90107544 2.90372438 <sup>c</sup>	$[e^-e^-{}^\infty\text{Li}^{3+}]$	7.27657671 7.27991341 <sup>c</sup>
${}^1\text{H}^- [e^-e^-p^+]$	0.526554804 0.527445881 <sup>a</sup>	$[e^-e^-{}^4\text{He}^{2+}]$	2.90065336 2.90330456 <sup>c</sup>	$[e^-e^-{}^7\text{Li}^{3+}]$	7.27603060 7.27932152 <sup>c</sup>
$\text{D}^- [e^-e^-d^+]$	0.526707359 0.527598325 <sup>a</sup>	$[e^-e^-{}^3\text{He}^{2+}]$	2.90051530 2.90316721 <sup>c</sup>	$[e^-e^-{}^6\text{Li}^{3+}]$	7.27588119 7.27922302 <sup>c</sup>
$\text{T}^- [e^-e^-t^+]$	0.526860161 0.527649048 <sup>a</sup>	$[e^-{}^\mu^-{}^\infty\text{He}^{2+}]$	414.036395 414.036537 <sup>d</sup>	$[e^-{}^\mu^-{}^\infty\text{Li}^{3+}]$	932.456800
$\text{Mu}^- [e^-e^-{}^\mu^+]$	0.524161999 0.525054806 <sup>a</sup>	$[e^-{}^\mu^-{}^4\text{He}^{2+}]$	402.637158 402.637263 <sup>d</sup>	$[e^-{}^\mu^-{}^7\text{Li}^{3+}]$	917.649469 917.650220 <sup>f</sup>
$[{}^\mu^-{}^\mu^-{}^\infty^+]$	108.937959	$[e^-{}^\mu^-{}^3\text{He}^{2+}]$	399.042262 399.042337 <sup>d</sup>	$[e^-{}^\mu^-{}^6\text{Li}^{3+}]$	915.230650 915.231355 <sup>f</sup>
$[{}^\mu^-{}^\mu^-p^+]$	97.3747607 97.5669834 <sup>b</sup>	$[{}^\mu^-{}^\mu^-{}^\infty\text{He}^{2+}]$	599.850338	$[{}^\mu^-{}^\mu^-{}^\infty\text{Li}^{3+}]$	1504.56570
$[{}^\mu^-{}^\mu^-d^+]$	102.803286 102.991911 <sup>b</sup>	$[{}^\mu^-{}^\mu^-{}^4\text{He}^{2+}]$	582.399626	$[{}^\mu^-{}^\mu^-{}^7\text{Li}^{3+}]$	1479.62095
$[{}^\mu^-{}^\mu^-t^+]$	104.756883 104.944115 <sup>b</sup>	$[{}^\mu^-{}^\mu^-{}^3\text{He}^{2+}]$	576.934471	$[{}^\mu^-{}^\mu^-{}^6\text{Li}^{3+}]$	1475.56380
		$[e^-p^-{}^\infty\text{He}^{2+}]$	3672.80537	$[e^-p^-{}^\infty\text{Li}^{3+}]$	8445.76213
		$[e^-p^-{}^4\text{He}^{2+}]$	2934.29713	$[e^-p^-{}^7\text{Li}^{3+}]$	7227.14146
			2934.29719 <sup>e</sup>		
		$[e^-p^-{}^3\text{He}^{2+}]$	2753.15461	$[e^-p^-{}^6\text{Li}^{3+}]$	7079.22839
			2753.15468 <sup>e</sup>		
		$[e^-d^-{}^\infty\text{He}^{2+}]$	7341.46599	$[e^-d^-{}^\infty\text{Li}^{3+}]$	16519.1735
		$[e^-d^-{}^4\text{He}^{2+}]$	4884.06275	$[e^-d^-{}^7\text{Li}^{3+}]$	12836.7229
			<b>4884.06285<sup>e</sup></b>		
		$[e^-d^-{}^3\text{He}^{2+}]$	4401.92755	$[e^-d^-{}^6\text{Li}^{3+}]$	12375.8962
		$[e^-t^-{}^\infty\text{He}^{2+}]$	11052.6571	$[e^-t^-{}^\infty\text{Li}^{3+}]$	24740.6194
		$[e^-t^-{}^4\text{He}^{2+}]$	6269.82985	$[e^-t^-{}^7\text{Li}^{3+}]$	17301.1660
			<b>6269.82989<sup>e</sup></b>		
		$[e^-t^-{}^3\text{He}^{2+}]$	5538.06345	$[e^-t^-{}^6\text{Li}^{3+}]$	16555.5250

Tabla 5.7: Valores de la energía del estado fundamental de diferentes sistemas con masas generales obtenidos con la función  $\Psi_{C3.VI.1.5.20}$  para los sistemas simétricos y con  $\Psi_{C3.VI.1.5.35}$  para los asimétricos.

	$\langle -E \rangle_{2^3S}$	$\langle -E \rangle_{2^1S}$	$\langle -E \rangle_{3^3S}$	$\langle -E \rangle_{3^1S}$	$\langle -E \rangle_{4^3S}$	$\langle -E \rangle_{4^1S}$
$e^-e^- \infty He^{2+}$	2.17493965	2.14541020	2.06858102	2.06107284	2.03193872	2.02660791
	2.17522938 <sup>a</sup>	2.14597405 <sup>a</sup>	2.06868907 <sup>a</sup>	2.06127199 <sup>a</sup>	2.03651208 <sup>a</sup>	2.03358672 <sup>a</sup>
$e^-e^- {}^4He^{2+}$	2.17464057	2.14511445	2.06829724	2.06078978	2.03165943	2.02633010
	2.17493019 <sup>a</sup>	2.14567859 <sup>a</sup>	2.06840524 <sup>a</sup>	2.06098908 <sup>a</sup>	2.03623283 <sup>a</sup>	2.03330782 <sup>a</sup>
$e^-e^- {}^3He^{2+}$	2.17454273	2.14501773	2.06820440	2.06069722	2.03156807	2.02623837
	2.17483231 <sup>a</sup>	2.14558192 <sup>a</sup>	2.06831238 <sup>a</sup>	2.06089652 <sup>a</sup>	2.03614146 <sup>a</sup>	2.03321657 <sup>a</sup>
$e^-\mu^- \infty He^{2+}$	413.661509	413.592074	413.567502	413.550045	413.519711	413.466971
	413.661526 <sup>b</sup>					
$e^-\mu^- {}^4He^{2+}$	402.262291	402.192862	402.168313	402.151997	402.124186	402.076234
	402.262302 <sup>b</sup>					
$e^-\mu^- {}^3He^{2+}$	398.667389	398.597957	398.573482	398.558098	398.531748	398.488673
	398.667391 <sup>b</sup>					
$\mu^-\mu^- \infty He^{2+}$	449.708491	443.602738	427.716903	426.164448	420.140441	419.038311
$\mu^-\mu^- {}^4He^{2+}$	437.282598	431.329114	415.923494	414.406552	408.536567	407.457197
$\mu^-\mu^- {}^3He^{2+}$	433.367758	427.467280	412.206764	410.702258	404.879938	403.808994
$e^-p^- \infty He^{2+}$	3672.43040	3672.36096	3672.33635	3672.31794	3672.28551	3672.22673
$e^-p^- {}^4He^{2+}$	2933.92222	2933.85279	2933.82845	2933.81429	2933.78990	2933.74337
$e^-p^- {}^3He^{2+}$	2752.77972	2752.71029	2752.68579	2752.66729	2752.63585	2752.58384
$e^-d^- \infty He^{2+}$	7341.09102	7341.02158	7340.99683	7340.97617	7340.93684	7340.86131
$e^-d^- {}^4He^{2+}$	4883.68787	4883.61844	4883.59504	4883.58792	4883.56467	4883.51851
$e^-d^- {}^3He^{2+}$	4401.55263	4401.48320	4401.45880	4401.44316	4401.41603	4401.36417
$e^-t^- \infty He^{2+}$	10994.3431	10993.9682	10993.8987	10993.8742	10993.8577	10993.8290
$e^-t^- {}^4He^{2+}$	6269.45491	6269.38548	6269.36106	6269.34497	6269.31719	6269.26585
$e^-t^- {}^3He^{2+}$	5496.90325	5496.52832	5496.45889	5496.43417	5496.41420	5496.37711
$e^-e^- \infty Li^{3+}$	5.11015939	5.03941025	4.75173831	4.73309441	4.63433035	4.62515508
	5.11072731 <sup>c</sup>	5.04087674 <sup>c</sup>	4.75207644 <sup>c</sup>	4.73375186 <sup>c</sup>	4.63713654 <sup>c</sup>	4.62977459 <sup>c</sup>
$e^-e^- {}^7Li^{3+}$	5.10975862	5.03913196	4.75136656	4.73315062	4.63396662	4.62641756
$e^-e^- {}^6Li^{3+}$	5.10969189	5.03894691	4.75130451	4.73266048	4.63390581	4.62472771
$e^-\mu^- \infty Li^{3+}$	930.957127	930.679386	930.582187	930.545785	930.512877	930.429896
$e^-\mu^- {}^7Li^{3+}$	916.150116	915.872416	915.775327	915.728570	915.693136	915.595106
$e^-\mu^- {}^6Li^{3+}$	913.731280	913.453578	913.356344	913.308876	913.256344	913.155126
$\mu^-\mu^- \infty Li^{3+}$	1056.61881	1041.99032	982.508707	978.653675	958.232493	956.335166
$\mu^-\mu^- {}^7Li^{3+}$	1039.75829	1025.32989	966.866304	963.060874	942.961199	941.079444
$\mu^-\mu^- {}^6Li^{3+}$	1037.00586	1022.61597	964.312364	960.519661	940.467046	938.591610
$e^-p^- \infty Li^{3+}$	8293.02191	8264.68708	8263.18714	8262.90937	8262.81215	8262.76518
$e^-p^- {}^7Li^{3+}$	7225.64170	7225.36393	7225.26669	7225.21819	7225.16651	7225.04622
$e^-p^- {}^6Li^{3+}$	7077.73086	7077.67822	7077.45109	7077.35367	7077.30009	7077.22961
$e^-d^- \infty Li^{3+}$	16517.6736	16517.3958	16517.2985	16517.2489	16517.1824	16517.0418
$e^-d^- {}^7Li^{3+}$	12835.2417	12833.7419	12833.4641	12833.3669	12833.3186	12833.2597
$e^-d^- {}^6Li^{3+}$	12374.3964	12374.1186	12374.0214	12373.9725	12373.9107	12373.7814
$e^-t^- \infty Li^{3+}$	24738.1471	24736.6471	24736.3693	24736.2721	24736.2242	24736.1721
$e^-t^- {}^7Li^{3+}$	17299.6661	17299.3883	17299.2911	17299.2440	17299.1817	17299.0050
$e^-t^- {}^6Li^{3+}$	16476.7604	16475.2605	16474.9828	16474.8855	16474.8387	16474.7871

Tabla 5.8: Valores de la energía los primeros estados excitados S de diferentes sistemas con masas generales obtenidos con la función  $\Psi_{C3.VI.1.5.20}$  para los sistemas simétricos y con  $\Psi_{C3.VI.1.5.35}$  para los asimétricos.

## 5.3 Conclusiones

*En este capítulo mostramos la eficiencia de nuestro método CICA en sistemas de tres cuerpos con masas generales. Consideramos el estado fundamental y los primeros estados excitados  $S$  de los sistemas tipo hidrogenoides, helioides y litioides, en los que la masa nuclear puede ser finita y las dos partículas livianas pueden ser iguales (dos electrones, dos muones) o diferentes (un electrón y un muón combinados con  $p^-$ ,  $d^-$  o  $t^-$ ). Calculamos la energía media y los valores medios de diferentes magnitudes físicas relevantes, comparamos con valores de referencia disponibles, observándose buena precisión relativa en todos los casos. Usamos funciones de onda que satisfacen las condiciones de cúspide de doble coalescencia y que tienen un número moderado de coeficientes lineales. Los valores de los coeficientes y la normalización de algunas de las funciones propuestas los damos en tablas en la Parte II de la Tesis. Las funciones de onda proporcionadas son lo suficientemente sencillas como para ser utilizadas en el cálculo de procesos físicos. Según nuestro conocimiento, en la literatura no se han dado explícitamente funciones de onda tan simples y precisas (como las que presentamos aquí), para todos los sistemas estudiados en este capítulo.*

*Es posible construir funciones de onda más precisas aumentando el número de términos en la serie  $\Omega_{n_1, n_2, n_{12}}^{(N_i, N_j, N_k)}(r_{13}, r_{23}, r_{12})$  y/o incluyendo otras configuraciones  $(n_1, n_2, n_3)$ . Sin embargo, como ya mencionamos, uno de nuestros objetivos es proveer funciones de onda con un número moderado de coeficientes y dar los valores de los mismos junto con las normalizaciones.*

*Por último, los cálculos se pueden extender a sistemas con carga nuclear mayor a 3. Si bien, no hemos realizado estos cálculos, sabemos que la correlación entre las dos partículas juega un rol menos importante al aumentar la carga, por lo que los valores de las energías van a tener mejor coincidencias con los valores “exactos”.*

# Capítulo 6

## Electrones de la capa K para átomos neutros

### Introducción

La realización de nuevos experimentos (ver *Bolognesi y colaboradores 2004 y 2005*) que involucran doble fotoionización de electrones de la capa K de átomos neutros plantea la necesidad de contar con funciones apropiadas que tengan en cuenta la correlación y también la influencia de los electrones pasivos. En este capítulo calculamos funciones de onda, simples y fuertemente correlacionadas para describir los electrones de esta capa para sistemas complejos.

### 6.1 Teoría

El potencial central  $V(r)$  para electrones en la capa K de átomos neutros puede ser escrito (*Mitnik y Miraglia 2005*),

$$V(r) = -\frac{2}{r} + \frac{Z_K(r)}{r} \rightarrow \begin{cases} -\frac{Z}{r} & \text{as } r \rightarrow 0, \\ -\frac{2}{r} & \text{as } r \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (6.1)$$

donde  $Z$  es la carga nuclear. En particular, para iones tipo helioides  $Z_K(r) = 2 - Z$ . Para átomos neutros,  $Z_K(r)/r$  representa el potencial estático creado por el resto de los electrones en las capas externas. Consideramos el potencial de Hartree local dado por

$$\frac{Z_K(r)}{r} = \frac{(2 - Z)}{r} + \sum_{nl \neq 1s^2} \int d\mathbf{x} \frac{|\zeta_{nl}(\mathbf{x})|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|}, \quad (6.2)$$

donde  $\zeta_{nl}$  representan las funciones de onda de las capas externas (los electrones de la capa K no se tienen en cuenta en la suma). Para el cálculo del potencial estático (Ec. (6.2)), se usan por ejemplo funciones de Roothaan-Hartree-Fock, tabuladas por Bunge (1993). Estas funciones satisfacen las condiciones de cúspide electrón-núcleo. El potencial que se introduce para tener en cuenta los electrones más externos, es local, y no incluye el intercambio con estos electrones. Esto se justifica ya que, el efecto del intercambio es despreciable porque la capa K está bien separada de las capas más externas, tanto en la energía como en las coordenadas espaciales.

En nuestros cálculos aproximamos  $Z_K(r)$  como una combinación de exponenciales

$$Z_K(r) \simeq - \sum_{j=1}^3 Z_j e^{-\mu_j r}. \quad (6.3)$$

La condición asintótica  $r \rightarrow 0$  (Eq. (6.1)) impone que

$$\sum_{j=1}^3 Z_j = Z - 2. \quad (6.4)$$

En la Tabla 1 del trabajo de *Mitnik y Miraglia (2005)* se listan los parámetros  $Z_j$  y  $\mu_j$  para átomos que van del Li al Xe.

## 6.2 Resultados

El objetivo de este capítulo es usar las funciones simples y precisas de ecuación (4.1), para estudiar sistemas complejos. Estas funciones tienen dos y tres parámetros variacionales y son comparadas con las propuestas por Mitnik y Miraglia 2005 que acá llamamos  $\Psi_{MM}$  y  $\Psi_I$ . La función  $\Psi_I$  tiene el mismo tipo de correlación angular que la de la función propuesta por Le Sech (1997) para los iones helioides. En la Tabla 6.1, presentamos los resultados obtenidos

	$Z$	$\beta$	$\alpha$	$c_{200}$	$c_{400}$	$-\langle E \rangle$
$\Psi_{GR.I.3.2}$	10	3.48199		0.75224		71.1955
$\Psi_{GR.I.5.3}$	10	3.38635		0.679698	0.429059	71.1959
$\Psi_{MM}$	10	3.38409	1.19155			71.1952
$\Psi_I$	10	1.52516	1.71493			71.1955
$\Psi_{GR.I.3.2}$	18	6.67782		1.69		246.564
$\Psi_{GR.I.5.3}$	18	6.39091		1.50418	3.55039	246.564
$\Psi_{MM}$	18	6.53434	1.8049			246.563
$\Psi_I$	18	2.89978	2.58327			246.564
$\Psi_{GR.I.3.2}$	36	13.5696		4.12732		1057.25
$\Psi_{GR.I.5.3}$	36	13.6759		3.90963	19.7189	1057.25
$\Psi_{MM}$	36	13.3912	2.84307			1057.25
$\Psi_I$	36	5.89382	4.04847			1057.25
$\Psi_{GR.I.3.2}$	54	19.1875		8.09173		2473.17
$\Psi_{GR.I.5.3}$	54	19.8356		8.32169	-33.8045	2473.17
$\Psi_{MM}$	54	18.8523	3.98216			2473.17
$\Psi_I$	54	8.45105	5.66696			2473.17

Tabla 6.1: Las energías medias para electrones en la capa K de átomos neutros con  $Z = 10, 18, 36$  y  $54$ , son comparadas con las obtenidas con las funciones  $\Psi_{MM}$  y  $\Psi_I$ .

minimizando la energía media de los electrones de la capa K, en el estado fundamental de átomos neutros (*Rodriguez et. al 2007*).

Se estudian cuatro átomos neutros con carga nuclear,  $Z$  igual a 10, 18, 36 y 54. Las funciones  $\Psi_{MM}$  y  $\Psi_I$  han sido recalculadas para obtener el mismo nivel de precisión que con las nuevas funciones propuestas, GR. El mejor valor de energía media de estado fundamental del átomo de Ne ( $Z = 10$ ) se obtiene con la función de onda GR3. Sin embargo, con la función similar  $\Psi_I$  se obtiene una energía comparable a la obtenida con la más simple de las funciones  $\Psi_{GR.I.3.2}$  (con sólo dos parámetros). Los valores de energía obtenidos con los tres tipos de funciones para los átomos de Ar, Kr y Xe son similares. Pero, es bien sabido que la energía media no es el único criterio para evaluar la calidad de una función de prueba. Por esto, en la Tabla 6.2, analizamos algunas propiedades locales, como valores medios de cantidades radiales. También analizamos otra propiedad global, como el virial, que en casi todos los casos se aparta del 2 (que es el valor exacto) recién en la cuarta cifra decimal.

	$Z$	$\langle r_{12} \rangle$	$\langle r_{12}^2 \rangle$	$\langle 1/r_{12} \rangle$	$\langle R \rangle$	$\langle \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 \rangle$	$virial$
$\Psi_{GR.I.3.2}$	10	0.23063	0.06666	5.91411	0.236797	-0.00037	-2.0027
$\Psi_{GR.I.5.3}$	10	0.23077	0.06681	5.91472	0.236904	-0.00038	-2.0017
$\Psi_{MM}$	10	0.2306		5.916			-2.0023
$\Psi_{GR.I.3.2}$	18	0.12568	0.01981	10.8713	0.129453	-0.00006	-2.0021
$\Psi_{GR.I.5.3}$	18	0.12573	0.01984	10.8726	0.12949	-0.00006	-2.0013
$\Psi_{MM}$	18	0.12566		10.872			-2.0019
$\Psi_{GR.I.3.2}$	36	0.06197	0.00482	22.0835	0.0639333	$-7.4918 \times 10^{-6}$	-2.001
$\Psi_{GR.I.5.3}$	36	0.06195	0.00482	22.0746	0.0639381	$-7.4342 \times 10^{-6}$	-2.0007
$\Psi_{MM}$	36	0.06194		22.0716			-2.0009
$\Psi_{GR.I.3.2}$	54	0.04115	0.00212	33.2352	0.0425003	$-2.3519 \times 10^{-6}$	-2.00004
$\Psi_{GR.I.5.3}$	54	0.04115	0.00212	33.2355	0.0424993	$-2.2817 \times 10^{-6}$	-2.0001
$\Psi_{MM}$	54	0.04115		33.237			-2.0000

Tabla 6.2: Valores medios de cantidades radiales para electrones en la capa K de átomos neutros con  $Z = 10, 18, 36$  y  $54$ , son comparadas con las obtenidas con las funciones  $\Psi_{MM}$  y  $\Psi_I$ .

---

## 6.3 Conclusiones

*Continuando con la línea de los capítulos 4 y 5, hemos aplicado nuestras propuestas de funciones de onda para describir electrones de la capa K de átomos neutros. Comprobamos que nuestra metodología también resulta exitosa para el tratamiento de estos sistemas. La forma simple de las funciones permiten que sean usadas para cálculos de procesos que involucran dos electrones activos.*

## Parte II

# Capítulo 7

## Funciones de onda para diversos sistemas.

### Introducción

Como ya mencionamos en la Introducción, la búsqueda de la solución al problema de tres partículas cargadas ha sido motivo de muchos trabajos de investigación que han dado origen a diversas propuestas de funciones de onda aproximadas. En la primera sección de este capítulo realizamos una recopilación de las funciones de la literatura mencionadas a lo largo de la Tesis con sus respectivas referencias. En la segunda sección presentamos tablas comparativas de resultados obtenidos con las funciones de onda construídas con nuestra metodología y con las de la literatura. En cada tabla consta la referencia a la ecuación con la que fue obtenido el resultado que se está mostrando, la referencia al trabajo donde fue publicado y en muchos casos se especifica la página donde se muestran los valores de la normalización y los coeficientes de la función para el estado fundamental de ese sistema en particular. Por la extensión de las tablas, no se incluyen estos últimos datos para las funciones de ondas de estados excitados. Sin embargo, toda esa información se encuentra disponible.

## 7.1 Definiciones de las funciones estudiadas.

### 7.1.1 Funciones Sofisticadas

Son funciones que se obtienen mediante cálculos altamente sofisticados debido a que requieren de cientos o miles de parámetros variacionales. Resultan ser altamente precisas en el cálculo del valor de la energía de los estados fundamental y excitados. Si bien verifican las condiciones de Kato numéricamente no cumplen con estas condiciones de manera formal.

Pekeris [1]

$$\Psi_{Pekeris} = e^{-\frac{1}{2}(u+v+w)} F(u + v + w) \quad (7.1)$$

con

$$F = \sum_{l,m,n=0}^{\infty} A(l, m, n) L_l(u) L_m(v) L_n(w), \quad (7.2)$$

donde  $u$ ,  $v$  y  $w$  son las coordenadas perimétricas definidas por:

$$u = \epsilon(r_2 + r_{12} - r_1), \quad (7.3)$$

$$v = \epsilon(r_1 + r_{12} - r_2),$$

$$w = 2\epsilon(r_2 + r_2 - r_{12}),$$

$\epsilon = \sqrt{-E}$ , con  $E$  la energía del sistema y  $L_n(w)$  denota el polinomio de Laguerre normalizado de orden  $n$  :

$$L_n(w) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \frac{(-w)^k}{k!}. \quad (7.4)$$

Thakkar A. J. y Koga T. [2]

$$\Psi_{TK} = e^{\xi s} \sum_{i=1}^I c_i s^{(l_i - n_i)/\lambda} t^{2m_i} u^{(n_i - 2m_i)/\nu}, \quad (7.5)$$

con  $u = r_{12}$ ,  $s = r_1 + r_2$  y  $t = r_1 - r_2$ .

Donde  $\lambda$  y  $\nu$  son parámetros positivos que no necesitan ser enteros.  $l_i$ ,  $m_i$ ,  $n_i$  son enteros no negativos sujetos a la inecuación  $0 \leq Ll_i + 2Mm_i + Nn_i \leq P$ , en la que L, M, N y P también son parámetros enteros positivos que permiten una optimización sistemática de los órdenes de los términos. Esto permite potencias de  $s$  y  $u$ , fraccionarias y negativas.

Drake G. W. [3]

$$\Psi_{Drake} = \sum_{l_1=0}^{[L/2]} \sum_p C_{p,l_1} \chi_p(\alpha, \beta) r_1^{l_1} r_2^{l_2} \sum_{m_1, m_2} Y_{l_1 m_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{l_2 m_2}(\hat{\mathbf{r}}_2) \times \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle, \quad (7.6)$$

con

$$\chi_p(\alpha, \beta) = r_1^i r_2^j r_{12}^k e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}, \quad (7.7)$$

donde  $p$  es un índice que representa la combinación de tres valores no negativos  $\{i, j, k\}$  para las potencias.

### 7.1.2 Funciones Intermedias

Son funciones que siguen siendo altamente correlacionadas y precisas pero con un número de parámetros menor (no más de 30 o 40). No tienen el comportamiento asintótico correcto y fallan en la descripción de propiedades locales, tales como las condiciones de cúspide en los puntos de doble coalescencia.

Hylleraas

$$\Psi_{Hyll} = \sum C_{l,m,n} e^{-ks/2} s^l u^m t^n \quad (7.8)$$

con  $s = r_1 + r_2$ ,  $t = r_1 - r_2$  y  $u = r_{12}$

Chandrasekhar S. y Herzberg G. [5]

$$\begin{aligned} \Psi_C = N e^{-\frac{1}{2}ks} & (1 + \chi_1 u + \chi_2 t^2 + \chi_3 s + \chi_4 s^2 + \chi_5 u^2 + \chi_6 su + \\ & \chi_7 t^2 u + \chi_8 u^3 + \chi_9 t^2 u^2 + \chi_{10} s t^2 + \chi_{11} s^3 + \chi_{12} t^2 u^4 + \\ & \chi_{13} u^4) \end{aligned} \quad (7.9)$$

Hart J. F. y Herzberg G. [6]

$$\begin{aligned} \Psi_{HH} = N e^{-\frac{1}{2}ks} & (1 + \chi_1 u + \chi_2 t^2 + \chi_3 s + \chi_4 s^2 + \chi_5 u^2 + \chi_6 su + \\ & \chi_7 t^2 u + \chi_8 u^3 + \chi_9 t^2 u^2 + \chi_{10} s t^2 + \chi_{11} s^3 + \chi_{12} t^2 u^4 + \\ & \chi_{13} u^4 + \chi_{14} u^5 + \chi_{15} t^2 u^3 + \chi_{16} s^2 t^2 + \chi_{17} s^4 + \chi_{18} s t^2 u + \\ & \chi_{19} t^4) \end{aligned} \quad (7.10)$$

Kinoshita T. [7]

$$\Psi_K = e^{-\frac{1}{2}s} \sum_{l,m,n}^{0,\infty} c_{l,m,n} s^l p^m q^n, \quad (7.11)$$

con  $s$ ,  $p = u/s$  y  $q = t/u$  cuyos dominios son  $(0, \infty)$ ,  $(0, 1)$  y  $(-1, 1)$  respectivamente.

### 7.1.3 Funciones Sencillas

Son funciones con dos o tres parámetros variacionales, obviamente no tan precisas como las sofisticadas e intermedias, pero que tienen una expresión analítica sencilla. Esto a su vez permite en general, obtener expresiones analíticas de valores medios de distintos operadores. En muchos casos estas funciones se construyen de manera tal que satisfagan algunas condiciones de la solución exacta.

Bonham y Kohl [8]

$$\Psi = \psi_{os}(Z_1, Z_2) [1 + b_1 r_{12}^{n_1} e^{-\alpha_1 r_{12} - \gamma/r_{12}}] + \psi_{os}(Z_3, Z_4) [c_2 + b_2 r_{12}^{n_2} e^{-\alpha_2 r_{12}}] +$$

$$b_3 \psi_{os} (Z_5, Z_6) e^{-\alpha_3 r_{12}} \quad (7.12)$$

$$\text{con } \Psi_{os} = e^{-Z_1 r_1 - Z_2 r_2} + e^{-Z_2 r_1 - Z_1 r_2}$$

Modelo de partícula independiente [9]

$$\Psi_{IPM} = e^{-Z_{ef} (r_{31} + r_{32})} \quad (7.13)$$

Myers C. R. et al. [11]

$$\Psi_{Myers} = e^{-Z (r_{31} + r_{32})} e^{r_{12}/2} \quad (7.14)$$

Kleinekathöfer U. Et al. [12]

$$\Psi_{PI} = N \left[ e^{-Z r_1} (1 + c r_2)^{(Z-1)/\beta-1} e^{-\beta r_2} + e^{-Z r_2} (1 + c r_1)^{(Z-1)/\beta-1} e^{-\beta r_1} \right] \times \left( 1 - \frac{1}{1 + 2\lambda} e^{-\lambda r_{12}} \right) \quad (7.15)$$

$$\text{con } \beta = \sqrt{-Z^2 - 2E}, \quad c = \frac{(\beta - Z)\beta}{Z - \beta - 1}$$

Le Sech C. [10, 13]

$$\Psi_{LS1990} = N \xi_{1s}(\mathbf{r}_1) \xi_{ns}(\mathbf{r}_2) \frac{\text{senh}(\lambda r_2)}{\lambda r_2} u_k^{qe}(r_{12}), \quad (7.16)$$

donde las  $\xi_{ns}(\mathbf{r})$  son funciones hidrogenoides y  $u_k^{qe}(r_{12})$  es una función Coulombiana regular.

$$\Psi_{LS1997} = N e^{-Z r_1} e^{-Z r_2} [\cosh(\lambda r_1) + \cosh(\lambda r_2)] \left[ 1 + \frac{1}{2} r_{12} e^{-a r_{12}} \right] \quad (7.17)$$

Flores Rivero y Rivas-Silva [14]

$$\Psi_{FRRS} = e^{-\eta s} (1 + c_1 u + c_2 t^2 + c_3 s + c_4 s^2 + c_5 u^2 + c_6 s u + c_7 s t^2 + c_8 t^2 u + c_9 u^3) \quad (7.18)$$

Patil S. H. [15]

Para estados  $(1s)(ns)$ , Patil propone la función

$$\Psi_{PII} = A [\phi(r_1) e^{-Z r_2} \pm e^{-Z r_1} \phi(r_2)] f_{\pm}(r_{12}) \quad (7.19)$$

con  $\phi(r) = (r + c_0)^{u_1+1-n} F(1 - n, 2, 2a_1(r + c_0)) e^{-a r_1} g_0(r)$ , donde  $A$  es la normalización, los signos  $+$  y  $-$  son para los estados singlete y triplete respectivamente, y  $f_+ = 1 - [e^{-\lambda_+ r_{12}} / (1 + 2\lambda_+)]$  y  $f_- = 1 - [e^{-\lambda_- r_{12}} / (1 + 4\lambda_-)]$  son sus funciones de correlación correspondientes.

Patil S. H. [16]

$$\Psi_{PIII} = e^{-Z(r_{31}+r_{32})} (1 + \frac{r_{12}}{2}) \quad (7.20)$$

#### 7.1.4 Funciones propuestas.

Funciones GR y C3 [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23]

$$\Psi_{GR\_ca\_cc\_N} = \sum_{n_1, n_2} \varphi(n_1, \mu_{31}, r_{31}) \varphi(n_2, \mu_{32}, r_{23}) \frac{2\beta_{n_1, n_2} + 1 - e^{-\beta_{n_1, n_2} \mu_{12} r_{12}}}{2\beta_{n_1, n_2}} \Omega_{n_1, n_2, \beta_{n_1, n_2}}^{cc}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) \quad (7.21)$$

$$\Psi_{C3\_ca\_cc\_n_{12}\_N} = \sum_{n_1, n_2, n_{12}} \varphi(n_1, \mu_{31}, r_{31}) \varphi(n_2, \mu_{32}, r_{23}) {}_1F_1 \left[ -n_{12}, 2, -2 \frac{Z \mu_{12} r_{12}}{n_{12}} \right] \Omega_{n_1, n_2, n_{12}}^{cc}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) \quad (7.22)$$

donde denominamos

$$\Omega_{n_1, n_2, t}^{cc}(r_{31}, r_{32}, r_{12}) = \sum_{i, j, k \neq 1} c_{i, j, k}^{(n_1, n_2, t)} r_{31}^i r_{32}^j r_{12}^k \quad (7.23)$$

$$t = \begin{cases} \beta_{n_1, n_2} & \text{si es la base GR.} \\ n_{12} & \text{si es la base C3.} \end{cases}$$

*ca*: indica las distintas configuraciones atómicas que la función de onda tiene en cuenta, y se considerará la siguiente notación,

*I* :  $1s1s$  (estado fundamental).

*II* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s)$

*III* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + 2s2s$

*IV* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s)$

*V* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s) + 2s2s$

*VI* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s) + (1s4s + 4s1s)$

*VII* :  $1s1s + (1s2s + 2s1s) + (1s3s + 3s1s) + (1s4s + 4s1s) + 2s2s$

*cc* : indica las configuraciones correlacionadas, es decir cuál de las funciones  $\Omega$  ha sido utilizada.

*N*: es el número total de coeficientes de la función, incluyendo los lineales y los no-lineales.

## 7.2 Resultados

NP= número de parámetros en las funciones de prueba.

### 7.2.1 Sistemas en la aproximación de masa nuclear infinita

Ión  $H^-$

<i>Función</i>	$^1S$							
	<i>Ec.</i>	$\langle -E \rangle$	$\langle r_1 \rangle$	$\langle r_1^2 \rangle$	$\langle r_{12} \rangle$	<i>NP</i>	<i>Ref.</i>	<i>Coef.yN, Pág.</i>
$\Psi_{Myers}$	7.14	0.4674	—	—	—	0	[11]	44
$\Psi_{IPM}$	7.13	0.47266	—	—	—	1	[9]	43
$\Psi_{PIII}$	7.20	0.4833	—	—	—	0	[16]	44
$\Psi_{ARG}$	4.18	0.5198	2.31896	7.3499	3.70934	1	[19]	45
$\Psi_{GR2}$	7.21	0.5199	—	—	—	2	[18]	52
$\Psi_{LS1997}$	7.17	0.5252	—	—	—	2	[13]	106
$\Psi_{GR.I.7.5}$	7.21	0.52532	2.48061	8.94859	3.98482	5	[18]	107
$\Psi_{GR.I.5.3}$	7.21	0.52576	2.54844	9.56148	4.09253	3	[18]	107
$\Psi_{BK}$	7.12	0.52592	—	—	—	4	[8]	106
$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	7.22	0.52597	2.53055	9.49529	4.31346	10	—	108
$\Psi_{BK}$	7.12	0.52600	—	—	—	4	[8]	106
$\Psi_{C3.I.5.2.6}$	7.22	0.52623	2.58835	10.0858	4.16804	6	—	
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22	0.52644	2.55362	9.77238	4.11824	14	[22]	
$\Psi_{PI}$	7.16	0.5265	—	—	—	1	[12]	106
$\Psi_{GR.I.15.9}$	7.21	0.52653	2.59291	10.3122	4.20121	9	[18]	107
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	0.52686	—	—	—	20	[23]	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22	0.52734	2.65744	11.0617	4.31346	18	[22]	108
$\Psi_{GR.I.21.14}$	7.21	0.52743	2.63703	10.7723	4.27402	14	[18]	107
$\Psi_{C3.I.21.2.28}$	7.22	0.5275	2.6667	11.1969	4.32982	28		108
$\Psi_{HH}$	7.11	0.52764	—	—	—	20	[6]	106
$\Psi_{GR.I.47.27}$	7.21	0.52767	2.68987	11.54060	4.37397	27	[18]	107
<i>Exacto<sup>a</sup></i>		0.52775	2.71018	11.9137	4.41269		[24, 26]	

Tabla 7.1: tabla comparativa para el ión  $H^-$ .

Átomo de  $He$ 

<i>Función</i>	$^1S$						<i>Ref</i>	<i>Coef.yN, Pág.</i>
	<i>Ec.</i>	$\langle -E \rangle$	$\langle r_1 \rangle$	$\langle r_1^2 \rangle$	$\langle r_{12} \rangle$	<i>NP</i>		
$\Psi_{IPM}$	7.13	2.8477	0.888889	1.0535	1.2963	1	[9]	43
$\Psi_{Myers}$	7.14	2.8555	0.93769	1.19667	1.50153	0	[11]	44
$\Psi_{PIII}$	7.20	2.8766	0.84335	0.951741	1.29984	0	[16]	44
$\Psi_{ARG}$	4.18	2.8954	0.92667	1.17104	1.43755	1	[19]	45
$\Psi_P$	7.16	2.9000	—	2.329	—	1	[12]	109
$\Psi_{GR2}$	7.21	2.9013	—	—	—	2	[18]	52
$\Psi_{C3.I.3.2.6}$	7.22	2.9019	0.93178	1.19878	1.42076	6	—	111
$\Psi_{BK}$	7.12	2.90142	—	—	—	4	[8]	109
$\Psi_{BK}$	7.12	2.90192	—	—	—	4	[8]	109
$\Psi_{GR.I.5.3}$	7.21	2.90196	0.93214	1.19928	1.42146	3	[18]	
$\Psi_{LS}$	7.17	2.9020	—	—	—	2	[13]	109
$\Psi_{GR.II.3.5}$	7.21	2.90230	—	—	—	5	—	
$\Psi_{GR.I.7.5}$	7.21	2.90286	0.92893	1.18977	1.41951	5	[18]	110
$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	7.22	2.90307	0.92941	1.19191	1.42116	10	—	
$\Psi_{GR.II.7.12}$	7.21	2.90310	—	—	—	12	—	
$\Psi_{C3.II.3.4.20}$	7.22	2.90320	—	—	—	20	—	
$\Psi_{GR.VII.7.31}$	7.21	2.90321	—	—	—	31	—	
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22	2.90337	0.92947	1.19281	1.42163	14	[20]	111
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22	2.90339	0.92954	1.19353	1.42188	18	—	111
$\Psi_{C3.I.21.2.28}$	7.22	2.90356	0.92959	1.19382	1.42211	28	—	111
$\Psi_C$	7.10	2.90360	—	—	—	6	[5]	
$\Psi_{GR.I.15.9}$	7.21	2.90653	0.92927	1.19245	1.42121	9	[18]	110
$\Psi_{GR.I.21.14}$	7.21	2.90342	0.92970	1.19443	1.42222	14	[18]	110
$\Psi_{GR.I.45.27}$	7.21	2.90359	0.92959	1.19348	1.42207	27	[18]	110
$\Psi_C$	7.10	2.90370	—	—	—	14	[5]	
$\Psi_{HH}$	7.11	2.90372	—	—	—	20	[6]	109
<i>Exacto</i>		2.90372	0.929472	1.19348	1.42207		[3]	

Tabla 7.2: Tabla comparativa para el estado fundamental del átomo de  $He$ .

<i>Función</i>	<i>Ec.</i>	$\langle -E \rangle$	$\langle r_1 \rangle$	$\langle r_1^2 \rangle$	$\langle r_{12} \rangle$	<i>NP</i>	<i>Ref</i>
$(1s)(2s)^3S$							
$\Psi_{LS1990}$	7.16	2.17482	2.5583	11.5561	4.4653	3	[10]
$\Psi_{GR.VI.3.11}$	7.21	2.17487	2.55427	11.5018	4.45945	11	—
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	2.17494	—	—	—	20	[23]
$\Psi_{C3.II.3.2.10}$	7.22	2.17502	—	—	—	10	—
$\Psi_{GR.VII.3.31}$	7.21	2.17513	—	—	—	31	—
$\Psi_{PII}$	7.19	2.1751	2.552	—	4.443	1	[15]
$\Psi_{C3.II.3.4.20}$	7.22	2.17521	—	—	—	20	—
<i>Exacto</i>		2.17523					[3]
$(1s)(2s)^1S$							
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	2.14541	—	—	—	20	[23]
$\Psi_{PII}$	7.19	2.1455	3.025	—	5.373	1	[15]
$\Psi_{C3.II.3.2.10}$	7.22	2.14566	—	—	—	10	—
$\Psi_{GR.VI.3.11}$	7.21	2.14575	2.9768	16.1321	5.27827	11	—
$\Psi_{GR.VII.7.31}$	7.21	2.14591	—	—	—	31	—
$\Psi_{C3.IV.3.3.24}$	7.22	2.14591	—	—	—	24	—
<i>Exacto</i>		2.14597	—	—	—		[3]
$(1s)(3s)^3S$							
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	2.06858	—	—	—	20	[23]
$\Psi_{PII}$	7.19	2.0686	5.865	—	11.01	1	[15]
$\Psi_{GR.VI.3.11}$	7.21	2.06861	5.85811	68.7172	11.0027	11	—
$\Psi_{GR.VII.7.31}$	7.21	2.06867	—	—	—	31	—
$\Psi_{C3.IV.3.3.24}$	7.22	2.06868	—	—	—	24	—
<i>Exacto</i>		2.06869					[3]
$(1s)(3s)^1S$							
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	2.06107	—	—	—	20	[23]
$\Psi_{PII}$	7.19	2.0613	6.482	—	12.24	1	[15]
$\Psi_{GR.VI.3.11}$	7.21	2.06120	6.49757	85.3021	12.2754	11	—
$\Psi_{GR.VII.7.31}$	7.21	2.06125	—	—	—	31	—
$\Psi_{C3.IV.3.3.24}$	7.22	2.06124	—	—	—	24	—
<i>Exacto</i>		2.06127					[3]
$(1s)(4s)^3S$							
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	2.03194	—	—	—	20	[23]
$\Psi_{GR.VI.3.11}$	7.21	2.03373	8.86247	162.88	16.9989	11	—
$\Psi_{C3.IV.3.3.24}$	7.22	2.03453	—	—	—	24	—
$\Psi_{C3.VII.3.2.26}$	7.22	2.03575	—	—	—	26	—
$\Psi_{GR.VII.7.31}$	7.21	2.03637	—	—	—	31	—
<i>Exacto</i>		2.03651					[3]
$(1s)(4s)^1S$							
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	2.02661	—	—	—	20	[23]
$\Psi_{GR.VI.3.11}$	7.21	2.02878	8.38887	164.287	16.9508	11	—
$\Psi_{C3.IV.3.3.24}$	7.22	2.03021	—	—	—	24	—
$\Psi_{C3.VII.3.2.26}$	7.22	2.03207	—	—	—	26	—
$\Psi_{GR.VII.7.31}$	7.21	2.03325	—	—	—	31	—
<i>Exacto</i>		2.03359					[3]

Tabla 7.3: Tabla comparativa para los primeros estados excitados S del átomo de *He*.

## Serie isoelectrónica del átomo de He.

$^1S$						
Función	Ec.	ión	$\langle -E \rangle$	NP	Ref.	Cof.yN, Pág.
$\Psi_{IPM}$	7.13	$Li^+$	7.2227	1	[9]	43
$\Psi_{Myers}$	7.14		7.2346	0	[11]	44
$\Psi_{PIII}$	7.20		7.2555	0	[16]	44
$\Psi_{ARG}$	4.18		7.26670	1	[19]	45
$\Psi_P$	7.16		7.2749	1	[12]	
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22		7.27658	20	[23]	
$\Psi_{GR2}$	7.21		7.27776	2	[18]	52
$\Psi_{BK}$	7.12		7.27806	4	[8]	112
$\Psi_{LS1997}$	7.17		7.2781	2	[13]	112
$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	7.22		7.27916	10	-	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		7.2797	18	-	114
$\Psi_{HH}$	7.11		7.27990	20	[6]	113
	<i>Exacta</i>		7.27991		[3]	
$\Psi_{IPM}$	7.13	$Be^{2+}$	13.5977	1	[9]	43
$\Psi_{Myers}$	7.14		13.6115	0	[11]	44
$\Psi_{PIII}$	7.20		13.631	0	[16]	44
$\Psi_{ARG}$	4.18		13.6384	1	[19]	45
$\Psi_P$	7.16		13.6499	1	[12]	
$\Psi_{GR2}$	7.21		13.6535	2	[18]	52
$\Psi_{LS1997}$	7.17		13.6535	2	[13]	112
$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	7.22		13.6547	10	-	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		13.6551	18	-	
	<i>Exacta</i>		13.6556		[3]	
$\Psi_{IPM}$	7.13	$B^{3+}$	21.9727	1	[9]	43
$\Psi_{Myers}$	7.14		21.9877	0	[11]	44
$\Psi_{PIII}$	7.20		22.0054	0	[16]	
$\Psi_{ARG}$	4.18		22.0108	1	[19]	
$\Psi_{PI}$	7.16		22.0249	1	[12]	
$\Psi_{LS1997}$	7.17		22.0286	2	[13]	112
$\Psi_{GR2}$	7.21		22.0289	2	[18]	
$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	7.22		22.0301	10	-	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		22.0305	18	-	114
$\Psi_{HH}$	7.11		22.0309	20	[6]	
	<i>Exacta</i>		22.0310	113	[3]	

Tabla 7.4: Tabla comparativa para la serie isoelectrónica del átomo de He.

$1S$						
<i>Función</i>	<i>Ec.</i>	<i>ión</i>	$\langle -E \rangle$	<i>NP</i>	<i>Ref.</i>	<i>Coef.yN, Pág.</i>
$\Psi_{IPM}$	7.13	$C^{4+}$	32.3477	1	[9]	43
$\Psi_{Myers}$	7.14		32.3634	0	[11]	44
$\Psi_{PIII}$	7.20		32.3796	0	[16]	
$\Psi_{ARG}$	4.18		32.3837	1	[19]	
$\Psi_P$	7.16		32.4000	1	[12]	
$\Psi_{GR2}$	7.21		32.4043	2	[18]	52
$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	7.22		32.4054	10	—	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		32.4058	18	—	114
	<i>Exacta</i>		32.4062		[3]	
$\Psi_{IPM}$	7.13	$N^{+5}$	44.7227	1	[9]	43
$\Psi_{Myers}$	7.14		44.739	0	[11]	44
$\Psi_{PIII}$	7.20		44.7538	0	[16]	
$\Psi_{ARG}$	4.18		44.7571	1	[19]	45
$\Psi_P$	7.16		44.7750	1	[12]	
$\Psi_{GR2}$	7.21		44.7794	2	[18]	52
$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	7.22		44.7805	10	—	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		44.7810	18	—	114
	<i>Exacta</i>		44.7814		[3]	
$\Psi_{IPM}$	7.13	$O^{6+}$	59.0977	1	[9]	43
$\Psi_{Myers}$	7.14		59.1144	0	[11]	44
$\Psi_{PIII}$	7.20		59.128	0	[16]	
$\Psi_{ARG}$	4.18		59.1307	1	[19]	45
$\Psi_P$	7.16		59.1500	1	[12]	
$\Psi_{GR2}$	7.21		59.1545	2	[18]	52
$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	7.22		59.1557	10	—	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		59.1561	18	—	114
$\Psi_{HH}$	7.11		59.1566	20	[6]	113
	<i>Exacta</i>		59.1566		[3]	
$\Psi_{IPM}$	7.13	$F^{7+}$	75.4727	1	[9]	43
$\Psi_{Myers}$	7.14		75.4897	0	[11]	44
$\Psi_{PIII}$	7.20		75.5023	0	[16]	
$\Psi_{ARG}$	4.18		75.5045	1	[19]	45
$\Psi_P$	7.16		75.5250	1	[12]	
$\Psi_{GR2}$	7.21		75.5295	2	[18]	52
$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	7.22		75.5308	10	—	
	<i>Exacta</i>		75.5317		[3]	
$\Psi_{IPM}$	7.13	$Ne^{8+}$	93.8477	1	[9]	
$\Psi_{Myers}$	7.14		93.865	0	[11]	
$\Psi_{PIII}$	7.20		93.8766	0	[16]	
$\Psi_{ARG}$	4.18		93.8786	1	[19]	
$\Psi_P$	7.16		93.9000	1	[12]	
$\Psi_{GR2}$	7.21		93.9044	2	[18]	
$\Psi_{HH}$	7.11		93.9068		[6]	
	<i>Exacta</i>		93.9068		[3]	

Tabla 7.5: Tabla comparativa para la serie isoelectrónica del átomo de He.

### 7.2.2 Sistemas con masa nuclear finita

$^1S$						
<i>Función</i>	<i>Ec.</i>		$\langle -E \rangle$	<i>NP</i>	<i>Ref.</i>	<i>Cof.yN, Pág.</i>
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22	$^1H^-$	0.52613	14	[20]	115
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22		0.52655	20	[23]	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		0.52703	18	[20]	
<i>Exacta</i>			0.52744		[24, 26]	
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22	$Mu^-$	0.52373	14	[20]	115
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22		0.52416	20	[23]	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		0.52464	18	[20]	
<i>Exacta</i>			0.52505		[24, 26]	
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22	$D^-$	0.52628		[20]	115
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22		0.52670		[23]	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		0.52719		[20]	
<i>Exacta</i>			0.52760		[24, 26]	
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22	$T^-$	0.52633	14	[20]	115
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22		0.52686	20	[23]	
$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	7.22		0.52724	18	[20]	
<i>Exacta</i>			0.52765		[24, 26]	

Tabla 7.6: Tabla comparativa para sistemas hidrogenoides.

$^1S$						
<i>Función</i>	<i>Ec.</i>		$\langle -E \rangle$	<i>NP</i>	<i>Ref.</i>	<i>Coef.yN, Pág.</i>
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22	$[e^-e^-^4He^{+2}]$	2.90065	14	[20]	116
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22		2.90295	20	[23]	
<i>Exacta</i>			2.90330		[24, 26]	
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22	$[e^-e^-^3He^{+2}]$	2.90051	14	[20]	116
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22		2.90282	20	[23]	
<i>Exacta</i>			2.90317		[25]	
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	$[e^-\mu^-^\infty He^{+2}]$	414.036395	20	[23]	116
$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	7.22		414.036519	20	[20]	
$\Psi_{C3.I.10.2.30}$	7.22		414.036522	30	[20]	
<i>Exacta</i>			414.036537		[3]	
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	$[e^-\mu^-^4 He^{+2}]$	402.637158	20	[23]	116
$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	7.22		402.637242	20	[20]	
$\Psi_{C3.I.10.2.30}$	7.22		402.637248	30	[20]	
<i>Exacta</i>			402.637263		[25]	
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	$[e^-\mu^-^3 He^{+2}]$	399.042262	14	[23]	116
$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	7.22		399.042314	20	[20]	
$\Psi_{C3.I.10.2.30}$	7.22		399.042319	30	[20]	
<i>Exacta</i>			399.042337		[25]	

Tabla 7.7: Tabla comparativa para sistemas helioides.

$^1S$						
<i>Función</i>	<i>Ec.</i>		$\langle -E \rangle$	<i>NP</i>	<i>Ref.</i>	<i>Coef.yN, Pág.</i>
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	$[e^-e^-^7Li^{+3}]$	7.27603	20	[20]	117
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22		7.27889	14	[23]	
<i>Exacta</i>			7.27991		[3]	
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	$[e^-e^-^6Li^{+3}]$	7.27588	14	[20]	117
$\Psi_{C3.I.10.2.14}$	7.22		7.27879	20	[23]	
<i>Exacta</i>			7.27922		[3]	
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	$[e^-\mu^-^\infty Li^{+3}]$	935.4568	20	[23]	117
$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	7.22		932.4572	20	[20]	
<i>Exacta</i>			—		—	
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	$[e^-\mu^-^7 Li^{+3}]$	917.6495	20	[23]	117
$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	7.22		917.6501	20	[20]	
<i>Exacta</i>			917.6502		[27]	
$\Psi_{C3.VI.1.5.20}$	7.22	$[e^-\mu^-^6 Li^{+3}]$	915.23065	20	[23]	117
$\Psi_{C3.I.10.2.20}$	7.22		915.23126	20	[20]	
<i>Exacta</i>			915.23135		[27]	

Tabla 7.8: Tabla comparativa para sistemas litioides.

# Referencias

- [1] Pekeris C. L. Phys. Rev. **112**, 1649.(1958).
- [2] Thakkar A. J. y Koga T. Phys. Rev. A **50**, 854 (1994).
- [3] Drake G. W. F. Springer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics (Berlin: Springer) (2005)
- [4] E. A. y Undheim B. Z. Phys. **65** 759 (1930).
- [5] Chandrasekhar S. y Herzberg G., Phys. Rev. **98**, 1050 (1955).
- [6] Hart J. F. y Herzberg G. Phys. Rev. **106**, 79 (1957).
- [7] Kinoshita T. Phys. Rev. **105**, 1490 (1957)
- [8] Bonham R. A. y Kohl D. A. J. Chem. Phys. **45**, 2471 (1966).
- [9] Bransden B. H. y Joachain C. J. *Physics and Molecules* 2nd edn. (Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall) (2003).
- [10] Le Sech C. J. Phys. B **23**, L739-L745 (1990)
- [11] Myers C. R., Umrigar C. J., Sethna J. P. y Morgan J. D. III, Phys. Rev. A **44**, 5537 (1991).
- [12] Kleinekathöfer U, Patil S. H., Tang K. T. y Toennies J. P. Phys. Rev. A **54**, 2840 (1996).
- [13] Le Sech C. J. Phys. B **30**, L47-L50 (1997).
- [14] Flores A. y Rivas-Silva J. F. Brazilian Journal of Phys. **29** 3, 529 (1999).

- 
- [15] Patil S. H, Phys. Rev. A **68**, 044501 (2003).
- [16] Patil S. H., Eur. J. Phys. 25, **91** (2004).
- [17] Rodriguez K. V., Gasaneo G., J. Phys. B **38**, L259-L267 (2005).
- [18] Rodriguez K. V., Gasaneo G. y Mitnik D. M., J. Phys. B **40**, 3923 (2007).
- [19] Ancarani L.U., Rodriguez K. V. y Gasaneo G., J. Phys. B **40**, 2695-2702 (2007).
- [20] Rodriguez K. V., Ancarani L. U., Gasaneo G. y Mitnik D. M., Int. Jour. Q. Chem. **110**, 1820-1832 (2010).
- [21] Ancarani L. U., Rodriguez K. V. y Gasaneo G., Proceedings de la 19<sup>th</sup> International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics (2009).
- [22] Rodriguez K. V., Gonzalez Y. V., Gasaneo G., Ancarani L. U. y Mitnik D. M., Hyperfine Interact. **193**, 147 (2010).
- [23] Ancarani L.U., Rodriguez K. V. y Gasaneo G., J. Phys. B (enviado)
- [24] Frolov A. M. , Phys. Rev. A **58**, 4479 (1998).
- [25] Frolov A. M. , Phys. Rev. A **61**, 022509 (2000).
- [26] Frolov A. M. , Phys. Lett. A **345**, 173 (2005).
- [27] Frolov A. M. , Phys. Lett. A **353**, 60 (2006).

# Capítulo 8

Tablas con normalizaciones y coeficientes de las diferentes funciones presentadas.

## Introducción

En este capítulo mostramos tablas con las normalizaciones y los coeficientes de gran parte de las funciones detalladas en el capítulo anterior. El propósito de esta parte de la Tesis es facilitar el uso de estas funciones a quienes las necesiten para el cálculo de otros procesos físicos.

### 8.1 Sistemas con masa nuclear infinita

#### 8.1.1 $H^-$

Función	Ecuación	$\lambda$	$a$	$Z_1$	$Z_2$	$b_1$	$n_1$	$-E$
$\Psi_{BK}$	7.12	—	—	0.4771	1.0748	0.3120	1	0.525919
$\Psi_{LS1997}$	7.17	0.52	0.00	—	—	—	—	0.5252
$\Psi_{PI}$	7.16	0.155	—	—	—	—	—	0.5265

Tabla 8.1: Valores para las funciones  $\Psi_{BK}$ ,  $\Psi_{LS1997}$  y  $\Psi_{Patil}$  con ecuaciones (7.12), (7.17) y (7.16), respectivamente.

	$\Psi_{HH}$
$k$	1.35
$N$	0.0716409212
$\chi_1$	0.337294236
$\chi_2$	0.0808833954
$\chi_3$	-0.213129754
$\chi_4$	0.0200385445
$\chi_5$	-0.0287160073
$\chi_6$	-0.0154381194
$\chi_7$	-9.2189669510 <sup>-3</sup>
$\chi_8$	4.3290467010 <sup>-3</sup>
$\chi_9$	7.8697645110 <sup>-4</sup>
$\chi_{10}$	-1.7755867810 <sup>-3</sup>
$\chi_{11}$	-7.4084122310 <sup>-4</sup>
$\chi_{12}$	1.6305836810 <sup>-6</sup>
$\chi_{13}$	-2.7310617610 <sup>-4</sup>
$\chi_{14}$	6.2740944010 <sup>-6</sup>
$\chi_{15}$	-6.3829314510 <sup>-5</sup>
$\chi_{16}$	-1.8442313310 <sup>-4</sup>
$\chi_{17}$	1.5585701310 <sup>-5</sup>
$\chi_{18}$	6.4835063210 <sup>-4</sup>
$\chi_{19}$	6.8860244010 <sup>-4</sup>
$-E$	0.5276446692

Tabla 8.2: Valores para las funciones  $\Psi_{HH}$  (ecuación (7.11)).

	$\Psi_{GR.I.5.3}$	$\Psi_{GR.I.7.5}$	$\Psi_{GR.I.15.9}$	$\Psi_{GR.I.21.14}$	$\Psi_{GR.I.47.27}$
$N$	0.080561421	0.082041879	0.080421275	0.073386239	0.073293631
$\beta$	0.106543447	0.000001	0.22	0.15	0.82
$c_{200}$	0.060752816	0.036210621	0.037488340	0.116972024	0.106045350
$c_{220}$		-0.002191811	-0.009751581	-0.017928453	-0.043414801
$c_{300}$		0.018783022	0.025484359	-0.017928453	0.000963730
$c_{320}$			0.000754602	0.000694004	0.006839546
$c_{400}$	0.003416998			0.006978128	0.005774476
$c_{420}$					-0.000845991
$c_{430}$					0.000025452
$c_{002}$		-0.012462337	0.000085421	0.001100876	0.107959091
$c_{202}$			0.003960009	0.006191243	0.024586696
$c_{222}$				0.000253537	0.001827515
$c_{302}$			-0.001564564	-0.002251535	-0.012163022
$c_{322}$					-0.000305902
$c_{402}$			0.000173017	0.000183044	0.001710909
$c_{422}$					0.000032183
$c_{003}$				-0.006861951	-0.044690827
$c_{203}$					-0.001939658
$c_{223}$				-0.000018989	0.000027058
$c_{303}$					0.002211197
$c_{403}$					-0.000498590
$c_{423}$					-0.000001354
$c_{503}$					0.000018019
$c_{004}$				0.000795513	0.006765652
$c_{204}$					-0.000723228
$c_{304}$					0.000148783
$c_{324}$					0.000000395
$c_{405}$					-0.000000225
$\langle -E \rangle$	0.525758	0.525322	0.526529	0.527432	0.527673

Tabla 8.3: Valores para las funciones GR para el ión Hidrógeno. (7.21).

	$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	$\Psi_{C3.I.21.2.28}$
$N$	0.0694573	0.0274226	26.4951
$C_{200}^{111}$	0.098759704	0.262828331	-0.000212881
$C_{220}^{111}$	-0.003276259	-0.020963888	0.000151267
$C_{300}^{111}$	-0.006402371	-0.096941874	0.000207822
$C_{320}^{111}$		0.000860154	$-1.254501687 \times 10^{-7}$
$C_{400}^{111}$			$7.309252784 \times 10^{-6}$
$C_{002}^{111}$	0.029868338	-0.001118081	-0.262958032
$C_{202}^{111}$		-0.004688316	-0.000021479
$C_{222}^{111}$			-0.000064785
$C_{302}^{111}$		-0.001791672	$6.659933823 \times 10^{-6}$
$C_{402}^{111}$		0.000217052	$-6.755005362 \times 10^{-8}$
$C_{003}^{111}$			-0.047849361
$C_{223}^{111}$			$-6.114749535 \times 10^{-6}$
$C_{004}^{111}$			-0.002259906
$C_{000}^{112}$	-0.721137442	-0.327797533	-0.999308800
$C_{200}^{112}$	-0.079540334	-0.208282954	0.000276830
$C_{220}^{112}$	0.002280846	0.014642301	-0.000165146
$C_{300}^{112}$	0.010830413	0.105104322	-0.000206486
$C_{320}^{112}$		-0.000614998	$5.110473937 \times 10^{-7}$
$C_{400}^{112}$			$-3.091162648 \times 10^{-6}$
$C_{002}^{112}$	-0.015490609	0.000610102	0.304587050
$C_{202}^{112}$		0.006396808	0.000017442
$C_{222}^{112}$			0.000075410
$C_{302}^{112}$		-0.000451007	$-4.681190256 \times 10^{-6}$
$C_{402}^{112}$		-0.000034289	$1.492184806 \times 10^{-7}$
$C_{003}^{112}$			0.027007422
$C_{223}^{112}$			$-3.954404388 \times 10^{-8}$
$C_{004}^{112}$			$3.519277103 \times 10^{-6}$
$\langle -E \rangle$	0.525971	0.527341	0.527544

Tabla 8.4: Valores para las funciones C3 (ecuación (7.22)) para el ión Hidrógeno.

8.1.2 *He*

Ec.	Ecuación	$\lambda$	$a$	$Z_1$	$Z_2$	$b_1$	$\alpha_1$	$n_1$	$-E$
$\Psi_{BK_9}$	7.12	—	—	1.4368	2.2077	0.2934	—	1	2.901419
$\Psi_{BK_{10}}$	7.12	—	—	1.4096	2.2058	-0.6054	0.2420	—	2.901923
$\Psi_{LS1997}$	7.17	0.7	0.17	—	—	—	—	—	2.9020
$\Psi_{PatilI}$	7.16	0.48	—	—	—	—	—	—	2.9000

Tabla 8.5: Valores para las funciones  $\Psi_{BK}$ ,  $\Psi_{LS1997}$  y  $\Psi_{PatilI}$  con ecuaciones (7.12), (7.17) y (7.16), respectivamente.

	$\Psi_{HH}$
$k$	3.87
$N$	1.366869460
$\chi_1$	0.417070598
$\chi_2$	0.208366354
$\chi_3$	$-5.2348239810^{-3}$
$\chi_4$	0.0490900245
$\chi_5$	$-0.157224213$
$\chi_6$	0.0823275059
$\chi_7$	$-0.125878664$
$\chi_8$	0.0476774784
$\chi_9$	0.0407069233
$\chi_{10}$	0.0319089519
$\chi_{11}$	$-9.4974488410^{-3}$
$\chi_{12}$	$5.1230115710^{-4}$
$\chi_{13}$	$-9.2296470410^{-3}$
$\chi_{14}$	$7.0657206510^{-4}$
$\chi_{15}$	$-7.2513784810^{-3}$
$\chi_{16}$	$2.3034232810^{-3}$
$\chi_{17}$	$1.3664536510^{-3}$
$\chi_{18}$	$1.6054890310^{-3}$
$\chi_{19}$	$7.5873682510^{-4}$
$-E$	2.9037179

Tabla 8.6: Valores para las funciones de Hylleraas (ecuación (7.11)) con 20 términos.

	$\Psi_{GR.I.5.3}$	$\Psi_{GR.I.7.5}$	$\Psi_{GR.I.15.9}$	$\Psi_{GR.I.21.14}$	$\Psi_{GR.I.47.27}$
$N$	1.4053907	1.4039859	1.3909157	1.3858475	0.0431987
$\beta$	0.451	0.70	0.56	1.43	1.80
$c_{200}$	0.1346177	0.1327041	0.1666377	0.1941680	0.2143641
$c_{220}$		-0.0249529	-0.0902841	-0.1147580	-0.2528071
$c_{300}$		0.0263593	0.0114176	-0.0113241	-0.0231063
$c_{320}$			0.0143997	0.0159012	0.0764847
$c_{400}$	0.0056930			0.0109928	0.0209065
$c_{420}$					-0.0150969
$c_{430}$					0.0003649
$c_{002}$		0.0220519	-0.0100572	0.1408332	0.2086128
$c_{202}$			0.0170400	0.0319705	0.0920521
$c_{222}$				0.0040334	0.0290051
$c_{302}$			-0.0087965	-0.0150901	-0.0733667
$c_{322}$					-0.0102870
$c_{402}$			0.0012633	0.0018194	0.0118903
$c_{422}$					0.0022894
$c_{003}$				-0.0705304	-0.1516545
$c_{203}$					-0.0166827
$c_{223}$				-0.0008484	0.0015570
$c_{303}$					0.0289457
$c_{403}$					-0.0076285
$c_{423}$					-0.0002574
$c_{503}$					0.0003827
$c_{004}$				0.0091852	0.0402955
$c_{204}$					-0.0101407
$c_{304}$					0.0024008
$c_{324}$					0.0000799
$c_{405}$					$-6.4281227 \times 10^{-6}$
$\langle -E \rangle$	2.90196	2.90286	2.90327	2.90342	2.90359

Tabla 8.7: Valores para las funciones GR (ecuación (7.21)) para el átomo de He.

	$\Psi_{C3.I.5.2.6}$	$\Psi_{C3.I.7.2.10}$	$\Psi_{C3.I.15.2.18}$	$\Psi_{C3.I.21.2.28}$
$N$	0.160585	0.256694	0.185438	1.97729
$c_{000}^{111}$	-0.8213211	1	1	0.6671201
$c_{200}^{111}$	-0.0922038	0.098246448	0.302786074	-0.0136032
$c_{220}^{111}$		-0.03124686	-0.162590086	0.1408061
$c_{300}^{111}$		0.001184603	-0.057956599	-0.0738775
$c_{320}^{111}$			0.022220269	-0.0035816
$c_{400}^{111}$	-0.0025777			0.0066670
$c_{002}^{111}$		0.017733126	-0.051390076	-0.0539685
$c_{202}^{111}$			0.030774458	-0.0065624
$c_{222}^{111}$				-0.0095059
$c_{302}^{111}$			-0.013593354	-0.0016215
$c_{402}^{111}$			0.001411805	0.0002780
$c_{003}^{111}$				0.0542986
$c_{223}^{111}$				-0.0015126
$c_{004}^{111}$				0.0059484
$c_{000}^{112}$	0.5495211	-0.830314903	-0.767027142	-0.6890086
$c_{200}^{112}$	0.0567421	-0.072807266	-0.261902947	0.0096991
$c_{220}^{112}$		0.025155796	0.139602499	-0.1373939
$c_{300}^{112}$		0.001601034	0.060570017	0.0735285
$c_{320}^{112}$			-0.019175064	0.0031320
$c_{400}^{112}$	0.0011150			-0.0069018
$c_{002}^{112}$		-0.007167501	0.052630078	0.0865791
$c_{202}^{112}$			-0.025150013	0.0058084
$c_{222}^{112}$				0.013396
$c_{302}^{112}$			0.010745608	0.0003624
$c_{402}^{112}$			-0.001129002	-0.0001281
$c_{003}^{112}$				-0.0719330
$c_{223}^{112}$				0.0001597
$c_{004}^{112}$				-0.0002004
$\langle -E \rangle_{exacta}$	2.9019	2.90307	2.90339	2.90356

Tabla 8.8: Valores para las funciones C3 (ecuación (7.22)) para el átomo de He.

### 8.1.3 Serie isoelectrónica

$\Psi_{BK}$							
ión	$\lambda$	$a$	$Z_1$	$Z_2$	$b_1$	$\alpha_1$	$-E$
$Li^+$			2.3338	3.3008	-0.4717	0.4063	7.2749

Tabla 8.9: Valores para la función (ecuación (7.12)).

$\Psi_{PI}$		
ión	$\lambda$	$-E$
$Li^+$	0.86	7.2749
$Be^{2+}$	1.24	13.6499
$B^{3+}$	1.63	22.0249
$C^{4+}$	2.02	32.4000
$N^{5+}$	2.41	44.7750
$O^{6+}$	2.80	59.1566
$F^{7+}$	3.19	75.5250
$Ne^{8+}$	3.61	93.9000

Tabla 8.10: Valores para la función  $\Psi_{PI}$  (ecuación (7.16)).

$\Psi_{LS1997}$			
ión	$\lambda$	$a$	$-E$
$Li^+$	0.84	0.36	7.2781
$Be^{2+}$	0.9	0.45	13.6535
$B^{3+}$	1.1	0.65	22.0286

Tabla 8.11: Valores para la función  $\Psi_{LS1997}$  (ecuación (7.17)).

<i>Ec.</i>	$Li^+$		$B^{3+}$	$O^{6+}$	
	<i>Hyll</i> 10	<i>Hyll</i> 20	<i>Hyll</i> 20	<i>Hyll</i> 10	<i>Hyll</i> 20
$k$	5.600055	6.20	10.40	16.400023	17.60
$N$	5.750594	5.77057414	31.5411342	141.2470	141.298776
$\chi_1$	0.3598049	0.427894286	0.434777444	0.3771723	0.440607752
$\chi_2$	0.2385639	0.320937389	0.518229132	0.6751016	0.868595114
$\chi_3$	-0.08864538	0.153723864	0.253041238	0.2922311	0.846501253
$\chi_4$	0.01678235	0.102493831	0.194770903	0.1349207	0.663489753
$\chi_5$	-0.1303588	-0.291352815	-0.507177819	-0.5061933	-0.948511149
$\chi_6$	0.05504580	0.178913186	0.240745183	0.3317571	0.601062578
$\chi_7$	-0.09060980	-0.338922840	-0.987602064	-0.7846255	-2.85014508
$\chi_8$	0.01606871	0.132405535	0.398635198	0.1682221	1.17774341
$\chi_9$	0.01968222	0.192820330	0.969215519	0.4678856	4.99873341
$\chi_{10}$		0.0934891553	0.252556490		0.807402893
$\chi_{11}$		-0.0220645541	-0.0699871341		-0.0818249736
$\chi_{12}$		$5.2202022810^{-3}$	0.0665530976		0.923021496
$\chi_{13}$		-0.0417113554	-0.214618312		-1.07667975
$\chi_{14}$		$5.2364574310^{-3}$	0.0444107350		0.386667222
$\chi_{15}$		-0.0484975747	-0.388582259		-3.16354776
$\chi_{16}$		0.0184000974	0.0352818232		0.553211466
$\chi_{17}$		$6.9551617710^{-3}$	0.0270144827		0.227659768
$\chi_{18}$		-0.0267015277	-0.147231569		-1.36483720
$\chi_{19}$		$-3.8604250010^{-3}$	-0.0289713347		-0.185285535
$-E$	7.2797624	7.279905382	22.03095928		59.156581537

Tabla 8.12: Valores para las funciones de Hylleraas (Ec.(7.11)) con 20 términos .

	$Li^{3+}$	$B^{3+}$	$C^{4+}$	$N^{5+}$	$O^{6+}$
$N$	0.821902	4.25714	9.30127	19.3635	37.9445
$c_{000}^{111}$	0.6351557	-0.3751203	0.2503146	0.1646111	0.1100068
$c_{200}^{111}$	0.1966878	-0.1490565	0.1126404	0.0833056	0.0621849
$c_{220}^{111}$	-0.2375904	0.4776556	-0.5074559	-0.4985656	-0.4742714
$c_{300}^{111}$	-0.0448697	0.0674516	-0.0697434	-0.0681727	-0.0651757
$c_{002}^{111}$	-0.0091590	-0.0175312	0.0192991	0.0177382	0.0152582
$c_{320}^{111}$	0.0527453	-0.1898103	0.2470790	0.2878116	0.3169736
$c_{202}^{111}$	0.0433798	-0.0787824	0.0800838	0.0756611	0.0695158
$c_{302}^{111}$	-0.0275620	0.0909699	-0.1160203	-0.1331138	-0.1448641
$c_{402}^{111}$	0.0042181	-0.0239504	0.0371709	0.0503349	0.0632081
$c_{000}^{112}$	-0.5696486	0.3602313	-0.2432271	-0.1611110	-0.1081835
$c_{200}^{112}$	-0.1790489	0.1422544	-0.1087377	-0.0810501	-0.0608389
$c_{220}^{112}$	0.2148880	-0.4527512	0.4867073	0.4821335	0.4613935
$c_{300}^{112}$	0.0448286	-0.0666671	0.0690856	0.0676747	0.0648091
$c_{002}^{112}$	0.01637548	0.0097876	-0.0134543	-0.0135533	-0.0122807
$c_{320}^{112}$	-0.04773968	0.1799754	-0.2370768	-0.2784575	-0.3085196
$c_{202}^{112}$	-0.03817668	0.0731215	-0.0753302	-0.0718567	-0.0664987
$c_{302}^{112}$	0.02429618	-0.0849093	0.1096722	0.1269538	0.1390749
$c_{402}^{112}$	-0.0037538	0.0225517	-0.0354470	-0.0484276	-0.0612104
$-E$	7.2797	22.0305	32.4058	44.7810	59.1561

Tabla 8.13: Valores para las funciones C3 (ecuación (7.22)) de la serie isoelectrónica del átomo de He.

## 8.2 Sistemas reales

	$Mu^-$	${}^1H^-$	$D^-$	$T^-$	${}^\infty H^-$
$N$	0.0320917	0.0321394	0.0321421	0.0321429	0.0321448
$c_{000}^{111}$	0.8547058	-0.8532817	0.8531894	0.8531581	0.8530970
$c_{200}^{111}$	0.2217853	-0.2239379	0.2240780	0.2241255	0.2242180
$c_{220}^{111}$	-0.0174139	0.0178301	-0.0178571	-0.0178661	-0.0178842
$c_{300}^{111}$	-0.0818877	0.0826078	-0.0826544	-0.0826700	-0.0827008
$c_{320}^{111}$	0.0007082	-0.0007308	0.0007323	0.0007328	0.0007338
$c_{002}^{111}$	-0.0009480	0.0009515	-0.0009527	-0.0009531	-0.0009538
$c_{202}^{111}$	-0.0039553	0.0039946	-0.0039971	-0.0039979	-0.0039996
$c_{302}^{111}$	-0.0015092	0.0015263	-0.0015274	-0.0015277	-0.0015285
$c_{402}^{111}$	0.0001816	-0.0001847	0.0001849	0.0001850	0.0001852
$c_{000}^{112}$	-0.2826039	0.2799913	-0.2798171	-0.2797582	-0.2796431
$c_{200}^{112}$	-0.1754047	0.1774231	-0.1775543	-0.1775988	-0.1776856
$c_{220}^{112}$	0.0121321	-0.0124499	0.0124706	0.0124775	0.0124913
$c_{300}^{112}$	0.0887226	-0.0895564	0.0896104	0.0896285	0.0896642
$c_{320}^{112}$	-0.0005037	0.0005222	-0.0005234	-0.0005238	-0.0005246
$c_{002}^{112}$	0.0003381	-0.0004983	0.0005094	0.0005131	0.0005205
$c_{202}^{112}$	0.0053839	-0.0054488	0.0054529	0.0054543	0.0054571
$c_{302}^{112}$	-0.0003756	0.0003837	-0.0003842	-0.0003844	-0.0003847
$c_{402}^{112}$	-0.0000288	0.0000292	-0.0000292	-0.0000292	-0.0000292

Tabla 8.14: Valores para la función  $\Psi_{C_{3,I,15,2,18}}$  (Ec.(7.22)) para sistemas hidrogenoides.

	$e^-e^{-\infty}He^{+2}$	$e^-e^{-4}He^{+2}$	$e^-e^{-3}He^{+2}$
$N$	0.448367	0.448354	0.448349
$c_{000}^{111}$	0.7019935	0.7020639	-0.7020870
$c_{200}^{111}$	0.1521548	0.1520548	-0.1520221
$c_{220}^{111}$	-0.1718711	-0.1717718	0.1717393
$c_{300}^{111}$	0.0017437	0.0017295	-0.0017249
$c_{002}^{111}$	0.0203784	0.0203525	-0.0203440
$c_{202}^{111}$	0.0006772	0.0006741	-0.0006731
$c_{222}^{111}$	-0.0043226	-0.0043191	0.0043179
$c_{000}^{112}$	-0.6054576	-0.6055292	0.6055526
$c_{200}^{112}$	-0.1361976	-0.1360928	0.1360585
$c_{220}^{112}$	0.1647337	0.1646368	-0.1646051
$c_{300}^{112}$	0.0007997	0.0008118	-0.0008157
$c_{002}^{112}$	-0.0100536	-0.0100339	0.0100275
$c_{202}^{112}$	0.0002263	0.0002271	-0.0002274
$c_{222}^{112}$	0.0020219	0.0020201	-0.0020195

Tabla 8.15: Valores para la función  $\Psi_{C_{3,I_{10,2,14}}}$  (ecuación (7.22)) para sistemas helioides.

	$e^- \mu^{-\infty} He^{+2}$	$e^- \mu^{-4} He^{+2}$	$e^- \mu^{-3} He^{+2}$
$N$	0.684302	0.60359	0.560566
$c_{000}^{111}$	-0.2856291	0.2873294	-0.2842373
$c_{200}^{111}$	0.5880162	-0.5890340	0.5906894
$c_{020}^{111}$	-0.0049916	0.0032295	-0.0047919
$c_{220}^{111}$	-0.0064209	0.0039822	-0.0037438
$c_{300}^{111}$	0.10544208	-0.1255693	0.1371306
$c_{030}^{111}$	-0.0000493	0.0000381	-0.0000868
$c_{002}^{111}$	-0.1740855	0.1422221	-0.1226149
$c_{202}^{111}$	0.0117025	-0.0152402	0.0174262
$c_{022}^{111}$	-0.0048893	0.0101970	-0.0056564
$c_{222}^{111}$	0.0025263	-0.0044554	0.0040943
$c_{000}^{112}$	0.2445510	-0.2407512	0.2340879
$c_{200}^{112}$	-0.6602520	0.6692177	-0.6754980
$c_{020}^{112}$	-0.0032731	0.0048711	-0.0049847
$c_{220}^{112}$	-0.0031702	0.0014265	-0.0037292
$c_{300}^{112}$	-0.0428220	0.0611165	-0.0716672
$c_{030}^{112}$	-0.0000397	0.0000337	-0.0000927
$c_{002}^{112}$	0.1827232	-0.1565263	0.1405741
$c_{202}^{112}$	-0.0026106	0.0029171	-0.0031578
$c_{022}^{112}$	-0.0027534	0.0038721	-0.0046499
$c_{222}^{112}$	-0.0010845	0.0022691	-0.0020406

Tabla 8.16: Valores para la función  $\Psi_{C_{3,I_{10,2,20}}}$  (ecuación (7.22)) para sistemas helioides.

	$e^{-e^{-\infty}Li^{+3}}$	$e^{-e^{-7}Li^{+3}}$	$e^{-e^{-6}Li^{+3}}$
$N$	1.4842	1.48403	1.48400
$c_{000}^{111}$	0.5226780	-0.5228122	-0.5228345
$c_{200}^{111}$	0.1780267	-0.1779453	-0.1779318
$c_{220}^{111}$	-0.4327624	0.4326755	0.4326611
$c_{300}^{111}$	0.0079818	-0.0079668	-0.0079643
$c_{002}^{111}$	0.0344479	-0.0344364	-0.0344345
$c_{202}^{111}$	0.0023769	-0.0023721	-0.0023714
$c_{222}^{111}$	-0.0182345	0.0182282	0.0182272
$c_{000}^{112}$	-0.4863479	0.4864784	0.4865001
$c_{200}^{112}$	-0.1690866	0.1690009	0.1689867
$c_{220}^{112}$	0.4242703	-0.4241833	-0.4241689
$c_{300}^{112}$	-0.0065276	0.0065139	0.0065117
$c_{002}^{112}$	-0.0240043	0.0239935	0.0239917
$c_{202}^{112}$	-0.0000742	0.0000719	0.0000715
$c_{222}^{112}$	0.0104493	-0.0104453	-0.0104446

Tabla 8.17: Valores para la función  $\Psi_{C_{3,I,10,2,14}}$  (ecuación (7.22)) para sistemas litioides.

	$e^{-\mu^{-\infty}Li^{+3}}$	$e^{-\mu^{-7}Li^{+3}}$	$e^{-\mu^{-6}Li^{+3}}$
$N$	0.61255	0.637727	0.641883
$c_{000}^{111}$	0.3180814	0.3219735	0.3225994
$c_{200}^{111}$	-0.3445659	-0.3480885	-0.3486838
$c_{020}^{111}$	0.0003802	0.0006452	0.0006874
$c_{220}^{111}$	0.0006659	0.0006931	0.0006972
$c_{300}^{111}$	-0.4256829	-0.4235959	-0.4232422
$c_{030}^{111}$	0.0000025	0.0000041	0.0000044
$c_{002}^{111}$	-0.3263497	-0.3199306	-0.3188607
$c_{202}^{111}$	-0.0602641	-0.0598046	-0.0597278
$c_{022}^{111}$	0.0023915	0.0024939	0.0025094
$c_{222}^{111}$	-0.0006798	-0.0007175	-0.0007234
$c_{000}^{112}$	-0.2473109	-0.2539969	-0.2550630
$c_{200}^{112}$	0.4651296	0.4678794	0.4683486
$c_{020}^{112}$	0.0021780	0.0035065	0.0037179
$c_{220}^{112}$	0.0020573	0.0008832	0.0021482
$c_{300}^{112}$	0.3629819	0.3608580	0.3604966
$c_{030}^{112}$	0.0000063	0.0000101	0.0000107
$c_{002}^{112}$	0.2819142	0.2759202	0.2749235
$c_{202}^{112}$	0.0009703	0.0008832	0.0008695
$c_{022}^{112}$	0.0005285	0.0005499	0.0005531
$c_{222}^{112}$	-0.0003238	-0.0003343	-0.0003358

Tabla 8.18: Valores para la función  $\Psi_{C_{3,I,10,2,20}}$  (ecuación (7.22)) para sistemas litioides.

# Conclusiones Generales

En esta Tesis estudiamos el problema de tres partículas cargadas con masas generales. Propusimos una metodología para hallar estados ligados y construimos funciones de onda aproximadas para una amplia variedad de sistemas.

En el primer capítulo discutimos la imposibilidad de resolver exactamente la ecuación de Schrödinger que describe este problema. La inclusión de las interacciones atractivas y repulsivas tiene como resultado una ecuación diferencial no-separable. Esto ha motivado la búsqueda de métodos de resolución para la obtención de soluciones aproximadas. Para esto hemos destacado que toda solución del problema debe ser una función suave y regular para todos los puntos del espacio de coordenadas, incluidos aquellos puntos en los cuales los potenciales Coulombianos divergen.

A partir del segundo capítulo desarrollamos nuestra propuesta de solución del problema que constituye una extensión del método de semiseparabilidad de Pluvinage. A diferencia de éste, nuestra metodología también resuelve la interacción repulsiva. Escribimos las soluciones aproximadas como una combinación lineal de configuraciones con funciones de onda con correlación angular que a su vez son el producto de dos factores  $\phi_\nu$  y  $\Omega_\nu$ . El primero de ellos,  $\phi_\nu$ , diagonaliza los términos diagonales de la energía cinética y los potenciales de interacción. Este factor está dado básicamente por el producto de tres soluciones de dos cuerpos; dos de estas son soluciones de los potenciales atractivos y la tercera solución resuelve la interacción repulsiva. El segundo factor,  $\Omega_\nu$ , es usado para resolver los términos no diagonales de la energía cinética junto con  $\phi_\nu$ . Este factor permite acelerar la convergencia de la función de onda a partir de la inclusión de mayor correlación radial y angular en la propuesta. A esta propuesta de solución la llamamos Configuración Interacción con Correlación Angular (CICA).

En los dos capítulos siguientes mostramos explícitamente las funciones propuestas junto

con las estrategias analíticas y numéricas desarrolladas y utilizadas para realizar los cálculos para los distintos sistemas estudiados.

Para la resolución de la ecuación de Schrödinger desarrollamos dos tipos de bases de funciones que dan lugar a las configuraciones y que son las soluciones de los tres problemas de dos cuerpos antes mencionados. Dichas funciones incluyen correlación angular en su definición. Las mismas difieren en el tipo de función a utilizar para el tratamiento de las interacciones repulsivas. Una de las propuestas propone el uso de funciones que incluyen el apantallamiento inter-electrónico producido por el núcleo sobre los electrones (Rodríguez et al. 2005). En la otra propuesta utilizamos una función obtenida por continuación analítica de la función C3 usada para el tratamiento del continuo de tres cuerpos (Ancarani et al. 2007). La primera no diagonaliza completamente los potenciales Coulombianos pero tiene la ventaja de adaptarse muy bien a los distintos sistemas tratados. Sin embargo, y en lo que respecta al cálculo, depende de diferentes parámetros no lineales que hacen necesaria la utilización de métodos de optimización. La segunda propuesta tiene la ventaja que diagonaliza completamente las interacciones Coulombianas. Ambas opciones satisfacen las condiciones de cúspide debidas a las divergencias de los potenciales.

Para la definición de  $\Omega_\nu$ , utilizamos series de potencias en las distancias relativas entre las partículas. Ambas propuestas, la obtenida a partir de la C3 y la que llamamos GR, permiten obtener expresiones analíticas para todos los elementos de matriz ya sean del Hamiltoniano como de los solapamientos. Las bases utilizadas nos permiten transformar la ecuación de Schrödinger en un conjunto de ecuaciones algebraicas para los coeficientes de la expansión. Sin embargo, el sistema de ecuaciones que resulta de la base GR debe ser resuelto un gran número de veces hasta optimizar los parámetros no lineales que ésta incluye.

En los capítulos 4, 5 y 6 aplicamos exitosamente el método CICA para desarrollar funciones de onda de prueba para el estado fundamental y los primeros estados excitados S del átomo del Helio y su serie isoelectrónica, y para sistemas con masa nuclear finita de dos electrones, electrón-muón, ión positronio y sistemas exóticos. En el capítulo 4 mostramos primero los resultados del cálculo de la energía y los valores medios de otras cantidades físicas radiales del estado fundamental del Helio y su serie isoelectrónica en la aproximación de masa infinita, calculados con las dos bases, GR y C3. Con ambas bases propusimos funciones de onda simples y con precisiones muy aceptables. Por ejemplo propusimos una función con la

base C3 que denominamos ARG que sólo tiene un parámetro lineal a determinar. Por su forma sencilla es posible encontrar la dependencia analítica de la energía, la constante de normalización y el coeficiente lineal, con la carga nuclear. Los valores de energía obtenidos con esta función tiene mayor precisión que los calculados con las funciones del modelo de partícula independiente, las funciones propuestas por Myers et al. 1991 y las de Patil 2004. Es más, sólo nuestra propuesta de solución predice un estado ligado al ión  $H^-$ . Con la base GR también construimos una función aproximada sencilla con la que a través de un fiteo obtuvimos una expresión analítica de la energía media y los dos coeficientes (el lineal y el no lineal) como función de  $Z$ . Con esta función, que llamamos GR2, obtuvimos valores de energía con una precisión que de  $1.4 \times 10^{-2}$  para  $Z=1$  a  $2.5 \times 10^{-5}$  para  $Z=10$ .

Luego, realizamos cálculos con funciones altamente correlacionadas obtenidas mediante la inclusión de más términos en la serie de potencias que definen al factor  $\Omega$ . Esto hace que aumente el número de coeficientes y sea imposible encontrar expresiones analíticas para los coeficientes de las funciones de onda. Para el átomo de Helio las energías obtenidas son similares a las reportadas con las funciones 9 y 10 del trabajo de Bonham y Kohl (1966), y son más precisas que las presentadas por Moumeni et al. (1990), Siebbeles et al. (1993) y Le Sech (1997). La función más precisa de las presentadas ( $\Psi_{GR-I-47-27}$ ) alcanza energías con precisiones de  $4.3 \times 10^{-5}$ . Realizamos el mismo tipo de estudio con la base C3. Con estas funciones también se puede aumentar la correlación aumentando el parámetro  $n_{12}$  que para este análisis toma un valor hasta 2. Observando las tablas de resultados podemos concluir que las funciones C3 tienen una mejor convergencia al valor exacto de la energía que la base GR.

En la segunda parte de este capítulo estudiamos los primeros estados excitados del Helio y su serie isoelectrónica. Para los cálculos realizados con la base GR simplificamos el problema tomando el valor del coeficiente no lineal optimizado para el estado fundamental como un valor constante para el resto de los estados. Trabajar con la base C3 simplifica los cálculos porque todas las energías y las funciones de onda se obtienen con una única diagonalización.

En el capítulo 5 mostramos la eficiencia de nuestro método considerando los estados  $S$  de sistemas de tres cuerpos en los que la masa nuclear es finita y las dos partículas livianas pueden ser iguales o diferentes. Para estos sistemas sólo resolvimos con la base C3, y estudiamos su convergencia incluyendo más correlación de dos maneras: i) aumentando

el número de términos en  $\Omega_\nu$ , ii) aumentando el valor de  $n_{12}$ . De las dos formas obtuvimos funciones de onda aproximadas precisas con un número moderado de términos que satisfacen las condiciones de Kato. Las energías del estado fundamental y los excitados  $n^{1,3}S$  de sistemas hidrogenoides, helioides, litioides y exóticos, son comparados cuando es posible, con valores obtenidos con sofisticados cálculos variacionales. Obtuvimos un buen acuerdo para la mayoría de los sistemas exóticos y a nuestro conocer estos son los primeros resultados publicados.

Por último, en el capítulo 6 utilizamos una función sencilla de la base GR para describir a los electrones de la capa K de átomos neutros. Las energías medias obtenidas para los átomos Ar, Kr y Xe son comparadas con los valores calculados por Mitnik et al. y con los calculados con una función que tiene una estructura similar a la propuesta por Le Sech para el átomo de Helio. Con los tres tipos de funciones obtenemos precisiones similares no sólo para la energía media sino también con los resultados de otras propiedades globales y locales (virial, valores medios de cantidades espaciales, etc.).

En resumen, hemos desarrollado un método que nos ha permitido construir funciones de onda aproximadas sencillas, precisas y que satisfacen las condiciones de cúspide en los puntos de doble coalescencia. Con todas hemos obtenido resultados para los distintos sistemas de tres cuerpos que hemos estudiado, con precisiones similares o mejores que muchas de la literatura y para algunos sistemas exóticos no hemos encontrado resultados con los cuales comparar. Cabe destacar que si bien en este trabajo nos hemos concentrado en generar funciones sencillas (con pocos o un número moderado de términos) con el objetivo de que luego sean utilizadas para el estudio de otros fenómenos físicos, por ejemplo los procesos de colisiones, la estructura de nuestras bases permiten desarrollar funciones sofisticadas con un número grande de términos.

Algunas de las funciones desarrolladas han sido aplicadas al estudio de procesos de colisiones (e,2e) (Frapiccini et al. 2007), para procesos (e,3e) en átomos de dos electrones (Gasaneo et al. 2006, Colavechia et al. 2007, Ancarani et al. 2008), para el estudio de procesos de doble-fotoionización de átomos por absorción de radiación, para el estudio de la carga nuclear necesaria para mantener ligados (carga crítica) dos electrones o un electrón y un muón (Rodríguez et al. 2009).

Si analizamos las perspectivas de nuestro trabajo podemos vislumbrar distintos caminos.

Por un lado, sabemos que los sistemas de tres cuerpos son los más simple de los sistemas cuánticos que tiene las dificultades de resolución de los sistemas más complejos. De esta manera, se buscará aplicar el método CICA para el estudio de sistemas de  $N$ - cuerpos.

Por otro lado, la metodología de resolución ha sido presentada en forma general para  $L > 0$ , pero en esta Tesis hemos realizado cálculos para estados  $S$ . Es nuestro objetivo extender el análisis de estados con  $L > 0$ , que se puede realizar con combinaciones lineales de funciones radiales  $\phi_\nu(r_{13}, r_{23}, r_{12})$  y matrices de rotación  $D_L^{M,K}(\alpha, \beta, \gamma)$  (Shakeshaft 1997). Las matrices de rotación son autofunciones de  $\hat{L}^2$  y las proyecciones,  $\hat{L}_z$  y  $\hat{L}'_z$  simultáneamente, con autovalores  $L(L+1)$ ,  $M$ , y  $K$ , respectivamente. Siguiendo el trabajo de Shakeshaft, las matrices de rotación se pueden expresar en términos de los ángulos polar y azimutal  $(\theta_{ik}, \phi_{ik})$  de  $\mathbf{r}_{ik}$  y el operador momento angular  $\hat{L}_-$ . De esta manera los estados con  $L$  general pueden escribirse en términos de la base radial junto con las funciones angulares. La ventaja de expandir con la base de funciones radiales  $\phi_\nu$  es que diagonaliza completamente las interacciones Coulombianas y remueve la parte diagonal de la energía cinética.

# Apéndice

# Apéndice A

## Operadores y Momento Angular

### Gradiente, $\nabla$

Las componentes cartesianas de  $\nabla$  están dadas por

$$\nabla_x = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \nabla_y = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \nabla_z = \frac{\partial}{\partial z}, \quad (\text{A.1})$$

Una expansión de  $\nabla$  en coordenadas polares puede ser escrita:

$$\nabla = \mathbf{e}_r \nabla_r + \mathbf{e}_\theta \nabla_\theta + \mathbf{e}_\varphi \nabla_\varphi \quad (\text{A.2})$$

donde

$$\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}, \quad \nabla_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad \nabla_\varphi = \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{A.3})$$

El orden de los operadores en la Ecuación (A.2) es esencial porque  $\mathbf{e}_r$ ,  $\mathbf{e}_\theta$ ,  $\mathbf{e}_\varphi$  dependen de  $\theta$  y  $\varphi$ .

El operador  $\nabla$  es escrito en la forma:

$$\nabla = \mathbf{n} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \nabla_\Omega \quad (\text{A.4})$$

donde  $\nabla_\Omega$  es la parte angular de  $\nabla$ , y  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$  es el vector unitario determinado por los ángulos  $\theta$  y  $\varphi$ . El operador  $\nabla_\Omega$  actúa sólo sobre las variables  $\theta$  y  $\varphi$ . En el sistema de coordenadas polares sólo tiene dos componentes

$$(\nabla_{\Omega})_{\theta} = \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad (\nabla_{\Omega})_{\varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_{\varphi} \quad (\text{A.5})$$

Usando la definición de momento angular y que  $\mathbf{p} = -i\nabla$ ,  $\nabla_{\Omega}$  puede escribirse como

$$\nabla_{kn} = -i\mathbf{n} \times \mathbf{L} \quad (\text{A.6})$$

## Operador Laplaciano, $\nabla^2$

En el sistema de coordenadas cartesianas el operador laplaciano se escribe de la siguiente manera:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{A.7})$$

que en el sistema de coordenadas polares está dado por:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (\text{A.8})$$

El operador  $\nabla^2$  también puede ser escrito como

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\Omega}^2 \quad (\text{A.9})$$

donde  $\nabla_{\Omega}^2$  es la parte angular de  $\nabla^2$

$$\nabla_{\Omega}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (\text{A.10})$$

Que expresado en términos del operador momento angular  $\mathbf{L}$  es:

$$\nabla_{\Omega}^2 = -\mathbf{L}^2 \quad (\text{A.11})$$

# Referencias

Abramowitz M y Stegun I 1970, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover publications Inc., New York

Ancarani L. U., Montagnese T. and Cappello C. Dal 2004 Phys. Rev. A **70** 012711.

Ancarani L. U. y Gasaneo G. 2007 Phys. Rev. A **75** 032706.

Ancarani L.U., Rodriguez K. V. y Gasaneo G. 2007 J. Phys. B **40** 2695-2702.

Ancarani L. U. y Gasaneo G. 2008 J. Phys. B **41** 105001.

Ancarani L. U., Gasaneo G., Colavecchia F. D. y Dal Cappello C. 2008 Phys. Rev. A **77** 062712.

Ancarani L. U., Dal Cappello C., Charpentier I., Rodriguez K. V. y Gasaneo G. 2008 Phys. Rev. A **78** 6 062709.

Ancarani L. U., Rodriguez K. V. y Gasaneo G. 2009 Proceedings de la 19<sup>th</sup> International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics.

Arias de Saavedra F., Buendía E. y Gálvez F. J. 1994 J. Phys. B **27** 5131.

Avery J. 2000, *Hyperspherical Harmonics and Generalized Sturmians*. (Dordrecht: Slower).

Bolognesi P., Flammini R., Kheifets A., Bray I. y Avaldi L. 2004 Phys. Rev. A **70** 062715.

Bolognesi P., Otranto S., Garibotti C. R., Flammini R., Alberti G. y Avaldi L. 2004 Phys. Rev. A **70** 062715.

Bonham R. A. y Kohl D. A. 1966 J. Chem. Phys. **45** 2471.

Boys S. y Handy N., 1969 Proc. R. Soc. London **309**, 209.

—————, 1969 Proc. R. Soc. London **310**, 43.

—————, 1969 Proc. R. Soc. London **310**, 63.

—————, 1969 Proc. R. Soc. London **311**, 309.

Bransden B. H. y Joachain C. J. 2003 *Physics of Atoms and Molecules* 2nd edn.

(Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall).

Byron F. W. y Joachain C. J. 1966 Phys. Rev. **146** 146 1.

Cann y Thakkar, 1992 Phys. Rev. A **46** 5397.

Chandrasekhar S., Elbert D. y Herzberg G. 1953 Phys. Rev. **91** 1172.

————— 1955 Phys. Rev. **98** 1050.

Cohen E. R. y Taylor B. N. 1998 Phys. Today 51 (8),9.

Colavecchia F. D., Gasaneo G. y Rodriguez K. V. 2007 Journal of Electron Spectroscopy **161**, 73.

Coolidge A. S. y James H. M. 1937 Phys. Rev. **51** 855.

Drake G. W. F. 1999 Phys. Scr. T **83** 83.

————— 2005 *Springer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics*(Berlin: Springer).

Dulieu O. and Le Sech C. 1989 Z. Phys. D **13** 9.

Edmonds A. R. 1960 *Angular Momentum in Quantum Mechanics*(Princeton University Press).

Erdelyi A., Magnus W., Oberhettinger F. y Tricomi F. G. 1953 *Higher Transcendental Functions* vol. 1 (New York: Mc Graw-Hill) p56.

Flores A. y Rivas-Silva J. F. 1999 Brazilian Journal of Phys. 29 3, 529.

Fock V. A. 1930 Z. Physic. **61** 126.

————— 1954 Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Fiz. **18** 161.

Forrey R. C. 2004 Phys. Rev. A **69** 22504.

Foster M., Peacher J. L., Schulz M., Hasan A., Madison D. H. 2005 Phys. Rev. A **76** 062708.

Frapiccini A. L., Rodriguez K. V., Gasaneo G. y Otranto S. 2007 Brazilian Journal of Phys. **37** no 3B 1115-1120.

Frolov A. M. y Yeremin A. Yu J. 1989 Phys. B **22**, 1263.

Frolov A. M., Smith Jr. V. H. y Komasa J. 1993 J. Phys. A **26** 6507.

Frolov A. M. and Smith Jr. V. H. 1995 J. Phys. B **28**, L449.

Frolov A. M. 1996 Phys. Rev. A **53**, 3853.

- 1998 Phys. Rev. A **58**, 4479.
- 2000 Phys. Rev. A **61**, 22509.
- 2002 Phys. Rev. A **65**, 024701.
- 2006 Phys. Lett. A **353**, 60-69
- 2006 Phys. Lett. A **357**, 334-338
- Galindo A. y Pascual P. 1989 Mecánica Cuántica vol 1 (Madrid: EUDEMA) p 314.
- Gálvez F. J. y Sarsa A. 1995 Z Phys. D **35** 163.
- Garibotti C. R., Gasaneo G. y Colavecchia F. D. 2000 Phys. Rev. A **62** 022710.
- Garibotti C. R. y Miraglia J. E. 1980 Phys. Rev. A **21** 572.
- Gasaneo G, Otranto S. y Rodríguez K. V. 2006 World Scientific, 360-363 (ISSBN: 978-981-270-412-2), editado por Fainstein, Miraglia .E., Lima M. A. P., Montenegro E. y Rivarola R. D.
- Gasaneo G. y Ancarani L. U. 2007 Phys. Rev. A **75** 032706.
- Gasaneo G. y Ancarani L. U. 2008 Phys. Rev. A **77** 012705.
- Goldman S. P. 1998 Phys. Rev. A **57** R677.
- Gotz J. R. , Walter M. y Briggs J. S. 2005 J. Phys. B **38** 1569.
- Green L. C., Mulder M. M. y Milner P. C. 1953 Phys. Rev. **91** 35.
- Gronwall T. H. 1937 Phys. Rev. **51** 655.
- Hart J. F. y Herzberg G. 1957 Phys.Rev **106**79.
- Heilmann O. J. y Lieb E. H. 1995 Phys. Rev. A **52** 3628.
- Henrich L. R. 1944 Astrophys. J. **99** 59.
- Henriett A., Aubert-Frecont M., Le Sech C y Masnou-Seeuwst F. 1984 J. Phys. B **17** 3417.
- Hoffmann-Ostenhof M., Hoffmann-Ostenhof T. y Stremnitzer H. 1992 Phys. Rev. Lett. **68** 3857.
- Hoffmann-Ostenhof M. y Seiler R. 1981 Phys. Rev. A **23** 21.
- Hylleraas E. A. y Undheim B. 1930 Z. Phys. **65** 759.
- Jastrow R. 1955 Phys. Rev. **98** 1479.
- Jones S., Macek J. H. y Madison D. 2004 Phys. Rev. A **70** 012711.
- Johnson B. R. 1981 Phys. Rev. A **24** 2339.

Joulakian B. and Dal Capello C. 1993 Phys. Rev. A **47** 3783.

Kato T. 1951a *Trans. Am. Math. Soc.* **70** 195-211.

——— 1951b *Trans. Am. Math. Soc.* **70** 212.

——— 1957 *Commun. Pure Appl. Math.* **10** 151.

Kheifetz A.S. and Bray I. 1998 Phys. Rev. A **57** 25901998.

——— 2004 Phys. Rev. A **69** 050701.

Kinoshita T 1957 Phys. Rev. **105** 1490.

Klar H. 2001 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **34** 2725.

Kleinekathofer U., Patil S. H., Tang K. T. y Tonnies J. P. 1996 Phys. Rev. A **54** 2840.

Koga T., Omura M, Teruya H. y Thakkar A. J. 1995 J. Phys. B **28** 3113.

Korobov V. I. 2000 Phys. Rev. A **61** 064513.

——— 2002 Phys. Rev. A **66** 024501.

Le Sech C. 1990 J. Phys. B **23**, L739-L745.

——— 1997 J.Phys. B **30** L47.

Lin C. D. 1995 Phys. Reports **257** 1-83.

Magnier S., Aubert-Frécon M., Hansen J. y Le Sech C. 1999 J. Phys. B **32** 5639.

Miller Jr. W. 1977 *Symmetry and Separation of Variables* Encyclopedia of Mathematics Vol. 4, Addison-Wesley.

Mitnik D.M. and Miraglia J.E. 2005 J. Phys. B **38** 3325.

Moumeni A., Dulieu O. y Le Sech C. 1990 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **23**, L739-L745.

Myers C. R., Umrigar C. J., Sethna J. P. y Morgan J. D. III 1991 Phys. Rev. A **44** 5537.

Otranto S., Gasaneo G. and Garibotti C.R. 2004 Nuc. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **217** 12.

Patil S. H. 1990 J. Phys. B **23** 1.

——— 1999 Eur. Phys. J. D **6** 171.

——— 2003 Phys. Rev. A **68** 044501.

——— 2004 Eur. J. Phys. **25** 91.

——— 2006 J. Phys. B **39** 3757.

- Pekeris C. L. 1958 Phys. Rev. **112** 1649.
- Pont M. and Shakeshaft R. 1995 Phys. Rev. A **51**, 257.
- Popov Y. V. y Ancarani L. U. 2000 Phys. Rev. A **62**, 042702.
- Pluinage P. 1950 Ann. Phys. (Paris) **5** 145.
- Qiu Y., Tang J., Burgdfer J. y Wang J. 1997 J. Phys. B **30** L689.
- Rodriguez K.V. y Gasaneo G. 2005 J. Phys. B **38** L259.
- Rodriguez K. V., Gasaneo G., Mitnik D. M. y Miraglia J.E. 2007 Journal of Electron Spectroscopy **161**, 204.
- Rodriguez K. V., Gasaneo G. y Mitnik D. M. 2007 J.Phys. B **40** 3923.
- Rodriguez K. V., Ancarani L. U., Gasaneo G. y Mitnik D. M. 2010 Int. Jour. Q. Chem. **110** 1820-1832.
- Rodriguez K. V., Gonzalez Y. V., Gasaneo G., Ancarani L. U. y Mitnik D. M. 2010 Hyperfine Interact. bf 193 147.
- Roothaan C.C. y Weiss A. W. 1960 Rev. Mod. Phys. **32** 194.
- Sarsa A., Le Sech C. 2001 Phys. Rev. A **63** 22501.
- Siebbeles L. D. A., Marshall D. P. y Le Sech C. 1993 J. Phys. B **26** L321.
- Schwartz C. 2006 Int. J. of Modern. Phys. E **15** 1-12.
- Thakkar A. J. Koga T. 1994 Phys. Rev. A **50** 854.
- Teng Z. y Shakeshaft R. 1993 Phys. Rev. A **47** 3487.
- 1995 Phys. Rev. A **49** 3579.
- Umezawa N. y Tsuneyuki, S. 2003 J. Chem. Phys. **119**, 10015.
- Umezawa N., Sarsa A., Le Sech C. y Chikyow T. 2006 Phys. Rev. A **73** 012512.
- Varshalovich D. A., Moskalev A. N. y Khersonskii V. K. 1989 *Quantum Theory of Angular Momentum*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., USA.
- Yang B., Pont M., Shakeshaft R., Van Duijin E. y Piraux B. 1997 Phys. Rev. A **56** 4946.