

Te
521
196

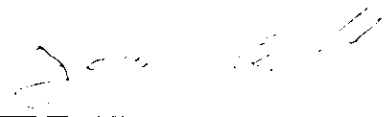
**ENERGIA DEL ESTADO BASAL DEL ATOMO
DE BERILIO EN 2 DIMENSIONES**

**BIBLIOTECA
DE LA
UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA**

Licenciatura en Física

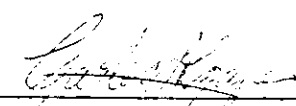


Vo. Bo. :

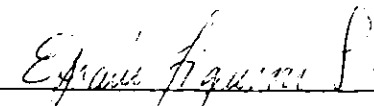
(f) 

Lic. Adrián Licht
Asesor

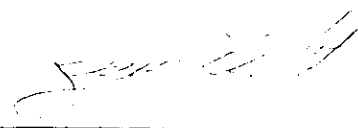
Tribunal:

(f) 

Dr. Carlos Cajas

(f) 

Lic. Efraín Figueroa

(f) 

Lic. Adrián Licht

Fecha de aprobación: 2 de septiembre de 1986.



CONTENIDO

	Página
I. INTRODUCCION	1
II. BASES TEORICAS	3
1. El método variacional	3
2. El método de campo auto-consistente de Hartree	6
3. Algebra exterior	9
III. LA ELECTRODINAMICA EN 2-D	15
IV. CALCULOS VARIACIONALES PARA EL ATOMO HIDROGENICO Y EL ATOMO DE BERILIO EN 2-D	23
1. El átomo hidrogénico	23
1.1 Base gaussiana	25
1.2 Base exponencial	26
2. El átomo de berilio	27
2.1 Base gaussiana	28
2.2 Base exponencial	29
V. ECUACIONES DE CAMPO AUTOCONSISTENTE PARA BERILIO EN 2-D Y SU SOLUCION	31
1. Ecuaciones de campo auto-consistente para berilio	31
2. Solución de las ecuaciones de Hartree	32
VI. CONCLUSIONES	37
VII. BIBLIOGRAFIA	39

APENDICES

A.	Evaluación de las integrales presentadas en los cálculos variacionales del capítulo IV.	41
B.	Resolución de las ecuaciones de Hartree	45
C.	Evaluación del promedio sobre todo el espacio del potencial de interacción	49
D.	Evaluación del potencial de interacción promediado sobre la primera función	53

LISTA DE CUADROS

Cuadro		Página
5.1	Valores utilizados en las iteraciones hechas con el programa tesis	35

I. INTRODUCCION

El estudio de universos de dimensionalidad espacial, diferente a la nuestra, ha sido y será fuente de entendimiento, por comparación, de las características especiales del universo tridimensional.

De todos los posibles universos, en particular, es más sencillo el estudio de mundos con dimensión menor que 3 y de estos, el universo bidimensional presenta bastantes semejanzas con el tridimensional, por lo que ya desde principios de siglo se le empezó a investigar, aunque de manera poco formal. En los últimos 4 ó 5 años, este tema ha sido objeto de rigurosos estudios tendientes a elucidar su estructura y características.

Es así como Asturias y Aragón³ han propuesto una tabla de los elementos químicos en 2-D, a partir del cálculo de las energías del átomo de hidrógeno en este mundo, utilizando el potencial coulombico correcto, es decir, el potencial logarítmico, como se verá después. Sin embargo, en ese trabajo, el método utilizado (Thomas-Fermi) permitió solamente conocer los órdenes energéticos de átomos complejos, sin poder dar valores muy refinados acerca de los valores precisos de energía, salvo en el caso del hidrógeno, para el cual se hizo un cálculo variacional más preciso.

En este trabajo se hace, primero una demostración de por qué el potencial coulombico ha de ser logarítmico en un universo 2-D, utilizando para esto el formalismo del álgebra exterior y la geometría diferencial. Luego, se plantean las ecuaciones de Schrödinger para el átomo hidrogénico y para el átomo de Berilio (que en 2-D posee dos electrones), y se utiliza el

método de variación lineal para obtener cuotas superiores de los valores de energía.

Entonces, se procede a plantear las ecuaciones de Schrödinger bajo las hipótesis del método de campo auto-consistente de Hartree, y las ecuaciones integro-diferenciales resultantes se resuelven numéricamente con el algoritmo Noumerov. Se concluye con una discusión de los resultados obtenidos.

II. BASES TEORICAS

Se postula que, en un 2-D, el comportamiento de un sistema atómico también está descrito por la ecuación de Schrödinger:

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.1)$$

con las correspondientes modificaciones a un universo 2-D, como por ejemplo el uso de coordenadas polares en lugar de coordenadas esféricas. Dado que los valores de constantes fundamentales, como por ejemplo \hbar , se desconocen para este universo, tales cantidades serán absorbidas por las variables de las ecuaciones del caso. El postulado 2.1 implica, entonces, trasladar los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica tridimensional al mundo bidimensional.

Dado que, como se verá más adelante, el potencial coulombico por utilizarse será logarítmico, la solución de la ecuaciones de Schrödinger, en forma exacta, no ha sido posible hasta la fecha, por lo que será necesario el uso de métodos que proporcionen respuestas aproximadas pero confiables. Por lo tanto, se expone, a continuación, un resumen de los métodos utilizados en este trabajo y, finalmente, otro correspondiente al álgebra de formas. Los dos primeros temas se basan en las referencias 10 y 11, mientras que el último tema en las referencias 3 y 15.

1. El método variacional.

Este método se afirma en el principio de variación, el cual se puede presentar de la siguiente manera:

Sea Ψ una función de prueba y sean $\{u_n\}$ todas las eigenfunciones del operador hamiltoniano H . Ya que $\{u_n\}$ es completo y suponiéndolo ortonormal, se obtiene:

$$\Psi = \sum_n A_n u_n, \quad H u_n = E_n u_n \quad (2.2)$$

de donde

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \int \Psi^* H \Psi d\tau = \sum_n E_n |A_n|^2. \quad (2.3)$$

Substituyendo $E_0 \leq E_n, \forall n$ en la ecuación 2.3, se obtiene

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle \geq \sum_n E_0 |A_n|^2 = E_0 \sum_n |A_n|^2 \quad (2.4)$$

pero

$$\sum_n |A_n|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (2.5)$$

por lo tanto, obtenemos

$$\frac{\int \Psi^* H \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \geq E_0 \quad (2.6)$$

El método variacional consistirá, entonces, en escoger una función de prueba que dependa de ciertos parámetros; y después de haber evaluado el lado izquierdo de la expresión 2.6, en minimizar la expresión obtenido para la energía, con respecto a los parámetros mencionados. El resultado que

se obtiene es un límite superior para la energía del estado basal E_0 . Este límite estará tan cerca del verdadero valor de la energía del estado basal, como cerca o aproximadamente esté la función de prueba a la verdadera función de onda de ese estado; por ejemplo, si tomamos

$$\Psi = \frac{\Psi_v + \delta\phi}{(1 + \delta^2)^{1/2}} \quad (2.7)$$

donde: Ψ_v = verdadera función del estado basal

δ = valor de la desviación

$$\langle \Psi_v | \Psi_v \rangle = \langle \phi | \phi \rangle = 1$$

$$\langle \Psi_v | \phi \rangle = 0$$

se tiene, entonces, para el valor de expectación de la energía:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \frac{1}{1 + \delta^2} \left[\langle \Psi_v | H | \Psi_v \rangle + \delta^2 \langle \phi | H | \phi \rangle \right] \quad (2.8)$$

ahora, utilizando la aproximación

$$\frac{1}{1 + \delta^2} = 1 - \delta^2 + \delta^4 - \delta^6 + \dots \quad (2.9)$$

y tomando sólo los dos primeros términos, tendremos

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle \simeq (1 - \delta^2) \left[E_v + \delta^2 \langle \phi | H | \phi \rangle \right] = E_v - \delta^2 [\dots] \quad (2.10)$$

El método variacional es utilizado principalmente para determinar

límites superiores al valor de energía para el estado basal, pero también puede ser modificado²⁸ para calcular límites superiores a la energía de estados excitados. Es de hacer notar también ¹² que una optimización de la función de onda a partir de la optimización de la energía, como se propuso anteriormente, no implica necesariamente una mejora para otros valores de expectación de operadores que no sean el hamiltoniano.

II. El método de campo auto-consistente de Hartree.

Este método fue propuesto¹⁴ por D.R. Hartree, en 1928, quien se basó en argumentos físicos intuitivos para justificarlo. En este método se propone

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \phi(\vec{r}_1) \phi(\vec{r}_2) \dots \phi(\vec{r}_n) \quad (2.11)$$

y se asume que cada electrón se mueve en un campo central, calculado a partir del potencial nuclear y de las funciones de onda de los electrones restantes y que la densidad de carga de un electrón es "e" veces su densidad de probabilidad de posición, ie:

$$\rho = e \phi^* \phi \quad (2.12)$$

por lo que

$$\bar{V}_i(\vec{r}_k) = e \int \phi^* \phi v(\vec{r}_k - \vec{r}_*) d\tau_* \quad (2.13)$$

Entonces, para el k-ésimo electrón, se busca la función de onda que sea solución de la ecuación

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V_{nk} + \sum_{j \neq k} \vec{V}_j \right] \phi_k = \epsilon_k \phi_k \quad (2.14)$$

Luego, estas funciones de onda se hacen consistentes con los campos de los cuales fueron calculadas, iterando hasta un orden dado de precisión.

Pero la ecuación 2.13 difícilmente será solo función de r_k , por lo que, en la ecuación 2.14 se ha de utilizar V_j promediado sobre las k -ésimas variables angulares, siendo esta la última y más importante aproximación, la cual le dará simetría esférica al potencial.

La validez de este método puede ser fundamentada sólidamente²⁶ en el principio variacional, ya que, si se utiliza 2.11 como función de prueba en la ecuación

$$H\gamma = E\gamma \quad (2.11)$$

$$H = \sum_k \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 - V_{nk} \right) + \sum_k \sum_{j \neq k} V_{jk} \quad (2.15)$$

se tendrá

$$\int \dots \int \gamma^* H \gamma d\tau_1 \dots d\tau_n = \sum_k \int \phi_k^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 - V_{nk} \right) \phi_k d\tau_k + \sum_{k \neq j} \iint \phi_j^* \phi_k^* V_{jk} \phi_j \phi_k d\tau_j d\tau_k. \quad (2.16)$$

Para el valor de E , la función óptima se obtiene variando cada ϕ_k separadamente, de manera que se minimice la expresión anterior. Pero la única dependencia de 2.16 en es a través de los términos

$$\int \varphi_K^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_K^2 - V_{nK} \right) \varphi_K d\tau_K + \sum_{j \neq K} \iint \varphi_j^* \varphi_K^* V_{jK} \varphi_j \varphi_K d\tau_j d\tau_K \quad (2.17)$$

$$= \int \varphi_K^* H_K \varphi_K d\tau_K$$

donde

$$H_K = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_K^2 - V_{nK} + \sum_j \int \varphi_j^* V_{jK} \varphi_j d\tau_j \quad (2.18)$$

por lo que debemos minimizar 2.17, o sea, el valor de expectación del operador H_K , es decir, e_K . Pero el principio de variación nos dice que e_K será mínima cuando φ_K sea eigenfunción de H_K , es decir, cuando tenga

$$H_K \varphi_K = \epsilon_K \varphi_K \quad (2.19)$$

ecuación formalmente idéntica a la ecuación 2.14, lo que implica que, variacionalmente hablando, las funciones de onda de Hartree son las mejores para el cálculo de E , que entonces toma la forma

$$E = \sum_K \epsilon_K - \sum_K \sum_{j > K} \iint \varphi_j^* \varphi_K^* V_{jK} \varphi_j \varphi_K d\tau_j d\tau_K \quad (2.20)$$

ya que los términos de interacción electrónica serían tomados en cuenta dos veces, de no incluir el sustraendo en 2.20.

Se debe notar que la energía calculada por medio de 2.20 diferirá de la verdadera energía, toda vez que se obtienen las aproximaciones mencionadas, por razón de que la función de onda propuesta (2.11) no considera efectos de spin, ni es antisimétrica bajo el intercambio de electrones. A la diferencia entre la energía real y la energía 2.20 se le llamó de correlación. Esta diferencia fue señalada por²⁶ Fock y Slater en 1930, quienes

propusieron el uso de spin-orbitales para corregir este problema.

III. Álgebra exterior.

El álgebra exterior es la de las formas diferenciales, las cuales son campos tensoriales completamente antisimétricos de la forma (\mathcal{P}) . Su utilidad radica en el hecho de que permiten que todo el análisis vectorial clásico pueda ser expresado en un lenguaje geométrico independiente de coordenadas, y aun de la forma de la métrica, lo que permite su extensión sin dificultades a espacios n-dimensionales.

Sea p un punto espacio n-dimensional M . En cada $P \in M$ se definen las uno-formas base dx^i , de manera que cualquier uno-forma ω se exprese como

$$\omega = \sum_{i=0}^n a_i dx^i \quad (2.21)$$

y se defina

$$\omega_1 + \omega_2 = \sum_{i=0}^n (a_{1i} + a_{2i}) dx^i \quad (2.22)$$

Se forma una base para p-formas a través del uso del producto cuña, el cual cumplirá con

$$dx^i \wedge dx^j = - dx^j \wedge dx^i \quad (2.23)$$

$$\left(\sum_i a_i dx^i \right) \wedge dx^j = \sum_i a_i dx^i \wedge dx^j \quad (2.24)$$

lo cual nos permite definir las p-formas base como

$$dx^{i_1} \wedge dx^{i_2} \wedge \dots \wedge dx^{i_p} \quad (2.25)$$

Nótese que, según 2.23, no se permite repetir ningún dx^l en 2.25 y que cualquier p -forma con $p > n$ será necesariamente igual a cero. Por lo tanto, las p -formas base expanden un espacio vectorial en cada punto de M , de manera que cualquier p -forma se pueda expresar como

$$\omega = \sum_{\substack{i_1, \dots, i_p \\ i_j \neq 0 \\ \dots p}}^n a_{i_1, \dots, i_p} dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_p} \quad (2.26)$$

Se define una cero-forma como un campo escalar. Definiendo también la derivada exterior de una p -forma como la $p+1$ -forma $d\omega$, tal que

$$d\omega = \sum_{i_j} \frac{\partial}{\partial x^j} a_{i_1, \dots, i_p} dx^j \wedge dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_p} \quad (2.27)$$

Nótese que, si ω es una n -forma, $d\omega = 0$. Finalmente, introducimos el operador de Hodge u operador estrella, el cual asigna a una p -forma otra pero de rango $n-p$, de manera que, actuando sobre una p -forma base, nos dé:

$$*(dx^{i_1} \wedge dx^{i_2} \wedge \dots \wedge dx^{i_p}) = c_{i_1} c_{i_2} \dots c_{i_p} \text{sign } \sigma (dx^{i_{p+1}} \wedge \dots \wedge dx^{i_n}) \quad (2.28)$$

donde c_i corresponde a los coeficientes de la métrica diagonalizada de M :

$$|\eta_{\alpha\beta}| = \begin{vmatrix} c_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & c_n \end{vmatrix} \quad (2.29)$$

Y $\text{Sign } \sigma$ nos dice que si la permutación de σ de los índices, con respecto a un orientamiento espacial de ejes $(1, 2, 3, \dots, n)$, es par, su valor se-

rá(+1) y que, en caso contrario, en permutación impar, valdrá (-1)

Por ejemplo se tiene

$$\text{en } n=4 \quad ; \text{ si } |\eta_{\alpha\beta}| = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (2.30)$$

se tendrá

$$*(dx^1 \wedge dx^4) = - dx^2 \wedge dx^3. \quad (2.31)$$

A partir de las definiciones dadas, resultan entonces los cuatro teoremas fundamentales de las formas diferenciales, los cuales sólo se enumeran aquí:

T1: Sea ω una p -forma arbitraria, entonces

$$d^2\omega = 0 \quad (2.32)$$

Este teorema se conoce también como el lema de Poincaré.

T2: Converso del teorema 1,

$$\text{si } d\omega = 0 \text{ entonces } \exists \lambda: d\lambda = \omega \quad (2.33)$$

T3: Este teorema también se conoce como la descomposición factorial de Hodge, y se dice:

$$\forall \omega \exists_1 \alpha, \beta, \gamma \text{ (únicos)}: \quad (2.34)$$

$$\omega = d\alpha + *(d^*\beta) + \gamma.$$

donde $\omega = p$ -forma arbitraria

$\alpha = p-1$ -forma

$\beta = p+1$ -forma

$\gamma =$ forma armónica tal que : $\nabla^2 \gamma = 0$

T4: Este teorema es llamado teorema generalizado de Stokes, y se dice que, si p -forma y D un dominio $(p+1)$ dimensional, entonces

$$\int_{\partial D} \omega = \int_D d\omega. \quad (2.35)$$

Ya con el material presentado, se establece la correspondencia clave entre un campo vectorial \vec{A} y una uno-forma ϕ_A , de manera que

$$\vec{A} = \sum_i A_i \hat{x}_i \longleftrightarrow \phi_A = \sum_i A_i dx^i. \quad (2.36)$$

Entonces, para un espacio euclidiano n -dimensional, se tendrá:

$$\vec{A} \cdot \vec{B} \longleftrightarrow *(\phi_A \wedge * \phi_B) = *(\phi_B \wedge * \phi_A) \quad (2.37)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} \longleftrightarrow *[d(*\phi_B)] \quad (2.38)$$

$$\nabla f \longleftrightarrow df \quad (2.39)$$

$$\vec{A} \times \vec{B} \longleftrightarrow *(\phi_A \wedge \phi_B) \quad (2.40)$$

$$\nabla \times \vec{A} \longleftrightarrow *(d\phi_A) \quad (2.41)$$

Con esta equivalencias hechas, se pueden poner todas las identidades vectoriales en términos de formas diferenciales, por ejemplo:

$$\nabla \times (\nabla g) = \vec{0} \longleftrightarrow * (d^2 f) = 0 \quad (2.42)$$

$$\nabla \cdot (\nabla \times \vec{A}) = 0 \longleftrightarrow * (d^2 \phi) = 0 \quad (2.43)$$

En especial, para un espacio 2-D euclidiano, se tendrá, haciendo uso de 2.37-2.41:

$$\begin{aligned} \nabla f &= \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \hat{x}_i \\ \vec{A} \cdot \vec{B} &= \sum_i A_i B_i \quad \vec{A} \times \vec{B} = A_1 B_2 - A_2 B_1 \\ \nabla \cdot \vec{B} &= \sum_i \frac{\partial B_i}{\partial x_i} \quad \nabla \times \vec{B} = \frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y} \end{aligned} \quad (2.44)$$

Nótese que, aquí, tanto el producto $\vec{A} \times \vec{B}$ como $\nabla \times \vec{A}$ dan como resultado campos escalares. Los resultados 2.44 son idénticos a los que se obtendrían de hacer $dz=0$, en la formulación del álgebra exterior para un espacio 3-D, con el mismo tipo de métrica.



III. LA ELECTRODINAMICA EN 2-D

De lo visto en la última sección, se desprende que las generalizaciones de leyes físicas, a partir del universo tridimensional a otras dimensionalidades, se han de hacer utilizando un lenguaje geométrico, o sea, usando las formas diferenciales, ya que éstas nos darán, de manera inequívoca, las expresiones analíticas correctas, como en el caso de los operadores divergencia y gradiente, que se estudiaron en la sección anterior.

Entonces se emplean las ecuaciones de Maxwell para 3-D, en unidades "cgs"²:

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \nabla \times \vec{E} = \vec{0} \quad (3.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \nabla \times \vec{B} = 4\pi\vec{J} \quad (3.4)$$

en las que se utiliza $c=1$. Ahora, en un espacio 3+1, con métrica

$$|\eta_{\alpha\beta}| = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (3.5)$$

se define el tensor del campo electromagnético \tilde{F} como la dos-forma

$$\tilde{F} = -E_x dt \wedge dx - E_y dt \wedge dy - E_z dt \wedge dz + B_x dy \wedge dz + B_y dz \wedge dx + B_z dx \wedge dy \quad (3.6)$$

o bien en componentes, en la forma covariante

$$\left| \tilde{F}_{\alpha\beta} \right| = \begin{vmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & B_z & -B_y \\ E_y & -B_z & 0 & B_x \\ E_z & B_y & -B_x & 0 \end{vmatrix} \quad (3.7)$$

Estas definiciones permiten escribir las ecuaciones de Maxwell en un lenguaje geométrico, ya que las ecuaciones 3.1-3.2 son ahora resumidas en la ecuación

$$d\tilde{F} = 0 \quad (3.8)$$

y las dos ecuaciones de Maxwell restantes, en la ecuación

$$d^*\tilde{F} = 4\pi \underline{J} \quad (3.9)$$

con el cuadvivector $\underline{J} = (\rho, J_x, J_y, J_z)$

Entonces, para un espacio con dos coordenadas espaciales y una temporal, o sea, un espacio 2+1, con una métrica del mismo tipo que 3.7, es decir, con

$$\left| \eta_{\alpha\beta} \right| = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (3.10)$$

Según lo visto en la sección de formas diferenciales, debemos hacer $dz=0$ en 3.5, 3.8 y 3.9, para obtener las leyes del electromagnetismo en este

espacio, lo que da como resultado:

$$\tilde{F} = -E_x dt \wedge dx - E_y dt \wedge dy + B dx \wedge dy. \quad (3.11)$$

o sea

$$|\tilde{F}_{\alpha\beta}| = \begin{vmatrix} 0 & -E_x & -E_y \\ E_x & 0 & B \\ E_y & -B & 0 \end{vmatrix} \quad (3.12)$$

y de

$$d\tilde{F} = 0 \quad (3.13)$$

se tendrá, en componentes, la ecuación

$$F_{\nu\lambda,\mu} + F_{\lambda\mu,\nu} + F_{\mu\nu,\lambda} = 0 \quad (3.14)$$

con ν, λ y μ que varían de 1 a 3 y la coma que indica derivada parcial con respecto a la i -ésima coordenada.

Además de

$$d^*\tilde{F} = K \underline{J} \quad (3.15)$$

se tendrá también, en componentes:

$$F_{\mu\nu,\lambda} = K J_\mu \quad (3.16)$$

en los cuales se ha sustituido el valor 4π por la constante k , ya que ésta depende de la dimensionalidad del espacio, como veremos más adelante. Usando las componentes 3.12 de \vec{F} en la ecuación 3.14, se tendrá

$$\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} = \frac{\partial B}{\partial t} \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} = k\rho \quad (3.18)$$

las que, con la ayuda de 2.44, pueden ser identificadas como

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad (3.17)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = k\rho \quad (3.18)$$

y de la misma manera se obtienen, a partir de 3.15

$$\frac{\partial B}{\partial x} = -\frac{\partial E_y}{\partial t} - kJ_y \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial B}{\partial y} = \frac{\partial E_x}{\partial t} + kJ_x \quad (3.20)$$

De 3.16 y según 2.44, B es un campo escalar, lo que entonces sugiere

$$B = \nabla \times \vec{A} \quad (3.21)$$

Y ya de acuerdo a 2.42, $\nabla \times (\nabla \phi) = \vec{0}$, de 3.16 se tendrá

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad (3.22)$$

donde A y ϕ serán los respectivos potenciales vectorial y escalar, a partir de los cuales se define el trivector \underline{A} como

$$\underline{A} = (\phi, A_x, A_y) \quad (3.23)$$

lo que a su vez permite escribir las componentes de \tilde{F} como

$$F_{\mu\nu} = A_{\nu,\mu} - A_{\mu,\nu} \quad (3.24)$$

a la manera de \tilde{F} en el espacio 3+1. Ahora, para determinar el valor de la constante k , tomamos la ecuación 3.18 y la reescribimos como

$$\int_S (\nabla \cdot \vec{E} - k\rho) dS = 0 \quad (3.25)$$

en la cual S representa una superficie cerrada en el espacio 2+1, es decir, el área acotada por una curva cerrada. De 3.22, se tendrá

$$\int_S \nabla \cdot \vec{E} dS = k \int \rho dS = k Q_{Total} \quad (3.26)$$

pero, según el teorema de Green¹

$$\int_S \nabla \cdot \vec{E} dS = \oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} \quad (3.27)$$

lo que modifica 3.26 a la forma

$$\oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} = k Q_{Total} \quad (3.28)$$

que es la manera en que se presenta el teorema de Gauss, para el flujo del campo electromagnético en un espacio 2-D. Suponiendo que \vec{E} sea constante y paralelo a \vec{dl} , o sea, suponiendo una distribución "esférica" del campo eléctrico, se tendrá

$$E \oint_C dl = Ka \quad (3.29)$$

$$E \cdot 2\pi r = Ka \quad (3.30)$$

$$\therefore E = \frac{Ka}{2\pi r} \quad (3.31)$$

y ya que originalmente se usaron unidades cgs, se tendrá que

$$K = 2\pi \quad (3.32)$$

por lo que las ecuaciones de Maxwell, en un universo 2+1, en unidades "cgs" se pueden escribir como

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad (3.33)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 2\pi \rho \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial B}{\partial x} = -\frac{\partial E_y}{\partial t} - 2\pi J_y \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial B}{\partial y} = \frac{\partial E_x}{\partial t} + 2\pi J_x \quad (3.36)$$

Ahora, examinando la dependencia de \vec{E} en un potencial escalar, se toma la ecuación 3.22 en el caso que $\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = 0$ y se tiene

$$\vec{E} = -\nabla \phi \quad (3.37)$$

que, con la ayuda de 3.31, implica

$$-\nabla\phi = \frac{Q_r}{r} \quad (3.38)$$

y de donde se obtiene que

$$\phi = -Q_r \ln|r|. \quad (3.39)$$

Aquí será necesario introducir una constante adecuada en el argumento de 3.39, lo que se hará en la sección siguiente.

Los resultados obtenidos concuerdan perfectamente con los de R.Lapidus quien utilizó un desarrollo distinto al aquí presentado. Además, (referencia 19) reporta que los potenciales satisfacen ecuaciones de onda

$$\square^2 A_\mu = -2\pi J_\mu \quad (3.40)$$

con

$$\square^2 = \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (3.41)$$

y en la ausencia de corrientes y cargas:

$$\square^2 F_{\mu\nu} = 0 \quad (3.42)$$

O sea que el campo satisface la ecuación de ondas libres, por lo que existen ondas electromagnéticas en 2-D que viajan a velocidad $c=1$,

según las unidades escogidas. Las ecuaciones 3.40-3.42 son obtenidas substituyendo 3.21 en las ecuaciones de Maxwell 3.33-3.36 y siguiendo el procedimiento utilizado en la teoría electromagnética en 3-D².

A partir de los resultados presentados aquí, es posible desarrollar toda la electrodinámica bidimensional a semejanza de la tridimensional¹⁸. De especial importancia para el presente trabajo es la ecuación 3.39, que dice que la dependencia del potencial escalar electrostático en el vacío ($\vec{A}=\vec{0}$ o simplemente $\frac{\partial \vec{A}=\vec{0}}{\partial t}$) será logarítmica, hecho que influirá grandemente en las características del electromagnetismo en 2-D, como por ejemplo ⁴, y no existirá una cantidad semejante al vector de Runge-Lenz que se conserve bajo este tipo de potencial.

IV. CALCULOS VARIACIONALES PARA EL ATOMO

HIDROGENICO Y EL ATOMO DE BE. EN 2-D

En esta sección, se plantean y se resuelven las ecuaciones de Schroedinger para los átomos mencionados, bajo las hipótesis del principio de variación, por lo que se obtienen cotas superiores para las energías de los estados basales de estos átomos. Los cálculos de la primera parte, son originales de Sergio R. Aragón, mientras que la segunda parte es trabajo conjunto del mencionado autor y del de esta tesis.

1. El átomo hidrogénico.

Este átomo está formado por un núcleo de carga $+Ze$ y un solo electrón de carga $-e$ unidos por medio de una energía potencial logarítmica, según 3.39, de valor

$$V = -Ze^2 \ln |r/r_0| \quad (4.1)$$

donde la constante de escala r_0 se define de manera adecuada. Entonces se tiene que la ecuación de Schrödinger, para este átomo, toma la forma⁵

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + Ze^2 \ln |r/r_0| \right\} \Psi = E\Psi \quad (4.2)$$

con $\Psi = \Psi(r, \theta)$ y ∇^2 el operador laplaciano en coordenadas polares.

Dado que el potencial depende exclusivamente de la variable r , la ecuación de onda es separable por medio de ⁵ ,

$$\Psi_{nl}(r, \theta) = \varphi_{nl}(r) e^{il\theta} / \sqrt{2\pi}, \quad l = 0, 1, \dots \quad (4.3)$$

Por causa de que se desconocen los valores de las constantes h , e , etc. en este universo, se definen⁵ las constantes:

$$\beta = 2\mu z e^2 / \hbar^2 \quad (4.4)$$

$$r_0 = (2\mu z e^2 / \hbar^2)^{-1/2} = (\sqrt{\beta})^{-1} \quad (4.5)$$

y la variable adimensional "z" como:

$$z = \sqrt{\beta} r \quad (4.6)$$

de manera que la ecuación radial correspondiente a la ecuación 4.2 tome la forma:

$$\left\{ \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \left(z \frac{d}{dz} \right) - \frac{l^2}{z^2} - \ln z + E' \right\} \varphi(z) = 0 \quad (4.7)$$

donde

$$E' = \frac{E}{ze^2} \quad (4.8)$$

Ya que este trabajo se limita al estado basal, $l=0$, y de 4.7, se tiene para el átomo hidrogénico en este estado:

$$H = -\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \left(z \frac{d}{dz} \right) + \ln z \quad (4.9)$$

1.1 Pase gaussiana. A partir de 4.9 y utilizando una base gaussiana $\phi(z)$ normalizada :

$$\phi = \sqrt{4\alpha} e^{-\alpha z^2} / \sqrt{2\pi} \quad (4.10)$$

se tiene

$$H\phi = \left[\underbrace{4\alpha\sqrt{4\alpha} e^{-\alpha z^2}}_a - \underbrace{4\alpha^2 z^2 \sqrt{4\alpha} e^{-\alpha z^2}}_b + \underbrace{\ln z \sqrt{4\alpha} e^{-\alpha z^2}}_c \right] / \sqrt{2\pi} \quad (4.11)$$

y dado que $E = \langle \phi / H / \phi \rangle$, se obtiene, efectuando las integraciones en los segmentos indicados (ver apéndice A),

$$a: \quad 4\alpha \int_0^{\infty} 4\alpha e^{-2\alpha z^2} z dz = 4\alpha \quad (4.12)$$

$$b: \quad -16\alpha^3 \int_0^{\infty} z^3 e^{-2\alpha z^2} dz = -4\alpha \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy = -2\alpha \quad (4.13)$$

donde

$$\begin{aligned} c: \quad & 4\alpha \int_0^{\infty} \ln z e^{-2\alpha z^2} z dz = 2 \int_0^{\infty} y \ln \frac{y}{\sqrt{2\alpha}} e^{-y^2} dy \\ & = 2 \left[\int_0^{\infty} y \ln y e^{-y^2} dy - \int_0^{\infty} \ln \sqrt{2\alpha} y e^{-y^2} dy \right] \\ & = -\frac{1}{2} \ln 2\alpha - \frac{1}{2} \phi. \end{aligned} \quad (4.14)$$

donde ϕ es la constante de Euler¹³, $c=0.577215\dots$, de manera que

$$E(\alpha) = 2\alpha - \frac{1}{2} \ln(2\alpha) - \frac{1}{2} \phi \quad (4.15)$$

Minimizando 3.15 y evaluando esa expresión, se tiene el resultado de

$$E = 0.557966\dots$$

1.2 Base exponencial. Siempre a partir de 4.9, pero ahora utilizando una base exponencial normalizada

$$\phi(z) = 2\alpha e^{-\alpha z} / \sqrt{2\pi} \quad (4.16)$$

se tiene

$$H\phi = \left(\underbrace{\frac{2\alpha e^{-\alpha z}}{z}}_a - \underbrace{2\alpha^2 e^{-\alpha z}}_b + \underbrace{2\alpha e^{-\alpha z} \ln z}_c \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (4.17)$$

y de $\langle \phi/H/\phi \rangle$, haciendo también la integración por partes (ver apéndice A):

$$a: 2\alpha (2\alpha^2) \int_0^{\infty} e^{-2\alpha z} dz = 2\alpha^2 \quad (4.18)$$

$$b: 2\alpha (-2\alpha^2) \int_0^{\infty} z e^{-2\alpha z} dz = -\alpha^2 \quad (4.19)$$

$$c: (2\alpha)^2 \int_0^{\infty} z e^{-2\alpha z} \ln z dz = 1 - \zeta - \ln 2\alpha \quad (4.20)$$

con lo que

$$E(\alpha) = \alpha^2 - \zeta - \ln 2\alpha + 1 \quad (4.21)$$

Minimizando 4.21 y evaluando esa expresión en el valor óptimo, se tiene $E = 0.576211\dots$

Los valores obtenidos con estas dos bases simples no están muy alejados del valor reportado por Asturias⁵, quien utilizó una base mucho más

extensa. Sin embargo, es este trabajo, no se utilizarán en sí los valores de energía, sino más bien las expresiones 4.15 y 4.21, como se verá a continuación.

2. El átomo de Berilio.

Como se mencionó anteriormente, según las referencias 4 y 5, el átomo de Berilio en 2-D está formado por dos electrones y un núcleo de carga $+2e$. Esto complica la ecuación de Schrodinger con la inclusión de la energía potencial electrostática interelectrónica, que se escribe como¹⁶:

$$V_{12} = \ln |\vec{z}_{12}| = \ln z_> - \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z_<}{z_>} \frac{e^{il(\theta_n + \theta_m)}}{l} \quad (4.22)$$

en la que $z_>$ y $z_<$ significan z mayor y z menor, respectivamente. Usando nuevamente el argumento de que se trabaja solamente con el estado basal y ya que para este estado no hay dependencia angular⁴, V_{12} se reduce a la forma

$$\overline{V_{12}} = \langle V_{12} \rangle = \langle \ln r_{12} \rangle = \langle \ln r_> \rangle \quad (4.23)$$

Rotulando los dos electrones con los números 1 y 2, se escribe el hamiltoniano del sistema como

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 + \mathbb{Z} \ln z_1 + \mathbb{Z} \ln z_2 - \ln |\vec{z}_{12}| \quad (4.24)$$

o de la forma

$$H = H_1^0 + H_2^0 - \frac{1}{\mathbb{Z}} \ln |\vec{z}_{12}| \quad (4.25)$$

y donde H_1^0 es el hamiltoniano hidrógeno de la forma 4.9 para el electrón número 1 y equivalente significado posee H_2^0 .

2.1 Base gaussiana. Utilizando la expresión $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ y ya que de la ecuación 4.15 se tiene el promedio de H_1^0 y H_2^0 para la base gaussiana normalizada 4.10, falta solo la evaluación del último término de 4.25 para obtener $E(\alpha)$ con esta base. Entonces (ver apéndice A)

$$\langle \phi | \ln z_{12} | \phi \rangle = (4\alpha)^2 \int_0^\infty z_1 dz_1 \int_0^\infty z_2 dz_2 e^{-2\alpha(z_1^2+z_2^2)} \ln z_{12} \quad (4.26)$$

$$= - \left[\frac{\phi}{2} + \frac{1}{2} \ln 2\alpha - \frac{1}{2} \ln 2 \right] \quad (4.27)$$

y con la ayuda de 4.15, se tiene:

$$E(\alpha) = 4z\alpha - \left(z - \frac{1}{2}\right) \ln 2\alpha - \phi \left(z - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2} \ln 2 \quad (4.28)$$

donde las unidades de energía son E/e^2 . La minimización de 4.28 requiere que

$$\alpha = \frac{2z-1}{8z} \quad (4.29)$$

condición con la cual se llega a

$$E_{op}(z) = \frac{2z-1}{z} \left[1 - \ln \left(\frac{2z-1}{4z} \right) - K \right] - \frac{1}{2} \ln 2 \quad (4.30)$$

y para el caso del Berilio, donde $z=2$, se obtiene la cota superior

$$E_{\text{real}} \leq 1.758855\dots \quad (4.31)$$

2.2 Base exponencial. Utilizando de nuevo la base normalizada

4.16 y el hamiltoniano 4.25, hace falta únicamente evaluar el término de interacción electrónica, ya que 4.21 permite conocer el promedio para los otros términos del hamiltoniano mencionado. Entonces (ver apéndice A) :

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \ln x_{12} | \varphi \rangle &= (2\alpha)^2 \int_0^\infty x_1 dx_1 \int_0^\infty x_2 dx_2 e^{-2\alpha x_1} e^{-2\alpha x_2} \ln x_{12} \\ &= \frac{3}{4} + \ln 2 - \phi - \ln 2\alpha \end{aligned} \quad (4.32)$$

y con la ayuda de 4.21, se tiene en unidades E/e^2

$$E(\alpha, Z) = 2Z\alpha^2 - (2Z-1)\ln 2\alpha + 2Z(1-\phi) - \frac{3}{4} - \ln Z + \phi \quad (4.33)$$

que, al ser minimizada, implica

$$\alpha^2 = \frac{2Z-1}{4Z} \quad (4.34)$$

con lo que se llega a

$$E_{\text{op}}(Z) = 3Z - \frac{(2Z-1)}{2} \ln \left(\frac{2Z-1}{Z} \right) - (2Z-1)\phi - \frac{1}{4} - \ln 2 \quad (4.35)$$

expresión que, para $Z=2$, o sea Berilio, da una cota superior de

$$E_{\text{real}} \leq 1.7170246\dots \quad (4.36)$$

Las evaluaciones de todas las integrales presentadas aquí fueron hechas con la ayuda de la referencia ¹³ y, dado lo extenso de su análisis, éste se presenta en el apéndice A. Los valores 4.31 y 4.32 sirvieron de referencia para el trabajo realizado en la siguiente sección.

V. ECUACIONES DE CAMPO AUTO-CONSISTENTE

PARA Be. EN 2-D Y SU SOLUCION.

En esta sección, se utilizan los conceptos de la segunda del primer capítulo, para obtener las ecuaciones de Hartree correspondientes al átomo de berilio bidimensional, y se describe el método utilizado para resolverlas.

1. Ecuaciones de campo auto-consistente para Be.

Sea

$$\Psi(1,2) = \varphi(1) \cdot \varphi(2) \quad (5.1)$$

donde los índices 1 y 2 se refieren a los dos electrones del Be. De 4.25. tenemos, entonces, que la ecuación de Schrödinger para este átomo se escribirá como :

$$\left[H_1^0 + H_2^0 + V_{12} \right] \varphi(1) \varphi(2) = E \varphi(1) \cdot \varphi(2) \quad (5.2)$$

y entonces, las ecuaciones de Hartree para cada electrón, según 2.14, serán de la forma :

$$\left[H_1^0 + \langle \varphi(2) | V_{12} | \varphi(2) \rangle \right] \varphi(1) = E_1 \varphi(1) \quad (5.3)$$

Se han utilizado las convenciones 4.4-4.6 y la simplificación 4.23 por lo que se llega a

$$\langle \varphi_2 | V_{12} | \varphi_2 \rangle = \int_0^{\infty} \varphi_1^2 \ln \frac{1}{z_2} z_2 dz_2 \quad (5.4)$$

Suponiendo z_1 fijo, algo que no afecta en nada, dado que $z_1 = z_2$ y que los subíndices son arbitrarios, y haciendo uso de

$$\varphi(1) = \varphi_1(z_1) \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2\pi}} \quad (5.5)$$

se tiene que 5.4 se puede escribir como :

$$\langle \varphi_2 | V_{12} | \varphi_2 \rangle = \int_0^{z_1} \varphi_2^2 \ln\left(\frac{1}{z_1}\right) z_2 dz_2 + \int_{z_1}^{\infty} \varphi_2^2 \ln\left(\frac{1}{z_2}\right) z_2 dz_2 \quad (5.6)$$

Ahora, sumando y restando la cantidad $\int_{z_1}^{\infty} \varphi_2^2 \ln\left(\frac{1}{z_1}\right) z_2 dz_2$ a la ecuación anterior, esta se transforma en

$$\langle \varphi_2 | V_{12} | \varphi_2 \rangle = \ln\left(\frac{1}{z_1}\right) + \int_{z_1}^{\infty} \varphi_2^2 \ln\left(\frac{1}{z_1}\right) z_2 dz_2 \quad (5.7)$$

$$= -\ln z_1 - \int_{z_1}^{\infty} \varphi_2^2 \ln z_1 \cdot z_2 dz_2 \quad (5.8)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación 5.3 y utilizando el resultado para H_1^0 con $Z=2$ de la ecuación 4.9, se tiene entonces que la parte radial de la función de onda deberá satisfacer las ecuaciones integro-diferenciales acopladas :

$$\left\{ -\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \cdot z \cdot \frac{d}{dz} + \ln z - \int_z^{\infty} z^* \ln\left(\frac{z^*}{z}\right) \varphi_2^2(z^*) dz^* \right\} \varphi_1 = E_1 \varphi_1 \quad (5.9)$$

$$\left\{ -\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \cdot z \cdot \frac{d}{dz} + \ln z - \int_z^{\infty} z^* \ln\left(\frac{z^*}{z}\right) \varphi_1^2(z^*) dz^* \right\} \varphi_2 = E_2 \varphi_2 \quad (5.10)$$

2. Solución de las ecuaciones de Hartree.

Para resolver las ecuaciones 5.9-5.10, se reducen primero a la forma de la ecuación de onda por medio de las transformaciones

$$\varphi_1 = f_1(z) \cdot z^{-1/2} \quad (5.11)$$

$$\varphi_2 = f_2(z) \cdot z^{-1/2} \quad (5.12),$$

con lo cual las mencionadas ecuaciones se reducen a

$$f_1''(z) = \left[\ln z - \frac{1}{4} z^{-1/2} - \int_z^{\infty} \ln\left(\frac{z^*}{z}\right) f_2^2(z^*) dz^* - E_1 \right] f_1 \quad (5.13)$$

con una ecuación idéntica para $f_2(z)$. Debido a que la ecuación 5.13 conlleva acoplamiento con la ecuación para $f_2(z)$ y a que sus coeficientes no son homogéneos, la solución de estas ecuaciones se podrá obtener únicamente por medios numéricos.

Utilizando para el efecto⁸ el algoritmo de Cowell o algoritmo de Noumerov, que indica que para

$$f''(z) = Y(z) \cdot f(z) \quad (5.14)$$

se tiene que

$$f_{n+1} = \left(2 + \frac{5G^2}{6} Y_n\right) f_n / \left(1 - \frac{G^2}{12} Y_{n+1}\right) - \left(1 - \frac{G^2}{12} Y_{n-1}\right) f_{n-1} / \left(1 - \frac{G^2}{12} Y_{n+1}\right) \quad (5.15)$$

donde G es el valor del intervalo $z_{n+1} - z_n$, o sea, de la "rejilla", y los subíndices indican en que valor de z se evalúa cada función. Entonces, para las ecuaciones 5.13, se tendrá

$$Y(z) = \ln z - \frac{1}{4} z^{-1/2} - \int_z^{\infty} \left(\ln \frac{z^*}{z}\right) f_2^2(z^*) dz^* \quad (5.16)$$

con las integrales de esta expresión evaluadas con ayuda del método de Simpson²⁷:

$$I = \frac{h}{3} \left(y_0 + 4 \sum_{2n+1 < m} y_{2n+1} + 2 \sum_{2n < m} y_{2n} + y_m \right) \quad (5.17)$$

entendiéndose por m el número de términos considerados en el proceso, y por h el valor de la "subrejilla", donde en particular se usó $h=G/4$.

De 5.15 y 5.16, se puede ver que el método requiere el conocimiento previo de $f_2(z)$ y de los valores iniciales $f_1(0)$ y $f_1(1)$. De 5.11-5.13, y ya que la función de onda debe ser cuadrática integrable, se tienen las condiciones de frontera :

$$f_1(0) = 0 \quad (5.18)$$

$$f_2(\infty) = 0 \quad (5.19)$$

Pero esta información no es muy útil debido a que, en $z=0$, el argumento de 5.16 diverge y $z=\infty$ no es calculable.

Por lo tanto, se escogió un valor inicial de $z_0=1.0 \times 10^{-12}$ y se tomó la base exponencial como primera tentativa para $f_2(z)$ (por el método de integración utilizado, no existía diferencia entre las dos bases posibles); y también para los valores iniciales $f_1(0)$ y $f_1(1)$. Partiendo de estas suposiciones, se generó $f_1(z)$, teniendo cuidado en cumplir con las condiciones 5.18-5.19. Esto supuso ajustes en los valores iniciales.

Habiendo obtenido esta primera función, se procedió a generar $f_2(z)$, para lo cual fue necesario, primero interpolar $f_1(z)$ debido a que se generó para una rejilla de tamaño G , y luego normalizarla. Este proceso de mutuo mejoramiento se repitió hasta el punto en que ya no hubo mejora apreciable en los valores obtenidos, o sea, en el límite de resolución propio a la máquina y a los métodos utilizados. Los valores utilizados en las iteraciones realizadas se presentan en el cuadro 5.1.

Con estos datos, se modificó el programa principal (apéndice B) para calcular el valor de la expresión 5.4, lo que dio como resultado el valor:

$$\langle \Psi | V_b | \Psi \rangle = -0.3312178315879365 \pm 0.104 E-13 \quad (5.20)$$

Entonces, utilizando la ecuación 2.20, se tiene que la energía para el átomo de berilio en 2-D es de:

$$E = 0.9822576780953 \pm 0.312 E-13 \quad (5.21)$$

Los programas utilizados para resolver este problema fueron escritos en lenguaje Fortran IV, en una máquina Hewlett-Packard 3000, cuya arquitectura permitió el uso de un máximo de 2000 puntos en la resolución de las

Cuadro 5.1

Valores utilizados en las iteraciones
hechas con el programa TESIS

No.	$z(0)$ ($\times 10E-20$)	$z(4)$	E_1
1	0.0167361672428941	0.1112370730284201	0.3255039728147500
2	0.1695463135762179	0.1556477331074102	0.3255198215280080
3	0.1917651512031400	0.1618456149297621	0.3255198754449200
4	0.1942477794857225	0.1625338118622930	0.3255198927467800
5	0.1945150965261507	0.1626078572571679	0.3255198927505225
6	0.1945437303365836	0.1626157871845273	0.3255199087056500
7	0.1945467915740602	0.1626166349327414	0.3255199099813250
8	0.1945471189848685	0.1626167256097766	0.3255199099817340
9	0.1945471167538322	0.1626167237449126	0.3255199343084780
10	0.1945471171054693	0.1626167224038836	0.3255199268477151
11	0.1945471171054693	0.1626167224038837	0.3255199285173051
12	0.1945471171054693	0.1626167224038837	0.3255199282063063
13	0.1945471201249398	0.1626167249277782	0.3255199282621954
14	0.1945471201214864	0.1626167249248916	0.3255199282521926
15	0.1945471201214864	0.1626167249248916	0.3255199282539900
16	0.1945471201219941	0.1626167249253159	0.3255199282536714
17	0.1945471201220102	0.1626167249253296	0.3255199282537180
18	0.1945471201220090	0.1626167249253286	0.3255199282537250
19	0.1945471201220088	0.1626167249253284	0.3255199282537168
20	0.1945471201220079	0.1626167249253276	0.3255199282537000
21	0.1945471120122009	0.1626167249253293	0.3255199282537350
22	0.1945471120122009	0.1626167249253293	0.3255199282537168

Tomando en cuenta los últimos seis valores de E_1 solamente, se tiene (ver texto) :

$$E_1 = 0.3255199282537 \pm 0.104E-13$$

ecuaciones diferenciales, las cuales fueron resueltas en el intervalo

$$1 \cdot E^{-12} \leq Z \leq 15 \quad (5.22)$$

lo que implica "rejillas" de

$$\begin{aligned} G &= 0.2998500749624987 \quad E^{-1} \\ h &= G/4 \end{aligned} \quad (5.23)$$

El rango de incertidumbre fue calculado tomando en cuenta solamente las últimas seis iteraciones, ya que, a partir de ellas, el valor de la energía empezó a oscilar, por lo cual no fue posible alcanzar la condición de consistencia interna, aunque las variaciones en los parámetros fuesen ya mínimas.

Un desarrollo alternativo al aquí presentado (propuesto por Sergio R. Aragón) consiste en multiplicar la ecuación 5.2 por la izquierda por la función $\beta(2)$ e integrar sobre las coordenadas de ese electrón, lo que arroja como resultado una ecuación formalmente idéntica a la ecuación 5.3, pero ahora con

$$E_1 = E - E_0 \quad (5.24),$$

donde

$$E_0 = \langle \psi | H_1 | \psi \rangle \quad (5.25),$$

Utilizando el valor para E_0 reportado por Asturias⁵, se tiene entonces

$$E = 1.37880 \pm 6E^{-5}. \quad (5.26),$$

energía que también se encuentra por debajo de las cotas superiores calculadas. El rango de incertidumbre está definido por el valor de E_0 utilizado.

VI. CONCLUSIONES.

Haciendo un resumen de lo presentado, vemos que, primero, se dedujo la estructura de la electrodinámica en 2-D, de lo cual se obtuvo la información referente al potencial coulombico en dos dimensiones, lo que permitió plantear las ecuaciones de Schrödinger para los átomos de hidrógeno y berilio en ese universo. Estas ecuaciones fueron resueltas por métodos variacionales, obteniéndose así cotas superiores para los valores de energía del estado basal de los átomos citados. Luego, se planteó la ecuación de Schroedinger para el átomo de berilio en 2-D, bajo las hipótesis del método de Hartree, y se resolvieron numéricamente las ecuaciones resultantes. Se presentó, al final, un desarrollo alternativo a las ecuaciones de Hartree, propuesto por Sergio R. Aragón.

Los resultados obtenidos con estos dos métodos están dentro de los límites impuestos por los cálculos variacionales pero, como se vio en la primera sección del capítulo 2, el método de Hartree es el mejor desde el punto de vista variacional, aunque conlleva un poco más de trabajo numérico, en este caso. Por lo tanto, el valor de energía obtenido con este método debe ser considerado como el mejor valor de energía para el átomo de berilio en su estado basal en un universo bidimensional. Trabajos adicionales en esta área podrían consistir en cálculos para estados excitados o en una estimación de la energía de correlación .

Finalmente, puede decirse (a pesar de que no existe un universo bidimensional) que el estudio de este tema es importante, dada la comprensión

que nos proporciona sobre nuestro mundo tridimensional y de las leyes que lo gobiernan.

VII. BIBLIOGRAFIA

1. Abraham, Ralph, Jerrold E. Marsden & Tudor Ratiu, Manifolds, Tensor Analysis and Applications (Adisson-Wesley, New York, 1980)
2. Acton, S., Forman, Numerical Methods that work (Harper & Row, New York, 1970)
3. Aragón, S.R. y F. Asturias, Am. J.Phys., 53, 9 (1985)
4. Aragón, S.R. en A Symposium on Two-Dimensional Science and Technology, editado por A.K. Dewdney (University of Western Ontario, Canada, 1981)
5. Asturias, F., El Atomo de Hidrogeno y la Tabla Periódica de los Elementos en Dos Dimensiones Espaciales, (Universidad del Valle de Guatemala, 1984)
6. Carnahan, Brice, H.A. Luther & James O. Wilkes, Applied Numerical Methods (John Wiley & Sons, New York, 1969)
7. Condon, E.U. and Odabasi, Atomic Structure (Cambridge University Press, Cambridge, 1980)
8. Dahlquist, Germund & Ake Bjorck, Numerical Methods (Prentice-Hall, New York, 1974)
9. Dewdney, A.K., Editor, A Symposium on Two-Dimensional Science and Technology (University of Western Ontario, Canada, 1981)
10. Eisberg, Robert M, Fundamentos de Física Moderna (Editorial Limusa, Mexico, 1978)
11. Epstein, S.T., The Variation Method in Quantum Chemistry (Academic Press, New York, 1974)
12. Goodisman, J., Diatomic Interaction Potential Theory (Academic Press, New York, 1973)
13. Gradshtein, I.S. and I.M. Ryzhik, Table of Integrals, Series and Products 4th ed. (Academic Press, New York, 1965)
14. Hartree, D.R., Proc.Camb.Phil.Soc., 24, 111 (1928)

15. Jackson, Joh David, Classical Electrodynamics (John Wiley & Sons, New York, 1962)
16. Kellog, D., Foundations of Potential Theory (Dover, New York, 1952)
17. Landau, L.D. & E.M. Lifshitz, The Classical Theory of Fields (Pergamon Press, New York, 1971)
18. Lapidus, R., Am.J.Phys., 50, 2 (1982)
19. Lawden, Derek, An Introduction to Tensor Calculus and Relativity (Science Paperbacks & Methuen, Londres, 1967)
20. Levine, Ira N., Quantum Chemistry (Allym & Bacon, New York, 1983)
21. March, N.H., Self-Consistent Fields in Atoms (Pergamon Press, New York, 1975)
22. Messiah, Albert, Quantum Mechanics (John Wiley & Sons, New York, 1968)
23. Merzbacher, E., Quantum Mechanics (John Wiley & Sons, New York, 1980)
24. Misner, Charles, Kip S. Thorne & John A. Wheeler, Gravitation (W.H. Freeman, Sn. Francisco, 1973)
25. Pilar, F.L., Elementary Quantum Chemistry (McGraw-Hill, New York, 1968)
26. Slater, J.C., Phys. Rev., 35, 210 (1930)
27. Stanton, Ralph, Numerical Methods for Science and Engineering (Prentice Hall of India, Nueva Delhi, 1967)
28. Schiff, Leonard I., Quantum Mechanics (McGraw-Hill, New York, 1949)

APENDICE A

Evaluación de las integrales presentadas
en los cálculos variacionales del
capítulo IV.

Se presenta, a continuación, la evaluación de las integrales cuyos resultados fueron utilizados en el capítulo IV. Todas las evaluaciones se realizaron con la ayuda de la referencia 13, previa a las transformaciones necesarias. Se marca con un asterisco cada paso del proceso en que se utilizaron resultados dados por la referencia citada.

$$4.12: \quad a = 4\alpha \int_0^{\infty} 4\alpha e^{-\alpha r^2} r dr = * 4\alpha.$$

$$4.13: \quad b = -16\alpha^3 \int_0^{\infty} r^3 e^{-2\alpha r^2} dr \quad , \quad y = \sqrt{2\alpha} r$$

$$= -4\alpha \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy = * -2\alpha.$$

$$4.14: \quad c = 4\alpha \int_0^{\infty} \ln r \cdot e^{-4\alpha r^2} \cdot r dr = 2 \int_0^{\infty} y \ln \frac{y}{\sqrt{2\alpha}} \cdot e^{-y^2} dy$$

$$= 2 \left[\int_0^{\infty} y \ln y e^{-y^2} dy - \ln \sqrt{2\alpha} \int_0^{\infty} y e^{-y^2} dy \right]$$

$$= -\frac{2}{2} \ln \sqrt{2\alpha} + 2 \cdot \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \ln \sqrt{x} \cdot e^{-x} dx$$

$$= -\frac{1}{2} \ln 2\alpha + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \ln x e^{-x} dx = * -\frac{1}{2} \ln 2\alpha - \frac{1}{2} \phi.$$

$$4.18: \quad a = 2\alpha (2\alpha^2) \int_0^{\infty} r \cdot \frac{e^{-2\alpha r}}{r} dr = 2\alpha^2 \int_0^{\infty} e^{-x} dx = 2\alpha^2.$$

\swarrow
 $x = 2\alpha r$
 \downarrow

$$4.19: \quad b = (2\alpha)(-2\alpha^3) \int_0^{\infty} r e^{-2\alpha r} dr = -\alpha^2 \underbrace{\int_0^{\infty} x e^{-x} dx}_{*1} = -\alpha^2.$$

$$4.20: \quad c = (2\alpha)^2 \int_0^{\infty} r e^{-2\alpha r} \ln r \cdot dr \quad , \quad y = 2\alpha r$$

$$= \int_0^{\infty} (2\alpha r) e^{-2\alpha r} \cdot \ln r \cdot 2\alpha dr = \int_0^{\infty} y e^{-y} \cdot \ln \frac{y}{2\alpha} dy$$

$$= \int_0^{\infty} y e^{-y} \ln y dy - \ln 2\alpha \underbrace{\int_0^{\infty} y e^{-y} dy}_{*1}$$

$$= *1 - \phi - \ln 2\alpha.$$

$$4.26: \quad \langle \varphi | \ln r_{12} | \varphi \rangle = (4\alpha)^2 \int_0^{\infty} r_1 dr_1 \int_0^{\infty} r_2 dr_2 e^{-2\alpha r_1^2} e^{-2\alpha r_2^2} \ln r_{12}$$

$$= 4 \int_0^{\infty} y_1 dy_1 \int_0^{\infty} y_2 dy_2 e^{-y_1^2} e^{-y_2^2} \ln \left(\frac{y_2}{\sqrt{2\alpha}} \right) \quad , \quad y_i^2 = 2\alpha r_i^2$$

$$= -\frac{1}{2} \ln 2\alpha + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} e^{-x_1} dx_1 \int_0^{\infty} dx_2 e^{-x_2} \ln x_2 \quad , \quad x_i = y_i^2$$

$$= -\frac{\ln 2\alpha}{2} + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} e^{-x_1} dx_1 \left[\underbrace{\int_0^{\mu} dt e^{-t} \ln u}_{\text{A}} + \underbrace{\int_{\mu}^{\infty} dt e^{-t} \ln t}_{\text{B}} \right]$$

$, \mu = x_1 = x.$

$$A_\mu = \int_0^\mu dt e^{-t} \ln \mu = \ln \mu \int_0^\mu e^{-t} dt = \ln \mu (1 - e^{-\mu}).$$

$$\begin{aligned} B_\mu &= \int_\mu^\infty \ln t e^{-t} dt = -e^{-y} \ln y \Big|_{y=\mu}^\infty + \int_\mu^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt \\ &= e^{-\mu} \ln \mu - \text{Ei}(-\mu). \end{aligned}$$

\therefore

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \ln r_{12} | \varphi \rangle &= -\frac{\ln 2\alpha}{2} + \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-x} dx [A_x + B_x] \\ &= -\frac{1}{2} \ln 2\alpha + \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-x} dx [\ln x (1 - e^{-x}) + e^{-x} (\ln x - \text{Ei}(-x))] \\ &= -\frac{\ln 2\alpha}{2} + \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-x} (\ln x - \text{Ei}(-x)) dx \\ &= -\frac{\ln 2\alpha}{2} + \frac{1}{2} \int_0^\infty \ln x \cdot e^{-x} dx - \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-x} \text{Ei}(-x) dx \\ &= -\frac{\ln 2\alpha}{2} - \frac{0}{2} + \frac{\ln 2}{2} = -\left[\frac{0}{2} + \frac{1}{2} (\ln 2\alpha - \frac{1}{2} \ln 2) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 4.32: \quad \langle \varphi | \ln r_{12} | \varphi \rangle &= (2\alpha)^2 \int_0^\infty r_1 dr_1 \int_0^\infty r_2 dr_2 e^{-2\alpha r_1} e^{-2\alpha r_2} \ln r_{12} \\ &= \int_0^\infty y_1 dy_1 \int_0^\infty y_2 dy_2 e^{-y_1} e^{-y_2} \ln \left(\frac{y_2}{2\alpha} \right), \quad y_k = 2\alpha r_k \\ &= -\ln 2\alpha + \underbrace{\int_0^\infty y_1 e^{-y_1} dy_1 \int_0^{y_1} y_2 e^{-y_2} \ln y_1 dy_2}_{C_{y_1}} + \underbrace{\int_0^\infty y_2 e^{-y_2} \ln y_2 dy_2}_{D_{y_1}} \end{aligned}$$

$$C_{y_1} = \int_0^{y_1} y_2 e^{-y_2} \ln y_1 dy_2 = \ln y_1 \cdot \int_0^{y_1} y_2 e^{-y_2} dy_2$$

$$= -\ln y_1 \cdot e^{-x} (x+1) \Big|_{x=0}^{y_1} = \ln y_1 (1 - e^{-y_1} (y_1 + 1)).$$

$$D_{y_1} = \int_{y_1}^{\infty} y_2 e^{-y_2} \ln y_2 dy_2 = -\ln y_2 e^{-y_2} (y_2 + 1) \Big|_{y_1}^{\infty} + \int_{y_1}^{\infty} e^{-y} \frac{y+1}{y} dy$$

$$= \ln y_1 e^{-y_1} (y_1 + 1) + e^{-y_1} + \int_{y_1}^{\infty} \frac{e^{-y}}{y} dy$$

$$=^* \ln y_1 e^{-y_1} (y_1 + 1) + e^{-y_1} - \text{Ei}(-y_1).$$

$$\Rightarrow \langle \varphi | \ln r_{12} | \varphi \rangle = -\ln 2\alpha + \int_0^{\infty} y_1 e^{-y_1} \left[\underbrace{-\ln y_1 e^{-y_1} (y_1 + 1)}_{\text{①}} + \underbrace{\ln y_1}_{\text{②}} + \underbrace{\ln y_1 e^{-y_1} (y_1 + 1) + e^{-y_1} - \text{Ei}(-y_1)}_{\text{③}} \right] dy_1$$

$$= -\ln 2\alpha + \underbrace{\int_0^{\infty} y_1 e^{-y_1} \ln y_1 dy_1}_{\text{①}} + \underbrace{\int_0^{\infty} y_1 e^{-2y_1} dy_1}_{\text{②}} - \underbrace{\int_0^{\infty} y_1 e^{-y_1} \text{Ei}(-y_1) dy_1}_{\text{③}}$$

$$\text{①: } \int_0^{\infty} y_1 e^{-y_1} \ln y_1 dy_1 =^* 1 - \zeta.$$

$$\text{②: } \int_0^{\infty} x e^{-2x} dx = \frac{1}{4} \int_0^{\infty} 2x e^{-2x} \cdot 2 dx = \frac{1}{4} \int_0^{\infty} \underbrace{u e^{-u}}_{*1} du = \frac{1}{4}.$$

$$\text{③: } \int_0^{\infty} t e^t \text{Ei}(-t) dt =^* \frac{1}{2} - \ln 2.$$

$$\Rightarrow \langle \varphi | \ln r_{12} | \varphi \rangle = -\ln 2\alpha + (1 - \zeta) + \left(\frac{1}{4}\right) - \left(\frac{1}{2} - \ln 2\right)$$

$$= \frac{3}{4} + \ln 2 - \zeta - \ln 2\alpha.$$

APENDICE B

Resolución de las ecuaciones de Hartree.

El programa TESIS resuelve las ecuaciones integro-diferenciales, - acopladas 5.9-5.10, para 2000 puntos en un intervalo de $1.00E-12$ Z 15 . - Realiza 500 integrales por el método de Simpson de la expresión 5.4, variando los puntos iniciales en pasos de $G=0.2998500749624987 E-01$. Es - tos datos son almacenados en el archivo "Datos", del cual, cada vez que se empieza a correr este programa, se toman los datos de la interacción - anterior.

Luego, el programa pide los valores iniciales $f_2(1.00 E-12)$, $f_2(4)$ y EP y, a partir de todos estos datos, genera $f_2(z)$, por medio del algoritmo de Noumerov. La función es presentada en pantalla conforme es generada y luego se ofrecen las opciones de variar parámetros, parar, em - pezar de nuevo todo el proceso e iterar. En caso de la última opción, - se interpola $f_2(z)$, por el método de Stirling, y luego se compara la fun - ción generada con la función de la iteración anterior y, si no son dife - rentes en un rango mayor al 0.05%, imprime los datos utilizados como re - sultados finales. En caso contrario, normaliza $f_2(z)$ y procede al cálcu - lo de las integrales mencionadas ahora con la nueva función.

Este proceso se repite hasta que se obtiene el grado de autoconsis - tencia deseado.



```

1  SCOTROL NOSOURCE,USLINIT
2      PROGRAM TESIS
3      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
4      DOUBLE PRECISION F1(2000),F2(2000),RI(500),SI(501),YI(500),
5      >E(166)
6      SYSTEM INTRINSIC DLOG,DEXP
7  C      *****
8  C      **      INICIALIZACION DE VARIABLES      **
9  C      *****
10     CN=1.000
11     1  DO 2 KQ=1,2000
12         F2(KQ)=0.000
13     2  F1(KQ)=0.000
14         DO 3 KQ=1,500
15             RI(KQ)=0.000
16             SI(KQ)=0.000
17     3  YI(KQ)=0.00
18             SI(501)=0.000
19             EP=0.000
20             DOH=0.000
21             REWIND 7
22             A=1.0D-12
23             B=15.0D0
24             N=100
25             H=(B-A)/2001
26             G=H*4.000
27  C      *****
28  C      **  LECTURA DE DATOS DE LA 1A. FUNCION A PARTIR DE  **
29  C      **  ARCHIVO AUXILIAR                                **
30  C      *****
31     DISPLAY"LEYENDO DATOS..."
32         DO 4 IM=1,500
33     4  READ(7,*)SI(IM)
34         GO TO 8
35  C      *****
36  C      **  EVALUACION DE INTEGRALES POR EL METODO DE SIMPSON **
37  C      *****
38     5  DISPLAY ("VALORES DE INTEGRALES : ")
39         REWIND 7
40         DO 7 J=1,500
41             K=4*(J-1)
42             S1=0.000
43             S2=0.000
44             DO 6 KP=K+1,1999,2
45                 T1=F1(KP)**2*DLOG((KP*H+A)/(K*H+A))
46                 S1=S1+T1
47                 T2=F1(KP+1)**2*DLOG((KP*H+H+A)/(K*H+A))
48                 S2=S2+T2
49     6  CONTINUE
50         SI(J)=H*(4*S1+2*S2-F1(2000)**2*DLOG(B/(K*H+A)))/3
51         WRITE(7,*)SI(J)
52         DISPLAY SI(J)
53     7  CONTINUE
54  C      *****
55  C      **  CALCULO DE F2(Z) POR MEDIO DEL ALGORITMO DE NOUMEROV **
56  C      *****
57     8  DISPLAY "INGRESE F2,F2(4) Y Ep: "
58         ACCEPT F21,F2(4),EP
59         DO 9 K=1,500
60             DOH=K*G+A

```

```

YI(K)=DLOG(DOB)-SI(K+1)-EP-0.2500/(DOB**2)
9 CONTINUE
YI1=DLOG(A)-0.25/(A**2)-SI(1)-EP
F2(8)=(((2+5*YI(1)*G**2/6)*F2(4))-(1-YI1*G**2/12)*F21)/
>(1-YI(2)*G**2/12)
DISPLAY"F2(8)= ",F2(8)
DO 10 K4=2,499
K8=4*K4
RT=(1-YI(K4+1)*G**2/12)
F2(K8+4)=(((2+5*YI(K4)*G**2/6)*F2(K8))-(1-G**2*YI(K4-1)/12)
>*F2(K8-4))/RT
DISPLAY F2(K8+4)
IF(DABS(F2(K8+4)).GE.1000.0D10)GO TO 22
10 CONTINUE
DISPLAY F21,F2(4),EP
DISPLAY "ITERAMOS? NO=2 "
ACCEPT R5
IF(R5.EQ.2)GO TO 22
C *****
C ** INTERPOLACION DE F2(Z) CON EL ALGORITMO DE STIRLING **
C *****
DO 11 KU=1,7
F2(KU)=F2(4)+H*(KU-4.0D0)*(F2(8)-F21)/(2*G)+
>H**2*(KU-4)**2*((F2(8)-2*F2(4)+F21)/(2*G**2))
11 CONTINUE
DO 13 KT=2,250
KI=4*(2*KT-1)
DO 12 KK=KI-3,KI+3
F2(KK)=F2(KI)+H*(KK-KI)*(F2(KI+4)-F2(KI-4))/(2*G)+
>H**2*(KK-KI)**2*((F2(KI+4)-2*F2(KI)+F2(KI-4))/(2*G**2))
12 CONTINUE
13 CONTINUE
C *****
C ** COMPARACION DE FUNCIONES **
C *****
DO 14 KL=1,20*N
IF(DABS(F1(KL)-F2(KL)).GT.0.0005*F1(KL))GO TO 15
14 CONTINUE
GO TO 23
C *****
C ** NORMALIZACION DE F2(Z) **
C *****
15 S3=0.0D0
S4=0.0D0
DO 16 NK=1,1999,2
T3=F2(NK)**2
S3=S3+T3
T4=F2(NK+1)**2
S4=S4+T4
16 CONTINUE
CN=H*(F21**2+4*S3+2*S4-F2(2000)**2)/3
RCN=DSQRT(CN)
DO 17 JK=1,2000
F1(JK)=F2(JK)/RCN
C *****
C ** CALCULO DE VALORES INICIALES CONSIDERANDO **
C ** NORMALIZACION **
C *****
DO 18 KQ=3,500
YI(KQ)=YI(KQ)+FP

```

```

1      G2=G**2
2      DO 19 KW=1,166
3      E(KW)=(-F1(12*KW+8)*(12-YI(3*KW+2)*G2)+F1(12*KW+4)*(24+10*G2*
4      >YI(3*KW+1))-F1(12*KW)*(12-G2*YI(3*KW)))/(G2*(F1(12*KW+8)+
5      >10*F1(12*KW+4)+F1(12*KW)))
6      19  CONTINUE
7      ES=0.0D0
8      EA=0.0D0
9      DO 20 JA=1,166
0      ES=ES+E(JA)
1      20  CONTINUE
2      EM=ES/166
3      DO 21 KR=1,166
4      EA=EA+(EM-E(KR))**2
5      21  CONTINUE
6      RO=DSQRT(EA/166)
7      DISPLAY "VALORES YA NORMALIZADOS : "
8      DISPLAY "F1(0)= ",F21/RCN
9      DISPLAY "F1(4)= ",F1(4)
0      DISPLAY "ENERGIA = ",EM,"+/- ",RO
1      GO TO 5
2      C *****
3      C ** OPCIONES **
4      C *****
5      22  DISPLAY " VARIAMOS PARAMETROS = 3 "
6      ACCEPT R2
7      IF(R2.EQ.3)GO TO 8
8      DISPLAY " PARAMOS = 2 "
9      ACCEPT R4
0      IF(R4.EQ.2)STOP
1      GO TO 1
2      C *****
3      C ** IMPRESION DEL RESULTADO FINAL **
4      C *****
5      23  DO 25 KF=1,20*N
6      WRITE(6,24)F2(KF)
7      24  FORMAT(F5.5)
8      25  CONTINUE
9      26  WRITE(6,27)EP
0      27  FORMAT(" ESTA ES SU FUNCION, CON EP= ",F5.5)
1      STOP
2      END

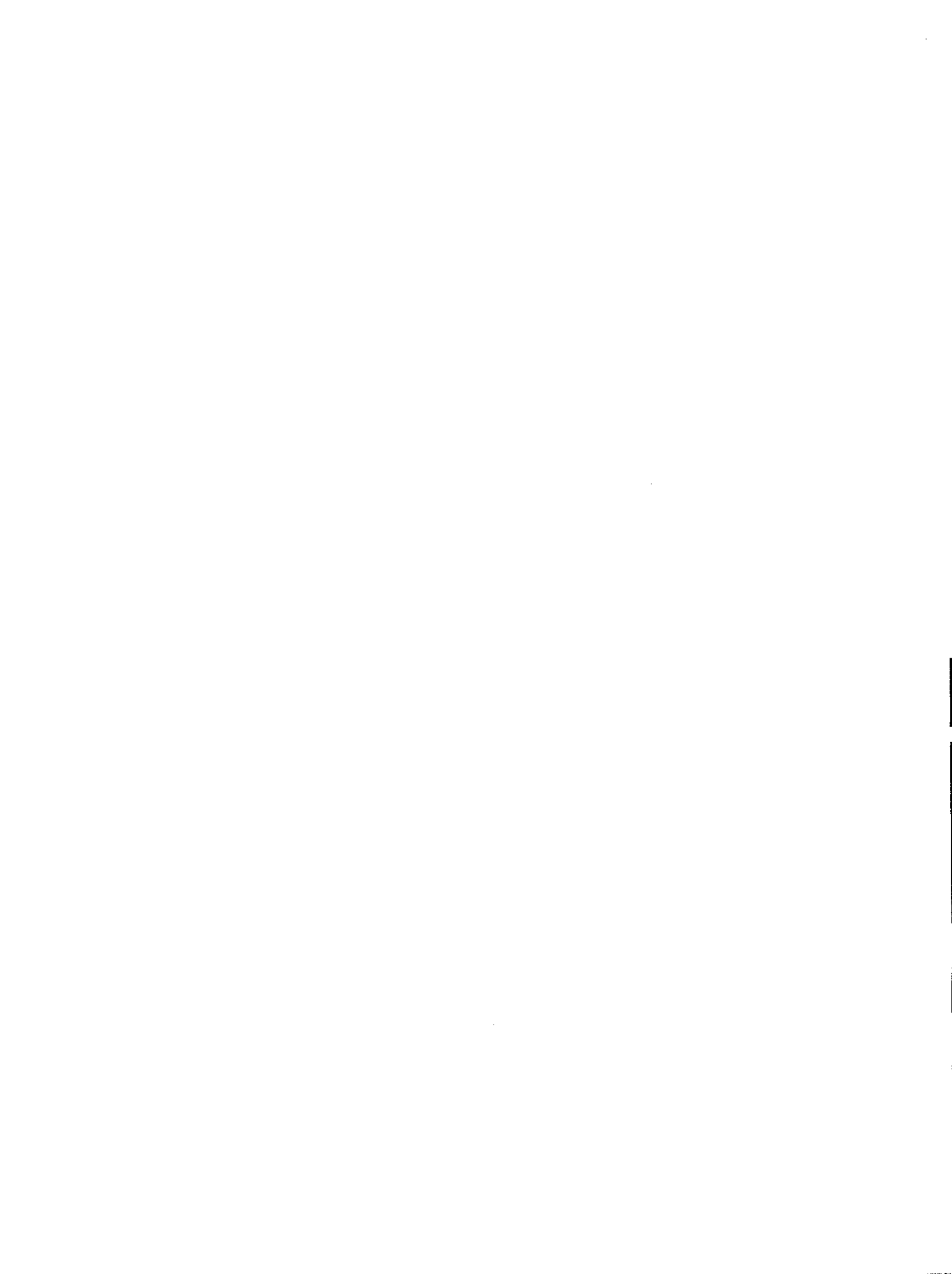
```



APENDICE C

Evaluación del promedio sobre todo el espacio del potencial de interacción

El programa TESIS1 evalúa la expresión $\langle \Psi | V_{12} | \Psi \rangle$, con base en la información que lee del archivo auxiliar Datos, y a valores iniciales suministrados por el operador de acuerdo con la última iteración hecha con el programa tesis, donde se supone que se ha alcanzado ya la condición de consistencia interna. La expresión mencionada es promediada sobre todo el espacio, por el método de Simpson y el resultado final se presenta en pantalla.



```

1 $CONTROL NOSOURCE,USLINIT
2 PROGRAM TESIS1
3 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
4 DOUBLE PRECISION F2(2000),RI(500),SI(501),YI(500),
5 >E(166)
6 SYSTEM INTRINSIC DLOG,DEXP
7 C *****
8 C ** INICIALIZACION DE VARIABLES **
9 C *****
10 CN=1.000
11 1 DO 2 KQ=1,2000
12 2 F2(KQ)=0.000
13 DO 3 KQ=1,500
14 RI(KQ)=0.000
15 SI(KQ)=0.000
16 3 YI(KQ)=0.00
17 SI(501)=0.000
18 EP=0.000
19 DOB=0.000
20 REWIND 7
21 A=1.00-12
22 B=15.000
23 N=100
24 H=(B-A)/2001
25 G=H*4.000
26 C *****
27 C ** LECTURA DE DATOS DE LA ULTIMA FUNCION **
28 C *****
29 DISPLAY "LEYENDO DATOS FINALES..."
30 DO 4 IM=1,500
31 4 READ(7,*)SI(IM)
32 C *****
33 C ** CALCULO DE F2(Z) CON EL ALGORITMO DE NDUMEROV **
34 C *****
35 DISPLAY "INGRESE F2,F2(4) Y EP: "
36 ACCEPT F21,F2(4),EP
37 DO 5 K=1,500
38 DOB=K*G+A
39 YI(K)=DLOG(DOB)-SI(K+1)-EP-0.2500/(DOB**2)
40 5 CONTINUE
41 YI1=DLOG(A)-0.25/(A**2)-SI(1)-EP
42 F2(8)=(((2+5*YI(1)*G**2/6)*F2(4))-(1-YI1*G**2/12)*F21)/
43 >(1-YI(2)*G**2/12)
44 DISPLAY"F2(8)= ",F2(8)
45 DO 6 K4=2,499
46 K8=4*K4
47 RT=(1-YI(K4+1)*G**2/12)
48 F2(K8+4)=(((2+5*YI(K4)*G**2/6)*F2(K8))-(1-G**2*YI(K4-1)/12)
49 >*F2(K8-4))/RT
50 DISPLAY F2(K8+4)
51 6 CONTINUE
52 C *****
53 C ** CALCULO DEL PROMEDIO DEL POTENCIAL DE INTERACCION **
54 C ** EN TODO EL ESPACIO **
55 C *****
56 S3=0.000
57 S4=0.000
58 DO 7 K=1,497,2
59 T1=F2(4*K)**2*(-DLOG(A+K*G)-SI(K+1))
60 S3=S3+T1

```

```
7 T2=F2(4*K+4)**2*(-DLOG(A+K*G+G)-SI(K+2))
S4=S4+T2
CONTINUE
TI=F21**2*(-DLOG(A)-SI(1))
TF=F2(2000)**2*(-DLOG(B)-SI(500))
SS=G*(TI+4*S3+2*S4+TF)/3
DISPLAY "POTENCIAL DE INTERACCION PROMEDIADO= ",SS
STOP
END
```

APENDICE D

Evaluación del potencial de interacción promediado sobre la primera función

El programa SIMPSON tiene como función la evaluación de la expresión 5.4 con la función inicial propuesta, que fue la base gaussiana normalizada 4.10. La expresión citada es evaluada para 500 puntos, y las evaluaciones son almacenadas en un archivo auxiliar llamado Datos, y del cual el programa TESIS tomara los valores iniciales para la primera iteración. Todas las integrales realizadas por el presente programa se hicieron con arreglo al método de Simpson.

```

1  SCONTROL NOSOURCE
2  PROGRAM SIMPSON
3  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,0-2)
4  DOUBLE PRECISION F(2000)
5  SYSTEM INTRINSIC DLOG,DEXP
6  DISPLAY "INICION DE INT. = "
7  ACCEPT A
8  DISPLAY "FINAL DE INTEGRACION = "
9  ACCEPT B
10 H=(B-A)/2001
11 X=A+H
12 DO 10 I=1,2000
13 F(I)=0.7500*X*DEXP(-0.37500*X**2)
14 X=X+H
15 10 CONTINUE
16 DO 30 I=1,500
17 S1=0
18 S2=0
19 K=4*(I-1)
20 DO 20 J=K+1,1999,2
21 S1=S1+4*F(J)*DLOG((J*H+A)/(K*H+A))
22 S2=S2+2*F(J+1)*DLOG((J*H+H+A)/(K*H+A))
23 20 CONTINUE
24 R=H*(S1+S2-F(2000)*DLOG(B/(K*H+A)))/3
25 WRITE(7,*)R
26 DISPLAY I
27 30 CONTINUE
28 STOP
29 END

```