

. ITZHAK RODITI

APLICAÇÃO DO FORMALISMO HIPERESFÉRICO AO ESTUDO DOS NÍVEIS DE
ENERGIA DE SISTEMAS A TRÊS CORPOS EM INTERAÇÃO COULOMBIANA

Tese de

MESTRADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro

-1979-

RESUMO

Apresentam-se os resultados da aplicação do formalismo hiperesférico no cálculo dos estados fundamentais dos íons H^{-} , $(e^{-}e^{+}e^{-})$ e do átomo de He. Mostra-se que a convergência dos valores é lenta, como foi encontrado nas aplicações em Física Nuclear. Isto obriga ao cálculo de elementos de matriz do potencial até ordens altas, o que foi realizado com o programa SCHOONSCHIP de cálculo algébrico. Ainda assim, se faz necessário o uso de métodos de aceleração de convergência, que melhoram notavelmente os resultados da aplicação direta do método.

S U M Á R I O

	<u>Pág.</u>
AGRADECIMENTO	iii
RESUMO	iv
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	viii
<u>CAPÍTULO 1</u> - INTRODUÇÃO	1
<u>CAPÍTULO 2</u> - MÉTODO DOS HARMÔNICOS HIPERESFÉRICOS	5
2.1 - O Problema de Dois Corpos e Sua Generalização. Harmôni- cos Hiperesféricos	5
2.2 - Harmônicos-k para Três Corpos	15
2.3 - A Solução do Sistema de Equações Acopladas	19
<u>CAPÍTULO 3</u> - ELEMENTOS DE MATRIZ DO POTENCIAL PARA O PROBLEMA COULOM- BIANO DE TRÊS CORPOS	27
3.1 - O Potencial nas Novas Coordenadas	27
3.2 - Os Elementos de Matriz	32
3.3 - Cálculo Efetivo dos $V_{k\nu, k'\nu'}$	36
<u>CAPÍTULO 4</u> - SISTEMAS COULOMBIAOS DE TRÊS CORPOS	46
<u>CAPÍTULO 5</u> - RESULTADOS E DISCUSSÕES	51
5.1 - Autovalores e Autovetores	51
5.2 - Convergência em Função de k	57
<u>CAPÍTULO 6</u> - CONCLUSÃO	66

<u>APENDICE A</u> - MÉTODOS DE EXTRAPOLAÇÃO	68
A.1- Aproximantes de Padê Pontuais	68
A.2- Método de Extrapolação de Aitkên	69
<u>APENDICE B</u> - TABELAS DE ELEMENTOS DE MATRIZ	73
<u>BIBLIOGRAFIA</u>	77

LISTA DE FIGURAS

<u>Fig.</u>	<u>Pág.</u>
5.1 - Gráfico da onda parcial χ_{00} do átomo de He calculada com $k = 10$ e multiplicada por $\rho^{5/2}$	55
5.2 - Retas utilizadas para a extrapolação dos valores da energia de e^+e^-	63
A.1 - Retas de extrapolação do método de Aitken	70

LISTA DE TABELAS

<u>Tab.</u>	<u>Pág.</u>
3.1 - Valores dos índices e expressões dos elementos de matriz	37
3.2 - Integração em λ	39
3.3 - SUM equivale a $V_{10,1;0,0}$	40
3.4 - Colocam-se os Polinômios de Jacobi	41
3.5 - Saída de SUM após a substituição da Tab. 3.4	42
3.6 - Polinômios de Jacobi	42
3.7 - Saída após colocação da forma explícita dos Polinômios de Jacobi	42
3.8 - Substituição para a integração em A	43
3.9 - Resultado da integração em A	43
3.10 - Substituição dos valores numéricos	44
3.11 - Valores $A_{101}^{k'v'}$ para $k' = 0,2,4,6,8$	44
4.1 - Valores da energia fundamental, usando o princípio de incerteza e experimental de H^- , He e Li^+	48
4.2 - Valores da energia do estado fundamental, utilizando o princípio variacional	49
4.3 - Valores da energia do estado fundamental, utilizando os métodos de configuração-interação (C-I) e as equações de Fadeev	50

5.1 - Autovalores da energia do íon $e^-e^+e^-$ em u.a.	53
5.2 - Autovalores da energia do íon H^- (com massa do próton real) em u.a.	53
5.3 - Autovalores da energia do íon H^- (com massa do próton $\rightarrow \infty$)	54
5.4 - Autovalores da energia do átomo de He (com massa de núcleo $\rightarrow \infty$) em u.a.	54
5.5 - Contribuição percentual das ondas parciais $\chi_{k\nu}$ à norma da função de onda	56
5.6 - Tabela de aproximantes de Padé para o íon $e^-e^+e^-$, $N = (k-4)/2$, $n=9$	59
5.7 - Tabela de aproximantes de Padé para o He, $N = (k-2)/2$, $n=14$	59
5.8 - Tabela de aproximantes de Padé para o íon H^- ($M_p \rightarrow \infty$), $N = (k-2)/2$, $n=14$	59
5.9 - Tabela de aproximantes de Padé para o íon H^- (M_p real), $N = (k-2)/2$, $n=14$	60
5.10 - Aproximantes de Padé sobre os aproximantes diagonais das tabelas 6, 7, 8, 9	61
5.11 - Valores de $E(\infty)$ para os íons $e^-e^+e^-$, H^- e átomo de He ($M_p =$ massa do próton), em u.a.	62
B.1 - Elementos $C_{n,m}$ para o íon $e^-e^+e^-$	74
B.2 - Elementos $C_{n,m}$ para o íon H^- e átomo de He com massas nucleares infinitas	75
B.3 - Elementos $C_{n,m}$ para o íon H^- com massa nuclear real	76

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

A compreensão da estrutura e propriedades dos sistemas atômicos e moleculares mais simples recebeu uma atenção considerável desde antes da aparição da mecânica quântica e do estabelecimento da equação de Schrödinger. Com estes instrumentos, podemos resolver o átomo de hidrogênio de uma maneira completa e elegante. Entretanto, quando passamos a investigar problemas de três ou mais corpos, a situação se torna intrincada, fazendo-se necessário o uso de aproximações ou de hipóteses adicionais (relativas à disposição espacial das partículas, por exemplo) na solução dos sistemas. Para átomos e íons como H^- , He, Li^+ e outros, não era possível uma solução completa. Porém, estes átomos são suficientemente simples para que possamos obter resultados acurados com os variados métodos de aproximação. Neste domínio os melhores resultados até hoje encontrados são os cálculos realizados a partir de um princípio variacional.

O surgimento da Física Nuclear e a necessidade de compreender mais a fundo as interações fortes, trouxe a necessidade de resolver outros problemas de poucos corpos⁽¹⁾, que são de natureza diferente dos da Física Atômica e Molecular (pelo alcance das forças e relacionamento diferente entre as partículas).

O potencial coulombiano depende exclusivamente da interação entre pares de partículas e é de longo alcance. Os potenci

ais fenomenológicos nucleon-nucleon da física nuclear pensa-se que também sejam 1 a 1 e são de curto alcance. Apesar da diferença das características das forças presentes, uma solução formal do problema de três corpos, com potenciais entre pares deve servir igualmente bem a sistemas coulombianos e nucleares.

O primeiro resultado notável dos esforços para a obtenção de uma solução exata do problema de três corpos vem das equações propostas por Fadeev⁽²⁾. Essencialmente, estas equações são uma maneira conveniente de se reescrever a equação de Schrödinger e Lippman Schwinger para três corpos, colocando-a numa forma integral (com solução única) que enfatiza a matriz T ao invés dos potenciais^(3,4).

Com o impulso dado à teoria por Fadeev surgem outras tentativas de compreensão da dinâmica do problema de três corpos, em particular o desenvolvimento da função de onda em harmônicos hiperesféricos. Diversas investidas foram realizadas nesta direção e os trabalhos que primeiro chegaram a uma forma elegante da solução são os de Zickendraht⁽⁵⁾ e os de Simonov^(6,7). Este último lança a base do método que costumamos chamar de harmônicos-k. Para uma grande coletânea bibliográfica de trabalhos realizados nesta área vejam-se as refs. (8) e (9).

A partir do seu surgimento, estes métodos vêm sendo exaustivamente utilizados nos problemas da física nuclear. Ambos, trazem o mérito de chegar formalmente a uma solução exata. Porém, nos cálculos práticos, se faz necessário o uso de métodos numéricos de certa sofisticação para a obtenção de um resultado aproximado dos valores que se deseja calcular. Isto pode limitar de maneira drástica a aplicação destes formalismos. Em especial, a utilização dos harmônicos-k torna-se bastante mais difícil quando

estudam-se estados em que o momento angular total não é nulo.

Na Física Atômica apenas recentemente recorreu-se a estes métodos. As coordenadas hiperesféricas foram utilizadas por C.D. Lin⁽¹⁰⁾ no estudo do sistema elétron-hidrogênio. Os harmônicos-k foram aplicados na obtenção do estado fundamental do íon negativo do positrônio $e^-e^+e^-$ por Chowdhury et al.⁽¹¹⁾ e H. Coelho et al.⁽¹²⁾. Harmônicos-k a uma dimensão levam a resultados simples, no caso de três partículas a uma dimensão. O átomo de He e o He^+ foram investigados dentro deste formalismo por Coelho e Amado⁽¹³⁾.

O uso dos harmônicos-k no estudo do íon $e^-e^+e^-$ parece especialmente interessante pois, ao contrário do que ocorre em sistemas como o H^- , não podemos considerar uma das massas como infinita eliminando sua contribuição ao movimento. Com harmônicos-k, em nenhum momento é mais conveniente ou necessária esta consideração.

No presente trabalho, pretendemos aplicar o método dos harmônicos-k a sistemas de três corpos sob interação coulombiana, mais precisamente na obtenção da energia de ligação do íon $e^-e^+e^-$, do átomo de Hélio e do íon negativo do Hidrogênio H^- :

O segundo Capítulo traz uma descrição detalhada do método dos harmônicos hiperesféricos (harmônicos-k); dos casos em que é possível uma solução analítica e de como resolver explicitamente o sistema infinito de equações acopladas que contém a dinâmica do problema.

No terceiro Capítulo são examinadas as características do potencial de Coulomb, dentro desta nova metodologia. Calculamos em detalhe os assim chamados elementos de matriz do potencial. Para efetivação deste cálculo é conveniente o uso de um pro-

grama de computação algébrica, Schoonschip, que explicamos no de correr do capítulo.

Os sistemas Coulombianos de três corpos são investigados de uma maneira mais próxima no quarto Capítulo e em seguida no quinto Capítulo apresentamos o resultado de nossas aplicações do método dos harmônicos-k e do estudo da convergência dos valores calculados. Para tal estudo utilizamos métodos de aceleração de convergência como os aproximantes de Padé e propusemos uma fórmula linear em $(k)^{-Y}$ para extrapolação dos valores da energia.

No Apêndice A estão contidos alguns detalhes do método dos aproximantes de Padé pontuais ⁽¹⁴⁾, seu uso e sua relação com o método de extrapolação de Aitkên.

No Apêndice B estão contidas tabelas com os valores dos elementos de matriz do potencial.

Devemos ainda salientar que quando nos referimos a unidades atômicas (u.a.), são as definidas no livro de Bethe e Salpeter ⁽¹⁵⁾. A saber:

1. unidade de carga = e = carga do elétron;
2. unidade de massa = m = massa do elétron;
3. unidade de comprimento = $a = \hbar^2/me^2$ = raio da primeira órbita de Bohr;
4. unidade de energia = e^2/a = dobro do potencial de ionização do hidrogênio (massa do próton $\rightarrow \infty$).

CAPÍTULO 2

MÉTODO DOS HARMÔNICOS HIPERESFÉRICOS

2.1 - O Problema de Dois Corpos e sua Generalização. Harmônicos Hiperesféricos

Na mecânica quântica, quando buscamos uma solução para problemas de dois corpos, costumamos separar os movimentos do centro de massa e relativo; este último é relevante para o cálculo da energia de ligação. A equação que descreve o movimento relativo pode ainda ser separada em duas, uma relacionada à distância entre as partículas e outra que contém as variáveis angulares.

A equação de Schrödinger para o problema com massas m_1 e m_2 tem a forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_x^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_y^2 + V(\vec{x}, \vec{y}) \right] \phi(\vec{x}, \vec{y}) = E \phi(\vec{x}, \vec{y}) \quad (1)$$

$$\nabla_x^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$$

A função de onda ϕ depende, então, das seis coordenadas das partículas (x_1, x_2, x_3) e (y_1, y_2, y_3) . Introduzindo as coordenadas do centro de massa e relativas

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{x} + m_2 \vec{y}}{m_1 + m_2} \quad (2)$$

$$\vec{r} = \vec{y} - \vec{x} \quad (3)$$

podemos separar a eq. (1) em uma que dependa apenas de \vec{R} e outra para \vec{r} (15). A equação em \vec{r} ou seja a que governa o movimento relativo é

$$\nabla_r^2 \psi(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E_\ell - V)\psi(\vec{r}) = 0 \quad (4)$$

onde:

$$\mu = m_1 m_2 (m_1 + m_2)^{-1} \quad \bar{e} \text{ a massa reduzida.}$$

Ao utilizarmos as coordenadas esféricas

$$\begin{aligned} r_1 &= r \cos \phi \sin \theta \\ r_2 &= r \sin \phi \sin \theta \\ r_3 &= r \cos \theta \\ r &= (r_1^2 + r_2^2 + r_3^2)^{1/2} \end{aligned} \quad (5)$$

na eq. (4), chegaremos a

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi(r, \theta, \phi) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E_\ell - V)\psi(r, \theta, \phi) = 0 \quad (6)$$

Devemos tentar como solução

$$\psi = \sum_{\ell, m} U_{\ell, m}(r) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \quad (7)$$

onde os $Y_{\ell, m}$ são os harmônicos esféricos (15). Multiplicando a eq. (6) por $Y_{\ell, m}$ e integrando na parte angular obtemos:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) U_{\ell}(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} U_{\ell}(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_\ell U_{\ell}(r) =$$

$$= \frac{2\mu}{\hbar^2} \sum_{\ell, m} \left[\int Y_{\ell m} V Y_{\ell' m'} d\Omega \right] U_{\ell, m}(r) \quad (8)$$

É claro que para potenciais que dependem apenas da distância entre as partículas (módulo do raio vetor), o sistema de equações (8) é desacoplado. Porém, para casos como o do deuteron, em que há forças que dependem de ℓ , obtemos um sistema de equações diferenciais acopladas.

Quando existem três ou mais corpos em interação, podemos pensar em generalizar o procedimento descrito para duas partículas. O método dos harmônicos hiperesféricos consiste basicamente nesta generalização.

No problema de dois corpos, os seis graus de liberdade a priori existentes foram reduzidos a três quando eliminamos o movimento do centro de massa. Passamos então a utilizar uma distância r e dois ângulos como variáveis relevantes. Do mesmo modo, no problema de N corpos, podemos eliminar o movimento do centro de massa e teremos $3N-3$ graus de liberdade. Após uma escolha conveniente de coordenadas poderemos definir uma hiperdistância ρ e $3N-4$ ângulos. As funções que chamamos de harmônicos hiperesféricos são as que terão um papel análogo aos $Y_{\ell, m}$, na eq. (7).

O ponto de partida para a generalização é a passagem das coordenadas x_i ($i = 1, \dots, N$) das partículas para as assim chamadas coordenadas generalizadas de Jacobi (16, 17)

$$R = \left(\sum_{i=1}^N m_i \vec{x}_i \right) \left(\sum_{i=1}^N m_i \right)^{-1} \quad (9)$$

$$\vec{\xi}_\alpha = (\mu_\alpha)^{1/2} \left[\left(\sum_{\beta=1}^\alpha m_\beta \vec{x}_\beta \right) \left(\sum_{\beta=1}^\alpha m_\beta \right)^{-1} - \vec{x}_{\alpha+1} \right]$$

onde:

$$\mu_\alpha = m_{\alpha+1} \left(\sum_{\beta=1}^{\alpha} m_\beta \right) \left(\sum_{\beta=1}^{\alpha+1} m_\beta \right)^{-1} \quad \text{e} \quad \alpha = 1, \dots, N-1$$

A interpretação destas coordenadas \vec{R} é direta. \vec{R} é o vetor do centro de massa das N partículas e $\mu_\alpha^{-1/2} \vec{\xi}$ é o vetor que realiza a conexão do centro de massa de um sub-sistema de partículas (etiquetadas de 1 a α) com a partícula $\alpha+1$.

Desta maneira a equação de Schrödinger para N corpos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \nabla_{\vec{x}_i}^2 + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) - E \right] \phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) = 0 \quad (10)$$

pode ser reescrita como:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\sum_{i=1}^N m_i \right)^{-1} \nabla_{\vec{R}}^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla_{\vec{\xi}_\alpha}^2 \right] + V(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \dots, \vec{\xi}_{N-1}) - E \right\} \psi(\vec{R}, \vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \dots, \vec{\xi}_{N-1}) = 0 \quad (11)$$

Neste momento podemos transformar as coordenadas $\vec{\xi}_\alpha$ em coordenadas hiperesféricas (18). Introduzimos uma hiperdistância (raio de hiperesfera) definida por

$$\rho^2 = \sum_{\alpha=1}^{N-1} \xi_\alpha^2 \quad (12)$$

As outras coordenadas são os ângulos que definem a posição de um ponto na hiperesfera. Uma maneira de definir estes ângulos é manter para cada $\vec{\xi}_\alpha$ os ângulos polar e azimutal θ_α e ϕ_α , e definir novos ângulos relacionados ao comprimento de $\vec{\xi}_\alpha$ e à hiperdistância por

$$\begin{aligned}
 \xi_1 &= \rho \operatorname{sen} \zeta_{N-2} \dots \operatorname{sen} \zeta_2 \operatorname{sen} \zeta_1 \\
 \xi_2 &= \rho \operatorname{sen} \zeta_{N-2} \dots \operatorname{sen} \zeta_2 \cos \zeta_1 \\
 &\vdots \\
 \xi_\alpha &= \rho \operatorname{sen} \zeta_{N-2} \dots \operatorname{sen} \zeta_\alpha \cos \zeta_{\alpha-1} \\
 &\vdots \\
 \xi_{N-1} &= \rho \operatorname{sen} \zeta_{N-2}
 \end{aligned} \tag{13}$$

Denotaremos o conjunto dos ângulos $\{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N-1}, \zeta_1, \theta_2, \dots, \zeta_{N-2}\}$ por Ω . Deste modo temos um sistema, com uma hiperdistância ρ , e os $3N-4$ ângulos Ω .

Utilizando estas coordenadas hiperesféricas e eliminando o movimento do centro de massa da eq. (11) obtemos (*):

$$\left[\frac{1}{\rho^{3N-4}} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^{3N-4} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\nabla_\Omega^2}{\rho} \right] \psi(\rho; \Omega) + \frac{2}{\hbar^2} \epsilon \psi(\rho; \Omega) = \frac{2}{\hbar^2} V \psi(\rho; \Omega) \tag{14}$$

∇_Ω^2 é o operador que contém a parte angular do Laplaciano de $3N-3$ dimensões definido pelas coordenadas hiperesféricas. A forma explícita deste operador é (18):

$$\begin{aligned}
 \nabla_\Omega^2 = & \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\Lambda_\alpha}{(\sigma_\alpha)^2} + \sum_{\alpha=1}^{N-2} \left\{ \left[\operatorname{sen}^2 \zeta_{\alpha+1} \dots \operatorname{sen}^2 \zeta_{N-2} \operatorname{sen}^{(3\alpha-1)} \zeta_\alpha \cos^2 \zeta_\alpha \right]^{-1} \right. \\
 & \left. \times \frac{\partial}{\partial \zeta_\alpha} \left[\operatorname{sen}^{(3\alpha-1)} \zeta_\alpha \cos^2 \zeta_\alpha \frac{\partial}{\partial \zeta_\alpha} \right] \right\} \tag{15}
 \end{aligned}$$

onde:

$$\Lambda_\alpha = \frac{1}{\operatorname{sen} \theta_\alpha} \frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} \left(\operatorname{sen} \theta_\alpha \frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} \right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta_\alpha} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

e

$$\sigma_\alpha = \frac{\xi_\alpha}{\rho} = \operatorname{sen} \zeta_{N-2} \dots \operatorname{sen} \zeta_\alpha \cos \zeta_{\alpha-1}$$

(*) ϵ = energia do movimento relativo.

∇_{Ω}^2 pode ser obtido por iteração dos operadores

$$K_{\alpha}^2 = K_{\alpha-1}^2 \frac{1}{\text{sen}^2 \zeta_{\alpha}} + \frac{\Lambda_{\alpha-1}}{\cos^2 \zeta_{\alpha}} + \frac{1}{\text{sen}^{(3N-1)} \zeta_{\alpha} \cos^2 \zeta_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial \zeta_{\alpha}} \left[\text{sen}^{(3N-1)} \zeta_{\alpha} \cos^2 \zeta_{\alpha} \frac{\partial}{\partial \zeta_{\alpha}} \right] \quad (16)$$

$$K_1^2 = \frac{\Lambda_1}{\text{sen}^2 \zeta_1} + \frac{\Lambda_2}{\cos^2 \zeta_2} + \frac{1}{\text{sen}^2 \zeta_1 \cos^2 \zeta_1} \frac{\partial}{\partial \zeta_1} \left[\text{sen}^2 \zeta_1 \cos^2 \zeta_1 \frac{\partial}{\partial \zeta_1} \right] \quad (17)$$

$$K_{N-2}^2 = \nabla_{\Omega}^2$$

Continuando a analogia com dois corpos devemos expandir a função $\Psi(\rho; \Omega)$ em uma base de autofunções do operador ∇_{Ω}^2 ,

$$\nabla_{\Omega}^2 u_{k\{\ell_i m_i\}}(\Omega) = -k(k + 3N - 5) u_{k\{\ell_i m_i\}}(\Omega) \quad (18)$$

A forma destas funções é

$$u_{k\{\ell_i m_i\}}(\Omega) = \prod_{\alpha=1}^{N-1} Y_{\ell_{\alpha} m_{\alpha}}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) \prod_{j=1}^{N-2} \gamma_{k\{\ell_j m_j\}}^j(\zeta_j) \quad (19)$$

onde os $Y_{\ell_{\alpha} m_{\alpha}}$ são os harmônicos esféricos correspondentes aos operadores Λ_{α} . Os $\gamma_{k\{\ell_j m_j\}}^j$ são autofunções dos operadores K_j^2 (cf. eq. (16))

$$K_j^2 \gamma_{k\{\ell_j m_j\}}^j(\zeta_j) = k_j(k_j + 3j + 1) \gamma_{k\{\ell_j m_j\}}^j(\zeta_j) \quad (20)$$

Os $\gamma_{k\{\ell_j m_j\}}^j$ que satisfazem esta equação são dados por (18):

$$\gamma_{k\{\ell_j m_j\}}^j(\zeta_j) = (\cos \zeta_j)^{\ell_j+1} (\text{sen} \zeta_j)^{k_j-1} {}_2F_1(a, b, c, \cos^2 \zeta_j) \quad (21)$$

onde

$${}_2F_1(a, b, c, z) = 1 + \frac{ab}{c} z + \frac{a(a+1)b(b+1)}{2!c(c+1)} z^2 + \dots$$

$$a = \frac{1}{2} (k_j - k_{j-1} - l_{j+1})$$

$$b = \frac{1}{2} (k_j + k_{j-1} + l_{j+1} + 3j + 1)$$

$$c = l_{j+1} + \frac{3}{2} \tag{22}$$

$$k_0 = l_1, \quad k_j = 2n + k_{j-1} + l_{j+1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$k_{N-2} = K$$

De outra maneira podemos dizer que os $u_{k\{l_i, m_i\}}$ são a parte angular dos polinômios harmônicos de grau k (8, 19), ou seja das soluções da equação de Laplace:

$$\left[\frac{1}{\rho^{3N-4}} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho^{3N-4} \frac{\partial}{\partial \rho}) + \frac{\nabla_{\Omega}^2}{\rho^2} \right] P_k(\rho; \Omega) = 0 \tag{23}$$

$$u_{k\{l_i, m_i\}} = \rho^{-k} P_k(\rho; \Omega)$$

pois

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\rho^{3N-4}} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho^{3N-4} \frac{\partial}{\partial \rho}) + \frac{\nabla_{\Omega}^2}{\rho^2} \right] \rho^k u_{k\{l_i, m_i\}} = \\ & = \frac{\rho^k k(k+3N-5)}{\rho^2} u_{k\{l_i, m_i\}} + \rho^k \frac{\nabla_{\Omega}^2}{\rho^2} u_{k\{l_i, m_i\}} = 0 \end{aligned}$$

que implica em

$$\nabla_{\Omega}^2 u_{k\{l_i, m_i\}} = -k(k+3N-5) u_{k\{l_i, m_i\}} \tag{18}$$

Os $u_{k\{l_i, m_i\}}$ são as funções que denominamos de harmô-

funções hipersféricas. Além das propriedades já descritas, estas funções devem satisfazer a condição de ortonormalidade

$$\int u_{k\alpha}(\Omega) u_{k'\alpha'}(\Omega) d\Omega = \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (24)$$

onde α engloba o conjunto de números quânticos $\{l_i m_i\}$ e $d\Omega$ é a parte angular do elemento de volume no espaço de dimensão $3N-3$, que é dado por

$$d\Omega = \prod_{\alpha=1}^{N-1} \frac{d\vec{\xi}_{\alpha}}{\rho^{3N-4} d\rho} \quad (25)$$

$$d\vec{\xi}_{\alpha} = d(\xi_{\alpha})_1 d(\xi_{\alpha})_2 d(\xi_{\alpha})_3$$

utilizando as eqs. (13) obtemos

$$d\Omega = \prod_{\alpha=1}^{N-1} \sin\theta_{\alpha} d\theta_{\alpha} d\phi_{\alpha} \prod_{\beta=1}^{N-2} \cos^2\zeta_{\beta} (\sin\zeta_{\beta})^{3\beta-4} d\zeta_{\beta} \quad (26)$$

EXEMPLOS:

1º - Para dois corpos, $N=2$, as soluções da equação de autovalor - res

$$\nabla_{\Omega}^2 u_{k\alpha} = -k(k+1)u_{k\alpha}$$

são os harmônicos esféricos usuais e k coincide com o autovalor do momento angular, i.é.

$$u_{k\alpha}(\Omega) \equiv Y_{lm}(\theta, \phi)$$

2º - Para três corpos, N=3, desenvolvendo as funções da eq. (19) obtemos

$$u_{k\ell_1 m_1 \ell_2 m_2}(\Omega) = N Y_{\ell_1 m_1}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell_2 m_2}(\theta_2, \phi_2) (\cos \zeta)^{\ell_2} (\sin \zeta)^{\ell_1} P_{k-\ell_1-\ell_2}^{\left(\ell_1 + \frac{1}{2}, \ell_2 + \frac{1}{2}\right)}(\cos 2\zeta) \quad (27)$$

onde N é uma constante de normalização e substituímos a função hipergeométrica ${}_2F_1$ pela sua forma em polinômios de Jacobi

$$P_r^{(t,s)}(x) = (-1)^r \frac{\Gamma(r+s+1)}{r! \Gamma(s+1)} {}_2F_1\left(-r, r+s+t+1, s+1, \frac{1+x}{2}\right)$$

Das eqs. (22) temos

$$k_0 = \ell_1, \quad k_j = 2n + k_{j-1} + \ell_{j+1} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$k_{N-2} = k$$

então

$$k = 2n + \ell_1 + \ell_2 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Quando o momento angular total for nulo (6):

$$k = 2n \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

3º - Para quatro corpos, N=4, temos (8):

$$u_{k\ell_1 m_1 \ell_2 m_2 \ell_3 m_3}(\Omega) = N Y_{\ell_1 m_1}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell_2 m_2}(\theta_2, \phi_2) Y_{\ell_3 m_3}(\theta_3, \phi_3) \times (\cos \zeta_1)^{\ell_2} (\sin \zeta_1)^{\ell_1} P_{k-\ell_1-\ell_2}^{\left(\ell_1 + \frac{1}{2}, \ell_2 + \frac{1}{2}\right)}(\cos 2\zeta_1) \times$$

$$\times (\cos \zeta_2)^{\ell_3} (\sin \zeta_2)^{k_1} P_{k-k_1-\ell_3}^{(k_1 + \frac{1}{2}, \ell_3 + \frac{1}{2})} (\cos 2\zeta_2) \quad (28)$$

Das eqs. (22)

$$k_1 = 2n + \ell_1 + \ell_2 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$k = 2n + k_1 + \ell_3 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Com o que vimos, a expansão da função $\Psi(\rho; \Omega)$ fica:

$$\Psi(\rho; \Omega) = \sum_{k, \alpha} \chi_{k, \alpha}(\rho) u_{k, \alpha}(\Omega) \quad (29)$$

Chamamos os coeficientes $\chi_{k, \alpha}(\rho)$ de ondas parciais. Substituindo a expansão da eq. (29) na eq. (14) multiplicada por $u_{k\alpha}(\Omega)$ e integrando em Ω obtemos o sistema (5, 7, 8, 19) (cf. eq. (8)):

$$\left[\frac{1}{\rho^{3N-4}} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^{3N-4} \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{k(k+3N-5)}{\rho^2} + \frac{2\epsilon}{h^2} \right] \chi_{k\alpha}(\rho) =$$

$$= \frac{2}{h^2} \sum_{k', \alpha'} V_{k\alpha, k'\alpha'}(\rho) \chi_{k', \alpha'}(\rho) \quad (30)$$

onde

$$V_{k\alpha, k'\alpha'}(\rho) = \int d\Omega u_{k\alpha}(\Omega) V u_{k'\alpha'}(\Omega) \quad (31)$$

são os elementos de matriz do potencial na base dos harmônicos hiperesféricos. Como em geral os potenciais com os quais trabalhamos dependem apenas da distância $r_{ij} = |\vec{x}_i - \vec{x}_j|$ entre pares de partículas, temos:

$$V_{k\alpha, k'\alpha'}(\rho) = \int d\Omega u_{k\alpha}(\Omega) \sum_{i>j} V(r_{ij}) u_{k'\alpha'} \quad (32)$$

Para as aplicações físicas serão úteis aqueles harmônicos que, além das propriedades já vistas, formem uma base para a representação irredutível do grupo de permutações. Um último requerimento é que a forma destas funções não dificulte o cálculo dos elementos de matriz $V_{k\alpha, k'\alpha'}$. Harmônicos hiperesféricos com estas propriedades foram estudados inicialmente por Simonov (6) para o problema de três corpos. São os chamados harmônicos-K. Na próxima seção veremos estas funções. O desenvolvimento histórico deste formalismo, bem como os estudos do ponto de vista da teoria de grupos podem ser vistos em Simonov (8) e Louck (9).

2.2 - Harmônicos-k para Três Corpos

No caso específico de três corpos utilizaremos apenas as coordenadas de Jacobi $\vec{\xi}_1$ e $\vec{\xi}_2$ (cf. eqs. (2.1.9)). A hiperdistância ρ e o ângulo ζ ficarão definidos por

$$\begin{aligned} \rho &= \xi_1^2 + \xi_2^2 \\ \xi_1 &= \rho \sin \zeta \\ \xi_2 &= \rho \cos \zeta \end{aligned} \quad (1)$$

De acordo com Simonov (8) os hiperesféricos $u_{k\alpha}$ deverão conter $3N-4 = 5$ índices (números quânticos): o número k que está relacionado ao fato dos hiperesféricos serem autofunções de ∇_{Ω}^2 (cf. eq. (2.1.15)), os autovalores de momento angular e sua projeção l_1 e m_1 relativos a ξ_1 e analogamente l_2 e m_2 relati-

vos a ξ_2 . Os números quânticos ℓ_1 , m_1 , ℓ_2 e m_2 são a subdivisão do índice α , combinados no momento angular total serão L , M , ℓ_1 e ℓ_2 .

Escreveremos, então, os harmônicos hiperesféricos para três partículas na forma da combinação

$$u_{kLM\ell_1\ell_2}(\Omega) = N_{k\ell_1\ell_2} Y_{LM\ell_1\ell_2}(\theta_1\phi_1; \theta_2\phi_2)(\text{sen}\zeta)^{\ell_1} (\text{cos}\zeta)^{\ell_2} P_{\frac{k-\ell_1-\ell_2}{2}}^{\left(\ell_1 + \frac{1}{2}, \ell_2 + \frac{1}{2}\right)}(\text{cos}^2\zeta) \quad (2)$$

onde:

$$P_r^{(\ell, s)}$$

são polinômios de Jacobi (cf. eq. (2.1.27)),

$$Y_{LM\ell_1\ell_2}(\theta_1\phi_1; \theta_2\phi_2) = \sum_{m_1 m_2} \langle LM | \ell_1 m_1 \ell_2 m_2 \rangle Y_{\ell_1 m_1}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell_2 m_2}(\theta_2, \phi_2) \quad (3)$$

e a constante de normalização é dada por

$$N_{k\ell_1\ell_2} = \left\{ \frac{(2k+4) \Gamma\left(\frac{k+\ell_1+\ell_2+4}{2}\right) \Gamma\left(\frac{k-\ell_1-\ell_2+2}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{k+\ell_1-\ell_2+3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{k+\ell_2-\ell_1+3}{2}\right)} \right\}^{1/2} \quad (4)$$

As funções $u_{kLM\ell_1\ell_2}$, entretanto, não formam a base das representações irredutíveis do grupo de permutação. Para satisfazer esta condição, é necessário passar a um novo conjunto de números quânticos $(kLM\nu\tau)$, ao invés de $(kLM\ell_1\ell_2)$ (8, 20, 21).

Devemos, com o intuito de chegar ao novo conjunto, de-

finir novas variáveis,

$$\begin{aligned} \vec{z} &= \xi_1 + i\xi_2 \\ \vec{z}^* &= \xi_1 - i\xi_2 \end{aligned} \quad (5)$$

Os novos números quânticos ν e τ serão obtidos pelo uso dos operadores (8,21)

$$\hat{\nu} = \frac{1}{2} \left(\sum_i z_i \frac{\partial}{\partial z_i} - \sum_j z_j^* \frac{\partial}{\partial z_j^*} \right) \quad (6)$$

$$\hat{\tau} = \sum_{i,j} L_i \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} - z_j^* \frac{\partial}{\partial z_j^*} \right) L_j \quad (7)$$

$\hat{\nu}$ está relacionado às permutações e $\hat{\tau}$ não tem uma interpretação física bem definida (8).

Podemos escrever o novo conjunto de funções, que são os harmônicos-k, como combinações das funções definidas pela eq.(2), a saber:

$$u_{kLM\nu\tau}(\Omega) = \sum_{l_1 l_2} C_{l_1 l_2 k\nu\tau} u_{kLMl_1 l_2}(\Omega). \quad (8)$$

Para alguns casos podemos encontrar os coeficientes $C_{l_1 l_2 k\nu\tau}$ e algumas relações de recorrência foram dadas por Efros (22). Mais recentemente Knyr et al. (23) utilizaram um grupo de transformações canônicas para construir os harmônicos-k.

Quando estudamos estados ligados \bar{e} de particular interesse o nível fundamental em que o momentum angular total \bar{e} nulo, no nosso caso ($L = 0$). Harmônicos-k com $L = 0$ foram investigados por Simonov (6). A forma explícita destas funções \bar{e} ($\nu \geq 0$)

$$u_{kv} = \sqrt{\frac{k+2}{\pi^3}} \cos \lambda v A^\nu P_1^{\nu, 0} \left(\frac{k}{2} - \nu \right) (1 - 2A^2) \begin{cases} 1; & \nu \neq 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}; & \nu = 0 \end{cases} \quad (9)$$

$$u_{k-} = \sqrt{\frac{k+2}{\pi^3}} \sin \lambda v A^\nu P_1^{\nu, 0} \left(\frac{k}{2} - \nu \right) (1 - 2A^2)$$

$$k = 0, 2, 4, 6, \dots$$

$$\nu = \frac{k}{2}, \frac{k}{2} - 2, \dots \geq 0$$

As variáveis A e λ ficam definidas por:

$$\xi_1^2 - \xi_2^2 = \rho^2 A \cos \lambda$$

$$2\xi_1 \xi_2 = \rho^2 A \sin \lambda \quad (10)$$

$$\rho^2 A^2 = \left[(\xi_1^2 - \xi_2^2)^2 + 4(\xi_1 \xi_2)^2 \right]^{1/2}$$

Em termos de A e λ o elemento de integração angular $d\Omega$, para três corpos, vem expresso como:

$$d\Omega = \pi^2 A dA d\lambda \quad (11)$$

As propriedades das funções u_{kv} e u_{k-v} em relação à permutações ficam definidas pela troca

$$P_{12}\lambda = -\lambda, \quad P_{13}\lambda = -\lambda - \frac{2\pi}{3}, \quad P_{23}\lambda = -\lambda + \frac{2\pi}{3}$$

onde P_{ij} é o operador de intercâmbio das partículas i e j (6).

Podemos verificar, prontamente, que as funções u_{kv} são simétricas em relação à troca das partículas 1 e 2. Para tanto, apliquemos P_{12} a u_{kv}

$$\begin{aligned}
 P_{12} u_{kv}(\lambda, A) &= \sqrt{\frac{k+2}{\pi}} \cos(-\lambda v) A^v P_{12}^{(v,0)} \left(\frac{k}{2} - v \right) (1-2A^2) = u_{kv}(-\lambda, A) \\
 &= \sqrt{\frac{k+2}{\pi}} \cos \lambda v A^v P_{12}^{(v,0)} \left(\frac{k}{2} - v \right) (1-2A^2)
 \end{aligned}
 \tag{13}$$

De uma maneira mais explícita P_{12} opera em ξ_1 e ξ_2 , como (6)

$$P_{12} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} \tag{14}$$

Vejamos, por exemplo, como opera P_{12} na função u_{42} . Utilizando as eqs. (9) e (10) teremos

$$u_{42} = \left(\frac{6}{\pi^3}\right)^{1/2} \frac{1}{\rho^4} \left[(\xi_1^2 - \xi_2^2)^2 - 4(\xi_1 \cdot \xi_2)^2 \right] \tag{15}$$

e é fácil verificar que

$$P_{12} u_{42}(\xi_1, \xi_2) = u_{42}(-\xi_1, \xi_2) = u_{42}(\xi_1, \xi_2) \tag{16}$$

Estas funções simétricas pela troca $1 \leftrightarrow 2$ terão, como veremos adiante, um papel crucial no estudo do nível fundamental de sistemas a três corpos.

2.3 - A Solução do Sistema de Equações Acopladas

O produto final do formalismo hiperesférico é o sistema de equações diferenciais acopladas, ao qual chegamos na subse

ção 2.1 (cf. eq. (21)). A dinâmica dos problemas de N corpos está toda contida neste sistema. Quando estudamos o problema de dois corpos vimos que, quando o potencial depende apenas da distância entre as partículas, o sistema descrito pelas eqs.(2.1.8) é desacoplado. No caso dos harmônicos hiperesféricos se o potencial depende apenas da hiperdistância ρ , o sistema de eqs.(2.1.30) é desacoplado.

Vejamos dois casos de interesse:

1º - O Oscilador Harmônico Generalizado (5, 19, 24, 25)

2º - O Potencial Pseudo-Coulombiano (5).

1º - O potencial do oscilador harmônico para duas partículas é dado por (26):

$$V(\vec{x}_{ij}) = \frac{m\omega^2}{2} (\vec{x}_i - \vec{x}_j)^2 \quad (1)$$

Para N partículas idênticas teremos (19, 24)

$$\sum_{i>j=1}^N V(\vec{x}_{ij}) = \frac{m\omega^2}{2} \sum_{i>j}^N (\vec{x}_i - \vec{x}_j)^2 = \frac{\omega^2 N}{2} \sum_{\alpha=1}^{N-1} \xi_{\alpha}^2 = \frac{\omega^2 N}{2} \rho^2 \quad (2)$$

Para este potencial a eq. (2.1.30) é desacoplada, sua forma será (19):

$$\left[\frac{1}{\rho^{3N-4}} \frac{d}{d\rho} (\rho^{3N-4} \frac{d}{d\rho}) - \frac{k(k+3N-5)}{\rho^2} + \frac{2\epsilon_{nk}}{\hbar^2} \right] \phi_{nk}(\rho) = \frac{\omega^2 N}{\hbar^2} \rho^2 \cdot \phi_{nk}(\rho) \quad (3)$$

A solução desta equação é dada por (19, 24):

$$\phi_{nk}(\rho) = \left[\frac{2n!}{\Gamma(k+n+ \frac{3N-3}{2})} \right]^{1/2} \xi^k e^{-\frac{\xi^2}{2}} {}_1F_1(-n, k + \frac{3N-3}{2}; \xi^2) \quad (4)$$

onde

$$\xi = \alpha \rho \quad , \quad \alpha^2 = \frac{\omega^2 N}{\hbar^2}$$

A energia ϵ_{nk} será dada por

$$\epsilon_{nk} = (2n + k + \frac{3N-3}{2}) \sqrt{N} \hbar \omega \quad (5)$$

$${}_1F_1(a, b; z) = 1 + \frac{a}{b} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots$$

29 - Esta é uma outra situação, que não está relacionada a um potencial entre pares, como acontece com o oscilador harmônico. A forma do potencial é

$$V(\rho) = - \frac{a^2}{\rho} \quad (6)$$

Daí o nome que utilizamos, potencial pseudo-coulombiano. Com $V(\rho)$ escrito na forma da eq. (6) e definindo-se:

$$R_{nk} = \rho^{\frac{3N-4}{2}} \phi_{nk}$$

$$x^2 = 2|E| \quad , \quad E < 0 \quad (7)$$

$$\xi = 2 x \rho$$

Podemos reescrever a eq. (21) na forma

$$\frac{d^2}{d\xi^2} R_{nk} + \left[\frac{2a^2}{x} \frac{1}{2\xi} - \frac{1}{4} - \frac{(2k+3N-6)(2k+3N-4)}{4\xi^2} \right] R_{nk} = 0 \quad (8)$$

De Magnus et al. (27) temos

$$f'' + \left(\frac{2n+\alpha+1}{2z} - \frac{1}{4} + \frac{1-\alpha^2}{4z^2} \right) f = 0 \quad (9)$$

$$f(z) = N e^{-z/2} z^{(\alpha+1)/2} {}_1F_1(-n, \alpha+1; z) \quad (10)$$

Portanto, combinando as eqs. (7), (8), (9) e (10), obtemos:

$$\phi_{nk}(\rho) = N e^{-x\rho} \rho^k {}_1F_1(-n, 2k+3N-4; 2x\rho) \quad (11)$$

onde N é uma constante de normalização,

$$x^2 = 2|E| \equiv 2|\epsilon_{nk}|, \quad (12)$$

$$\epsilon_{nk} = -\frac{2a^4}{(2n+2k+3N-4)^2}.$$

Os casos estudados são situações específicas nas quais é possível uma solução completa do sistema de eqs. (2.1.30). Quando não ocorre a separação das equações, torna-se necessário resolver o sistema infinito de equações acopladas. Uma das maneiras mais utilizadas para efetivar a solução do sistema consiste em expandir a função de onda "hiperradial" $\chi_{k\nu}(\rho)$ num conjunto completo de funções $\{\phi_{nk\nu}(\alpha\rho)\}$, com a normalização correta

$$\int_0^\infty |\phi_{nk\nu}(\xi)|^2 \xi^{3N-4} d\xi = 1, \quad \xi = \alpha\rho \quad (13)$$

A expansão de $\chi_{k\nu}(\rho)$ terá a forma ^(19, 25):

$$\chi_{k\nu}(\rho) = \sum_n a_{nk\nu} \phi_{nk\nu}(\alpha\rho) \quad (14)$$

Tomando-se os elementos de matriz, nesta nova base, dos operadores existentes no sistema (eqs. (2.1.30)), podemos transformá-lo numa equação matricial de autovalores, a saber ⁽¹⁹⁾

$$\sum_n a_{nk\nu} \langle \phi_{nk\nu} | T | \phi_{n'k'\nu} \rangle + \sum_{n',k',\nu'} a_{n'k'\nu'} \langle \phi_{nk\nu} | V_{k\nu,k'\nu'} | \phi_{n'k'\nu'} \rangle = -\chi^2 a_{nk\nu} \quad (15)$$

onde

$$T' = \frac{1}{\rho^{3N-4}} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^{2N-4} \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{k(k+3N-5)}{\rho^2} \quad (16)$$

\bar{e} o operador da energia cinética e $\chi^2 = 2|E|$, $E < 0$ (estados ligados).

Num cálculo real devemos cortar as expansões das eqs. (14) e (2.1.20) para valores razoáveis de n e k . O parâmetro α contido nas funções nos diz que para cada α fixo as funções são uma base completa, ou seja, no limite $n \rightarrow \infty$ a família de bases com parâmetro α deve fornecer um mesmo resultado.

Uma vez que tenhamos o sistema de eqs. (15) podemos resolvê-lo pelos métodos usuais de diagonalização, obtendo simultaneamente, os estados fundamental e excitado para um mesmo número quântico. Podemos também, quando se queira, obter a função de onda na representação das coordenadas. O parâmetro α pode também ser usado de uma maneira variacional, o que quer dizer que podemos procurar o α que nos forneça o melhor valor para a energia do estado fundamental. Como já apontamos, quando n for suficientemente grande o cálculo não será sensível à mudança do parâmetro.

A escolha, quase que natural, para o conjunto $\{\phi_{nk\nu}\}$ são as funções do oscilador harmônico generalizado (19,25). Estas funções, como já vimos, são a solução das eqs. (2.1.30) para um potencial do tipo oscilador harmônico entre pares de partículas e é o único exemplo que conhecemos de interação entre pares que leva a separação das eqs. (2.1.30). As funções do oscilador (eq. (4)) formam um conjunto completo e surgem de um potencial físico. De modo análogo utilizam-se expansões de funções de onda,

para o problema de dois corpos (cf. eq. (2.1.8)), numa base de funções do oscilador harmônico usual⁽²⁸⁾.

Uma crítica que costuma ser feita em relação às funções do oscilador (eq. (4)) é o fato de que elas não têm o comportamento das funções $\chi_{k\nu}(\rho)$ no infinito. Para estas temos

$$\chi_{k\nu}(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\alpha\rho} \quad (17)$$

enquanto que para as funções do oscilador harmônico generalizado ϕ_{nk}

$$\phi_{nk}(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (18)$$

Esta discrepância pode ser corrigida como o faz H.T. Coelho⁽¹⁹⁾. Contudo, como ele próprio assinala^(19,29), para problemas como o cálculo da energia de ligação, não haverá diferença sensível.

Para o problema de três corpos, as funções do oscilador harmônico generalizado (eq. (4)) têm a forma

$$\phi_{nk} = \left[\frac{2n!}{\Gamma(k+n+3)} \right]^{1/2} \rho^{2k} e^{-\frac{1}{2}\alpha\rho^2} {}_1F_1(-n, k+3, \alpha\rho^2) \quad (19)$$

e teremos para a energia cinética os elementos de matriz

$$\langle \phi_{nk} | T | \phi_{n'k'} \rangle = \alpha \delta_{kk'} \left[(2n+k+3) \delta_{nn'} + \sqrt{n(n+k+2)} \delta_{n-1, n'} + \sqrt{n'(n'+k'+2)} \delta_{n, n'-1} \right] \quad (20)$$

Os elementos de matriz $V_{k\nu, k'\nu'}$, para o potencial de

Coulomb (como veremos adiante) tem a forma

$$V_{k\nu, k'\nu'} \propto \frac{1}{\rho} \quad (21)$$

e os elementos de matriz deste operador na base dos ϕ_{nk} serão

$$\begin{aligned} \langle \phi_{nk} | V_{k\nu, k'\nu'} | \phi_{n'k'} \rangle &\propto \int \phi_{nk} \frac{1}{\rho} \phi_{n'k'} \rho^5 d\rho \\ &\propto \sqrt{\pi} \left[\frac{n! n'!}{(k+n+2)! (k'+n'+2)!} \right]^{1/2} \sum_{m=0}^n \sum_{\ell=0}^{n'} (-1)^m \binom{n+k+2}{n-m} \frac{1}{m!} (-1)^\ell \\ &\times \binom{n'+k'+2}{n'-\ell} \frac{1}{\ell!} \frac{[(k+k'+2m+2\ell+3)!!]}{2 \left(\frac{k}{2} + \frac{k'}{2} + m + \ell + 2 \right)} \end{aligned} \quad (22)$$

Outros conjuntos também utilizados para a solução do sistema (eq. (2.1.30)) são:

$$\alpha^3 \left[\frac{n!}{(n+5)!} \right]^{1/2} L_n^{(5)}(\alpha\rho) e^{-\frac{1}{2}\alpha\rho} \quad (23)$$

proposto por Visschers et al. (30), e

$$N_{sn} (b\rho)^{5/2} L_n^s(b\rho) e^{-b\rho/2} \quad (24)$$

proposto por Demin et al. (31). Note-se que este último conjunto depende de dois parâmetros b e s que devem ser variados levando-se em conta a melhor convergência da expansão (eq. (14)). Além disso, pode-se expressar o parâmetro s como

$$s = s_0 + \gamma k \quad (25)$$

onde k vem dos harmônicos- k utilizados. Estes dois conjuntos visam o limite assintótico correto, entretanto, ao contrário do que ocorre com as funções do oscilador, não surgem de um potencial físico.

CAPÍTULO 3

ELEMENTOS DE MATRIZ DO POTENCIAL PARA O PROBLEMA COULOMBIANO DE TRÊS CORPOS

3.1 - O Potencial nas Novas Coordenadas

A interação eletrostática é um dos exemplos para potenciais que dependem apenas das distâncias entre pares de partículas $r_{ij} = |x_i - x_j|$. Para escrevê-lo, nas coordenadas de Jacobi, devemos encontrar r_{ij} em função dos ξ_α (cf. eq. (2.1.9)). No caso de três corpos temos

$$\vec{\xi}_1 = \sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \quad (1)$$

$$\vec{\xi}_2 = \sqrt{\frac{m_3 (m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3}} \left(\frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2} - \vec{x}_3 \right)$$

Achar as coordenadas relativas das partículas 1 e 2 é trivial. Das eqs. (1) temos

$$\vec{x}_1 - \vec{x}_2 = \sqrt{\frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}} \vec{\xi}_1 \quad (2)$$

Para encontrar $\vec{x}_2 - \vec{x}_3$ podemos, por exemplo, fazer

$$a\vec{\xi}_1 + b\vec{\xi}_2 = \vec{x}_2 - \vec{x}_3 \quad (3)$$

Substituindo os valores da eq. (1) na eq. (3), obtemos:

$$a \sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) + b \sqrt{\frac{m_3 (m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3}} \left[\frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2} - \vec{x}_3 \right] = \vec{x}_2 - \vec{x}_3 \quad (4)$$

Lembrando que x_1 , x_2 e x_3 são independentes, teremos

$$a = -\sqrt{\frac{m_1}{m_2(m_2 + m_1)}} \quad , \quad b = \sqrt{\frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_3(m_1 + m_2)}} \quad (5)$$

logo,

$$\sqrt{\frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_3(m_1 + m_2)}} \xi_2 - \sqrt{\frac{m_1}{m_2(m_1 + m_2)}} \xi_1 = \vec{x}_2 - \vec{x}_3 \quad (6)$$

De modo análogo temos

$$\sqrt{\frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_3(m_1 + m_2)}} \xi_2 + \sqrt{\frac{m_2}{m_1(m_1 + m_2)}} \xi_1 = \vec{x}_1 - \vec{x}_3 \quad (7)$$

Quando $m_1 = m_2 = m_3 = m$, absorvendo a massa em ξ_1 e ξ_2 , as coordenadas relativas terão a forma (6)

$$\sqrt{2} \xi_1 = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$$

$$\sqrt{\frac{3}{2}} \xi_2 - \frac{\xi_1}{\sqrt{2}} = \vec{x}_2 - \vec{x}_3 \quad (8)$$

$$\sqrt{\frac{3}{2}} \xi_2 + \frac{\xi_1}{\sqrt{2}} = \vec{x}_1 - \vec{x}_3$$

De maneira geral, para um potencial que dependa apenas

da distância entre pares de partículas, teremos a seguinte forma funcional:

$$\begin{aligned}
 V_{123}(\xi_1, \xi_2) = & V_{12} \left[\left| \sqrt{\frac{m_1+m_2}{m_1 m_2}} \xi_1 \right| \right] + V_{13} \left[\left| \sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{m_3(m_1+m_2)}} \xi_2 \right. \right. \\
 & \left. \left. + \sqrt{\frac{m_2}{m_1(m_1+m_2)}} \xi_1 \right| \right] + V_{23} \left[\left| \sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{m_3(m_1+m_2)}} \xi_2 \right. \right. \\
 & \left. \left. - \sqrt{\frac{m_1}{m_2(m_1+m_2)}} \xi_1 \right| \right] \quad (9)
 \end{aligned}$$

No formalismo dos harmônicos-k utilizamos as novas variáveis (eqs. (2.2.10)).

$$\begin{aligned}
 A \cos \lambda &= \frac{\xi_1^2 - \xi_2^2}{\rho^2} \\
 A \sin \lambda &= \frac{2\xi_1 \xi_2}{\rho^2} \quad (10) \\
 \rho^2 &= \xi_1^2 + \xi_2^2
 \end{aligned}$$

Desenvolvendo $(a\xi_1 + b\xi_2) \cdot (a\xi_1 + b\xi_2)$ e substituindo ξ_1 e ξ_2 das eqs. (10) encontramos (11,12)

$$\left| b\xi_2 + a\xi_1 \right| = \rho \left(\frac{a^2+b^2}{2} \right)^{1/2} \left[1 + \frac{a^2-b^2}{a^2+b^2} A \cos \lambda + \frac{2ba}{a^2+b^2} A \sin \lambda \right]^{1/2} \quad (11)$$

Podemos notar que

$$\left(\frac{a^2-b^2}{a^2+b^2} \right)^2 + \left(\frac{2ba}{a^2+b^2} \right)^2 = 1 \quad (12)$$

o que nos leva a interpretar estes coeficientes como senos e cosenos, de um certo ângulo δ

$$\cos \delta = \frac{a^2 - b^2}{a^2 + b^2} \quad (13)$$

$$\text{sen } \delta = \frac{2ab}{a^2 + b^2}$$

Portanto, fazendo uso da eq. (11) temos para

$$\left| \sqrt{\frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_3(m_1 + m_2)}} \xi_2 + \sqrt{\frac{m_2}{m_1(m_1 + m_2)}} \xi_1 \right| = \rho \left(\frac{a^2 + b^2}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[1 + A \cos \delta \cos \lambda + A \text{sen } \delta \text{sen } \lambda \right] \quad (14)$$

$$= \rho \left(\frac{a^2 + b^2}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[1 + A \cos (\lambda - \delta) \right]$$

$$\delta = \cos^{-1} \left(\frac{a^2 - b^2}{a^2 + b^2} \right) = \cos^{-1} \left(\frac{m_2 m_3 - m_1 m_1 - m_1 m_2 - m_1 m_3}{m_2 m_3 + m_1 m_1 + m_1 m_2 + m_1 m_3} \right) \quad (15)$$

$$a^2 + b^2 = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_3} \quad (16)$$

Do mesmo modo para

$$\left| \sqrt{\frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_2(m_1 + m_2)}} \xi_2 - \sqrt{\frac{m_1}{m_2(m_1 + m_2)}} \xi_1 \right|$$

$$\delta = \cos^{-1} \left(\frac{m_1 m_3 - m_1 m_2 - m_2 m_2 - m_2 m_3}{m_1 m_3 + m_1 m_2 + m_2 m_2 + m_2 m_3} \right) \quad (17)$$

$$a^2 + b^2 = \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \quad (18)$$

No caso simples de $\left| \sqrt{\frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}} \xi_1 \right|$, $b = 0$ (cf. eq.

(2)) e portanto $\delta = 2\pi$, logo

$$\left| \sqrt{\frac{m_1+m_2}{m_1 m_2}} \xi_1 \right| = \rho \sqrt{\frac{m_1+m_2}{2m_1 m_2}} \left[1 + A \cos \lambda \right] \quad (19)$$

Se a situação investigada for a do íon $e^-e^+e^-$, ou seja, três massas iguais, temos ⁽¹²⁾

$$\begin{aligned} \cos \delta &= -\frac{1}{2} \\ \text{sen} \delta &= \frac{\sqrt{3}}{2} \end{aligned} \quad (20)$$

logo,

$$\delta = \frac{2\pi}{3} \quad (21)$$

Quando estudamos sistemas como o íon H^- ou o átomo do Hélio, devemos separar duas situações: uma em que consideramos a massa do núcleo infinita e outra em que utilizamos as massas reais. A escolha depende da aproximação desejada.

No caso em que usamos as massas reais temos da eq. (17)

$$\delta = \cos^{-1} \left(-\frac{m}{m+M} \right) \quad (22)$$

onde consideramos $m_1 = m_2 = m$ e $m_3 = M$ para melhor aproveitar a simetria das equações.

Quando fizermos a massa do núcleo tender ao infinito,

$$\delta = \cos^{-1}(0) = \frac{\pi}{2} \quad (23)$$

Portanto, para o caso em que duas das três massas são iguais teremos, das eqs. (11), (14) e (22), que a forma do potencial de Coulomb será:

$$V_{123} = \frac{1}{\rho} \left[\frac{\sqrt{2}}{a} (1+\text{Acos}\lambda)^{-1/2} - Z \sqrt{\frac{2}{a^2+b^2}} \left(1+\text{Acos}(\lambda-\delta) \right)^{-1/2} \right. \\ \left. - Z \sqrt{\frac{2}{a^2+b^2}} \left(1+\text{Acos}(\lambda+\delta) \right)^{-1/2} \right] \quad (24)$$

Podemos chegar a uma forma ainda mais conveniente utilizando a relação (11,27)

$$(1-z)^P = 2^{2t+p} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \Gamma(t)\Gamma(t+p+\frac{1}{2}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+t)(-P)_n}{\Gamma(n+2t+p+1)} C_n^t(z) \quad (25)$$

$$-1 < z < 1 \quad \begin{cases} t > -1-2p & \text{se } t \geq 0 \\ t > -p-\frac{1}{2} & \text{se } -\frac{1}{2} < t \leq 0 \end{cases}$$

Os C_n^t são polinômios de Gegenbauer (27). No nosso caso podemos colocar $p = -\frac{1}{2}$ e $t = 1$. Finalmente, o potencial de Coulomb terá a forma da expansão

$$V_{123} = \frac{2^{7/2}}{\pi\rho} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)(-1)^n}{(2n+3)(2n+1)} \left[\frac{\sqrt{2}}{a} C_n^1(\text{Acos}\lambda) \right. \\ \left. - Z \sqrt{\frac{2}{a^2+b^2}} C_n^1(\text{Acos}(\lambda-\delta)) - Z \sqrt{\frac{2}{a^2+b^2}} C_n^1(\text{Acos}(\lambda+\delta)) \right] \quad (26)$$

3.2 - Os Elementos de Matriz

Os elementos de matriz do potencial são dados pela eq. (2.1.20),

$$V_{k\nu, k'\nu'}(\rho) = \int u_{k\nu} V_{123} u_{k'\nu'} d\Omega \quad (1)$$

Estamos investigando o nível fundamental, com momentum angular total nulo, de sistemas nos quais duas das três partículas são idênticas. A função de spin das partículas idênticas será, portanto, o singlete. Para que a função de onda total do sistema (eq. (2.1.29)), permaneça antisimétrica pela troca das coordenadas espaciais destas duas partículas, é necessário que os harmônicos- k que aparecem na expansão da função de onda (eq. (2.1.29)) sejam simétricos, relativamente à troca das coordenadas destas partículas (que por conveniência são as etiquetadas 1 e 2). Os com esta propriedade são precisamente os de ν positivo (cf. eq. (2.2.13)).

Substituindo a forma explícita destes harmônicos na integral que define os elementos $V_{k\nu, k'\nu'}$, obtemos (7):

$$V_{k\nu, k'\nu'}(\rho) = - \frac{2\sqrt{(k+2)(k'+2)}}{\pi} \int_0^1 A^{\nu+\nu'+1} P_{(k+2\nu)/4}^{(\nu, 0)}(1-2A^2) \times P_{(k'-2\nu')/4}^{(\nu', 0)}(1-2A^2) dA \int_0^{2\pi} V_{123} \cos(\nu\lambda) \cos(\nu'\lambda) d\lambda \quad (2)$$

Utilizando a expansão do potencial (eq.(3.1.26)), temos

$$V_{k\nu, k'\nu'}(\rho) = - \frac{8}{3\pi\rho} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)(-1)^n}{(2n+3)(2n+1)} \frac{6\sqrt{(k+2)(k'+2)}}{\pi} \int_0^1 A^{\nu+\nu'+1} \times P_{(k-2\nu)/4}^{(\nu, 0)}(1-2A^2) P_{(k'-2\nu')/4}^{(\nu', 0)}(1-2A^2) dA \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \left[\cos\left\{(\nu+\nu')\lambda\right\} + \cos\left\{|\nu-\nu'|\lambda\right\} \right] \left[\frac{\sqrt{2}}{a} C_n^1(A\cos\lambda) - Z \sqrt{\frac{2}{a^2+b^2}} C_n^1\left\{A\cos(\lambda-\delta)\right\} - Z \sqrt{\frac{2}{a^2+b^2}} C_n^1\left\{A\cos(\lambda+\delta)\right\} \right] d\lambda \quad (3)$$

As integrais que se encontram na integração em λ são

do tipo

$$\int_0^{2\pi} C_n^1(A \cos \lambda) \begin{cases} \cos m\lambda \\ \text{sen } m\lambda \end{cases} d\lambda = J_{nm} \quad (4)$$

na notação de Simonov (7). O seu resultado para $\cos(m\lambda)$ é

$$J_{nm} = \begin{cases} 2\pi A^m P_{(n-m)/2}^{(m,0)}(1-2A^2) (-1)^{(n-m)/2}, & n-m \text{ par} \\ 0, & n-m \text{ ímpar ou } < 0 \end{cases} \quad (5)$$

Para $\text{sen}(m\lambda)$ o resultado é nulo. Deste modo

$$\int_0^{2\pi} C_n^1(A \cos(\lambda \pm \delta)) \cos m\lambda = \cos(m\delta) J_{nm} \quad (6)$$

teremos, então como resultado da integração em λ da eq. (3)

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n \left\{ \left[\frac{\sqrt{2}}{a} - 2Z \sqrt{\frac{2}{a^2+b^2}} \cos((v+v')\delta) \right] J_{n(v+v')} + \left[\frac{\sqrt{2}}{a} - 2Z \sqrt{\frac{2}{a^2+b^2}} \cos(|v-v'|\delta) \right] J_{n|v-v'|} \right\} \quad (7)$$

onde

$$\sum_n A_n J_{nm} = \frac{2^{7/2}}{\pi\rho} \sum_n \frac{(n+1)(-1)^n}{(2n+3)(2n+1)} J_{nm} \quad (8)$$

O somatório em n , apesar de formalmente variar de zero ao infinito, é em verdade controlado pelo grau dos polinômios de Jacobi e pelas propriedades dos J_{nm} . Convencionemos:

$$\begin{aligned}
 v+v' &= N_{\max} \\
 |v-v'| &= N_{\min} \\
 \frac{k+2v}{4} &= N_1 \\
 \frac{k'+2v'}{4} &= N_2
 \end{aligned} \tag{9}$$

Pela definição dos v_{nm} (eq. (5)) podemos verificar que na eq.(7) a soma terá início em N_{\min} . Notando que os polinômios de Jacobi $P_n^{(\alpha, \beta)}(1-2A^2)$ tem grau $2n$ em A , a maior potência em A dos harmônicos $\cos-k$ envolvidos é $2N_1+2N_2$ e para estas potências as integrais em A terão a forma:

$$\int_0^1 A \, dA \, A^{N_{\max}+2N_1+2N_2} J_{n, N_{\min}} = \int_0^1 A \, dA \, A^{N_{\max}+N_{\min}+2N_1+2N_2} P_{\frac{n-N_{\min}}{2}}^{(N_{\min}, 0)}(1-2A^2) \tag{10}$$

$$\int_0^1 A \, dA \, A^{N_{\max}+2N_1+2N_2} J_{n, N_{\max}} = \int_0^1 A \, dA \, A^{2N_{\max}+2N_1+2N_2} P_{\frac{n-N_{\max}}{2}}^{(N_{\max}, 0)}(1-2A^2)$$

Se fizermos a mudança de variáveis $x = 1-2A^2$ as integrais das eqs. (10) serão equivalentes a (32) :

$$\int_{-1}^1 (1-x)^\rho P_n^{(\alpha, 0)}(x) dx = \frac{2^{\rho+1} \Gamma(\rho+1) \Gamma(n+1) \Gamma(\alpha-\rho+n)}{n! \Gamma(\alpha-\rho) \Gamma(\rho+n+2)} \tag{11}$$

que só é diferente de zero para valores em que

$$n + \alpha \leq \rho \tag{12}$$

Aplicando esta condição nas eqs. (10); obtemos

$$\frac{n+N_{\min}}{2} \leq \frac{N_{\max}+N_{\min}}{2} + N_1 + N_2 \tag{13}$$

como condição para que as integrais sejam definidas. Além disso das condições sobre os J_{nm} temos (eqs. (5) e (10)) que o menor valor para n é

$$n = N_{\min} \quad (14)$$

Fazendo $j = n + N_{\min}/2$ podemos modificar a soma da eq. (8) para

$$\sum_{j=I_{\min}}^{I_{\max}} \frac{(2j - I_{\min} + 1)(-1)^{j - I_{\min}}}{(4j - 2I_{\min} + 3)(4j - 2I_{\min} + 1)} J_{(j - I_{\min})m} \quad (15)$$

onde

$$I_{\min} = N_{\min}$$

$$I_{\max} = \frac{N_{\max} + N_{\min}}{2} + N_1 + N_2$$

Em resumo, para calcular os elementos de matriz do potencial (eq. (3)), devemos efetuar a integração em λ , a soma que decorre de I_{\min} até I_{\max} , a substituição da forma explícita dos polinômios de Jacobi que ocorrem na integração e finalmente, efetuar as integrais das potências de A . Toda esta metodologia de cálculo pode ser sintetizada num programa de computador que realize cálculos algébricos. Isto será visto na próxima sub-seção.

3.3 - Cálculo Efetivo dos $V_{k\nu, k'\nu'}$

A nossa experiência no cálculo dos elementos de matriz do potencial, indicou como conveniente a utilização de um programa de computador que efetue cálculos algébricos, o que possibilita um controle acurado das cancelações que surgem do desenvolvimento dos polinômios, permitindo inclusive que se obtenham resul

elementos de matriz do potencial e no programa os chamamos de SUM, SUM1, Sua forma é

$$SUM=C*DS(J,IMIN,IMAX,(B**J*FACT(J,IMIN)*(-1)**J)) \quad (1)$$

DS é um comando de SCHOONSCHIP e soma no índice J, de IMIN até IMAX, a expressão contida nos parênteses. Isto traduz a soma que se faz nas integrais J_{nm} (cf. eq. (3.2.7)). A expressão FACT é dada por (cf. eq. (3.2.15))

$$FACT(J,IMIN)=(2*J-IMIN+1)/(4*J-2*IMIN+1)/(4*J-2*IMIN+3) \quad (2)$$

O termo B aparece para que se contem as potências em J. Cada termo $C*B^J$ será substituído pela expressão conveniente para a continuidade do cálculo.

Os índices IMIN e IMAX dependem do grau dos polinômios envolvidos na integração (cf. eq. (3.2.9)). Estes e outros índices que utilizamos são sugeridos pela estrutura do cálculo e são definidos por

$$\begin{aligned} NMAX &= v+v' \\ IMIN &= NMIN = |v-v'| \\ IDIF &= (NMAX-NMIN)/2 \\ N1 &= (k-2v)/4 \\ N2 &= (k'-2v')/4 \\ IMAX &= (NMAX+NMIN)/2+N1+N2 \\ M1 &= v \\ M2 &= v' \end{aligned} \quad (3)$$

O passo seguinte é a substituição dos C_0, C_1, \dots , multiplicados como os termos do somatório DS, por uma expressão conveniente, que corresponde à integração sobre λ na eq. (3.2.3)

ID, C0*B**N+=C01*A*	FAC (1)*JAPOL (N, 1, 1, A) +
C01*DT (N-1)*A*	FAC (1)*JAPOL (N, 1, 1, A)
ID, C1*B**N+=C11*	FAC (3)*JAPOL (N, 0, 0, A) -
C11*DT (N-1)*A**2	FAC (2)*JAPOL (N, 1, 2, A) -
ID, C2*B**N+=C21*A*	FAC (1)*JAPOL (N, 1, 1, A) -
C21*DT (N-2)*A**3	FAC (3)*JAPOL (N, 2, 3, A)
ID, C3*B**N+=C31*A*	FAC (1)*JAPOL (N, 1, 1, A) +
C31*DT (N-1)*A*	FAC (1)*JAPOL (N, 1, 1, A)
ID, C4*B**N+=C41*A**2	FAC (2)*JAPOL (N, 3, 4, A) -
C41*DT (N-3)*A**4	FAC (1)*JAPOL (N, 3, 4, A) -
ID, C5*B**N+=C51*	FAC (3)*JAPOL (N, 1, 2, A) -
C51*DT (N-1)*A**2	FAC (2)*JAPOL (N, 1, 2, A)
ID, C6*B**N+=C61*A**3	FAC (3)*JAPOL (N, 3, 5, A) -
C61*DT (N-4)*A**5	FAC (2)*JAPOL (N, 4, 5, A) -
ID, C7*B**N+=C71*A*	FAC (1)*JAPOL (N, 1, 1, A) -
C71*DT (N-2)*A**3	FAC (3)*JAPOL (N, 2, 3, A)
ID, C8*B**N+=C81*A*	FAC (1)*JAPOL (N, 1, 1, A) +
C81*DT (N-1)*A*	FAC (1)*JAPOL (N, 1, 1, A)
ID, C1=C11*FAC (3)	*JAPOL (0, 0, 0, A)
ID, C5=C51*FAC (3)	*JAPOL (0, 0, 0, A)

Tabela 2 - Integração em λ .

O comando ID perfaz este tipo de substituição e no exemplo acima a forma geral é

$$\begin{aligned}
 &ID, C*B**N+=C1*A**NMIN*FAC(NMIN)*JAPOL(N, NMIN, NMIN, A) + \\
 &C1*DT(N-NMIN-IDIF)*(-1)**IDIF*A**NMAX*FAC(NMAX) + \\
 &JAPOL(N, NMIN+IDIF, NMAX, A) \quad (4)
 \end{aligned}$$

onde

$$JAPOL(N, M, L, A) = P_{N-M}^{(L, 0)}(1-2A^2)$$

e $P_{N-M}^{(L, 0)}(1-2A^2)$ são polinômios de Jacobi que provêm da integração dos cosenos multiplicados pela expansão do potencial em polinômios de Gegenbauer C_n^1 (cf. eq. (3.2.3)). Também desta integração temos $FAC(K) = 2, 2, -1, \dots$ pois a soma

$$C_n^1(A \cos \lambda) - C_n^1(A \cos(\lambda-2\pi/3)) - C_n^1(A \cos(\lambda+2\pi/3))$$

aparece multiplicada por -1 ou 2 conforme $v+v'$ e $|v-v'|$ sejam ou não múltiplos de 3.

O segundo termo da soma do lado direito da eq. (4) só aparece quando $N1$ ou $N2$ não são nulos e isto é controlado no programa pe

la função $DT(N-NMIN-IDIF)$ que é uma função teta, i.é, se anula para $N < NMIN+IDIF$ e é igual a 1 para $N \geq NMIN+IDIF$. No caso em que $NMIN=0$ aparecerá o termo $B**0$ que corresponderá à substituição

$$C=C1*FAC(3)*JAPOL(0,0,0,A) \tag{5}$$

pois FAC tem multiplicidade 3, i.é, quando $NMIN=0$ teremos um múltiplo de 3 como argumento de FAC ; mais explicitamente

$$FAC(t) = 2,2,-1,2,2,-1,2,2,-1...$$

$$FAC(1) = 2.$$

$$FAC(2) = 2$$

$$FAC(3) = -1.$$

⋮

e $t = v+v' = NMAX$ ou $|v-v'| = NMIN$.

O resultado das substituições feitas na Tabela 2 referente ao programa será para SUM .

$$\begin{array}{l}
 SUM = \\
 + FACT(1,1)*JAPOL(1,1,1,A) \\
 * (-4.*A*CO1) \\
 + FACT(2,1)*JAPOL(2,1,1,A) \\
 * (.4.*A*CO1) \\
 + FACT(3,1)*JAPOL(3,1,1,A) \\
 * (-4.*A*CO1)
 \end{array}$$

Tabela 3 - SUM equivale a $V_{10,1;0,0}$

Neste momento devemos inserir os polinômios de Jacobi provenientes dos harmônicos-k para efetuarmos a integração na variável A .

```

ID, C01=CC*A*A**1*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(0,0,0,A)*ROOT(6)*2
ID, C11=CC*A*A**2*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(0,0,1,A)*ROOT(6)*4
ID, C21=CC*A*A**3*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(0,0,2,A)*12
ID, C31=CC*A*A**1*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(1,0,0,A)*ROOT(2)*6
ID, C41=CC*A*A**4*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(0,0,3,A)*ROOT(3)*8
ID, C51=CC*A*A**2*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(1,0,1,A)*ROOT(3)*8
ID, C61=CC*A*A**5*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(0,0,4,A)*ROOT(15)*4
ID, C71=CC*A*A**3*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(1,0,2,A)*ROOT(15)*4
ID, C81=CC*A*A**1*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(2,0,0,A)*ROOT(30)*2
    
```

Tabela 4 - Colocam-se os Polinômios de Jacobi.

A forma geral da substituição é

$$C1=CC*A**NMAX*JAPOL(N1,0,M1,A)*JAPOL(N1,0,M2,A)*PMIN(1)*PMIN(2)$$

onde

$$PMIN(1) = \sqrt{k+2} \quad , \quad PMIN(2) = \sqrt{2} \sqrt{k'+2} \quad \text{se } v \text{ e } v' \neq 0$$

$$PMIN(1) = \sqrt{k+2} \quad , \quad PMIN(2) = \sqrt{k'+2} \quad \text{se } v \text{ ou } v' = 0$$

estes valores estão contidos na definição dos harmônicos-k (cf. eq. (2.2.9)). Convém em termos do programa colocar diretamente o produto PMIN(1)*PMIN(2) expresso pelos termos

$$ROOT(M)*N \quad , \quad ROOT(M) = \sqrt{M}$$

Teremos então para SUM por exemplo (Tab. 5).

Faz-se em seguida a colocação da forma explícita dos polinômios de Jacobi (Tab. 6).


```

SUM =
+ FACT(1,1)*JAPOL(1,1,1,A)*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(0,0,0,A)*ROOT(6)
* (-8.*A**3*CC)
+ FACT(2,1)*JAPOL(2,1,1,A)*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(0,0,0,A)*ROOT(6)
* (8.*A**3*CC)
+ FACT(3,1)*JAPOL(3,1,1,A)*JAPOL(2,0,1,A)*JAPOL(0,0,0,A)*ROOT(6)
* (-8.*A**3*CC)

```

Tabela 5 - Saída de SUM após a substituição da Tab. 4.

```

ID, JAPOL(N1+, N2+, K+, A) = (-1)**N1*A2**N1*(-1)**-N2*
      A2**-N2*DS(J, 0, N1-N2, ((-1)**J*DB(N1-N2+K, J)*
      DB(N1-N2, N1-N2-J)*UMA2**J/A2**J))
ID, UMA2=1-A2
ID, A2=A**2

```

Tabela 6 - Polinômios de Jacobi.

onde $DB(M, N)$ é o coeficiente do Binômio $\binom{M}{N}$.

A saída no programa para este passo é do tipo

```

SUM =
+ FACT(1,1)*ROOT(6)
* (-24.*A**3*CC + 96.*A**5*CC - 80.*A**7*CC)
+ FACT(2,1)*ROOT(6)
* (48.*A**3*CC - 264.*A**5*CC + 448.*A**7*CC - 240.*A**9*CC)
+ FACT(3,1)*ROOT(6)
* (-72.*A**3*CC + 576.*A**5*CC - 1632.*A**7*CC + 1920.*A**9*
  CC - 800.*A**11*CC)

```

Tabela 7 - Saída após colocação da forma explícita dos Polinômios de Jacobi.

Agora integramos as potências de A

$$\int_0^1 A^N dA = \frac{1}{N+1} \quad \text{DEN}(N+1)$$

e no programa o correspondente à integração é a substituição contida na Tabela 8.

```
ID, A**N+=DEN(N+1)
ID, CC=-3
```

- Tabela 8 - Substituição para a integração em A.

a constante CC=-3 surge do fato de colocarmos $-\frac{8}{3} \frac{1}{\pi p}$ em evidên -
cia na expansão da eq. (3.1.20). O resultado da integração em SUM
que equivale ao elemento de matriz $V_{10,1;00}$ pode ser visto na
Tabela 9.

```
SUM =
+ 72.*FACT(1,1)*ROOT(6)*DEN(4)
- 288.*FACT(1,1)*ROOT(6)*DEN(6)
+ 240.*FACT(1,1)*ROOT(6)*DEN(8)
- 144.*FACT(2,1)*ROOT(6)*DEN(4)
+ 792.*FACT(2,1)*ROOT(6)*DEN(5)
- 1344.*FACT(2,1)*ROOT(6)*DEN(8)
+ 720.*FACT(2,1)*ROOT(6)*DEN(10)
+ 216.*FACT(3,1)*ROOT(6)*DEN(4)
- 1728.*FACT(3,1)*ROOT(6)*DEN(6)
+ 4896.*FACT(3,1)*ROOT(6)*DEN(8)
- 5760.*FACT(3,1)*ROOT(6)*DEN(10)
+ 2400.*FACT(3,1)*ROOT(6)*DEN(12)
```

Tabela 9 - Resultado da integração em A.

Substituindo os valores numéricos de FACT, ROOT e DEN podemos obter o resultado final de todos os quocientes e com uma manipulação simples porém trabalhosa das expressões como a contida na Tabela 9, podem também ser encontrados os elementos $A_{k'v}^{k'v'}$ = - $\frac{3\pi\rho}{8} v_{k'v, k'v'}$ na forma de quocientes (11). Os resultados finais numéricos para os elementos $A_{k'v}^{k'v'}$ para este programa são encontrados após a substituição da Tabela 10 e estão contidos na Tabela 11.

ID, FACT (K+, N+) = (2*K - N + 1) / (4*K-2*N+1) / (4*K-2*N+3)
ID, DEN (N+) = 1/N
ID, ROOT (2) = 1.414213562
ID, ROOT (3) = 1.732050808
ID, ROOT (6) = 2.449489743
ID, ROOT (15) = 3.872983346
ID, ROOT (30) = 5.47725575

Tabela 10 - Substituição dos valores numéricos.

SUM = + 0.2055515868
SUM1 = - 8.7549749944E-2
SUM2 = + 0.1738883562
SUM3 = - 0.4475087964
SUM4 = + 1.1827416113E-2
SUM5 = + 0.133573837
SUM6 = + 4.8091555489E-2
SUM7 = - 0.5233255798
SUM8 = + 1.1292973485

Tabela 11 - Valores de $A_{101}^{k'v'}$ para $k' = 0, 2, 4, 6, 8$.

Este procedimento de cálculo em que utilizamos o programa SCHOONSCHIP, com base nos resultados da Seção 3.2, tem a vantagem de permitir um controle apurado em todas as passagens, eliminando as desvantagens usuais dos cálculos em que há muitos somatórios e cancelações (o que em geral aumenta muito o erro de truncamento). Podemos, portanto, obter os valores dos elementos de matriz para ordens bastante altas de k .

Um outro modo de atacar o problema consiste em procurar relações fechadas para os elementos de matriz do potencial. Estas relações existem para o potencial de Coulomb e foram obtidas por H. Coelho et al. (12). Nós não testamos estas relações, porém elas provêm da mesma sistemática de cálculo que utilizamos e na prática também levariam a somatórios.

SISTEMAS COULOMBIANOS DE TRÊS CORPOS

Os exemplos típicos para estados ligados coulombianos de três corpos são o átomo de Hélio e os íons similares, tais como: H^- , Li^+ , Be^{++} Experimentalmente, a produção destes íons, quando seus núcleos são mais pesados, torna-se limitada pela quantidade de energia investida no processo, além de fenômenos como captura eletrônica, que interviriam na sua formação. Alguns outros exemplos mais exóticos são sistemas como o íon negativo do positrônio $e^-e^+e^-$ (33) e o seu reflexo $e^+e^-e^+$. O primeiro poderia se formar em metais de pequena densidade eletrônica, quando são injetados pósitrons termalizados (34). Outro possível sistema é o hidrogênio mais um pósitron; neste não se consegue determinar um estado ligado, mas uma ressonância, no estudo do espalhamento pósitron-hidrogênio (35,36). Finalmente, temos os sistemas em que além do próton hajam mésons envolvidos, em particular é bastante estudado o muônio (37), equivalente do hidrogênio porém com um múon no lugar do próton.

No estudo dos íons helioides podemos, de uma maneira ingênua, encontrar estimativas para o valor da energia do estado fundamental utilizando o princípio de incerteza (38). Com este princípio temos para valores dos momenta dos elétrons

$$P_1 \sim \frac{1}{r_1} \quad \text{e} \quad P_2 \sim \frac{1}{r_2} \quad (1)$$

onde r_1 e r_2 são as dimensões da região de localização dos elétrons 1 e 2. Decorre que a energia cinética será

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) \quad (2)$$

A energia potencial vinda da interação dos elétrons com o núcleo de carga $-Z$ é:

$$-Z \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (3)$$

e a energia da interação entre os elétrons é da ordem de

$$\frac{1}{r_1 + r_2} \quad (4)$$

A soma das quantidades definidas acima

$$E(r_1, r_2) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) - Z \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{1}{r_1 + r_2} \quad (5)$$

representa a energia total do sistema e o seu menor valor é aquele que buscamos para o nível fundamental. O mínimo ocorre em

$$r_1 = r_2 = \frac{1}{Z - \frac{1}{4}} \quad (6)$$

e substituindo na eq. (5) obtemos para os íons helioides

$$E \sim \left(Z - \frac{1}{4} \right)^2 \quad \text{u.a.} \quad (7)$$

Os valores de E para alguns casos são dados na Tab. 1.

	H ⁻	He	Li ⁺
E _{princípio de inc.}	-0,56	-3,06	-7,56
E _{experimental}	-0,5277	-2,90	-7,28

Tabela 1 - Valores da energia do estado fundamental, usando o princípio de incerteza e experimental de H⁻, He e Li⁺.

Os métodos variacionais, que consistem essencialmente em minimizar a energia⁽¹⁵⁾

$$E(\phi) = \frac{\int \phi H \phi d\tau}{\int \phi^2 d\tau} \quad (8)$$

onde H é o hamiltoniano do problema, ϕ uma função teste e a integração é feita em todo o espaço, podem fornecer valores muitíssimos acurados; entretanto, necessitam de um conhecimento prévio da função de onda e dependem muitas vezes do ajuste de um grande número de parâmetros, cuja significação física é difícil. Ainda no caso dos hélióides uma função simples para o cálculo variacional é

$$\phi = e^{-(Z-\sigma)r_1} e^{-(Z-\sigma)r_2} \quad (9)$$

que representa o produto de duas funções de onda hidrogenóides, para o estado fundamental, e σ é um termo que dá conta do mascaramento da carga do núcleo por um dos elétrons em relação ao outro. Com o hamiltoniano usual

$$H = -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - Z\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (10)$$

obtêm-se para $\sigma = 5/16$ o valor m̃nimo da energia (eq. (8))

$$E = - \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 \text{ u.a.} \quad (11)$$

cujos valores para os sistemas da Tab. 1 s̃o vistos na Tab. 2.

	H ⁻	He	Li ⁺
E _{variacional}	-0.473	-2.848	-7.223

Tabela 2 - Valores da energia do estado fundamental, utilizando o princ̃pio variacional.

Note-se que o valor de H⁻ ño atinge a energia de ligaç̃o (a diferença do resultado da eq. (7)).

Pekeris (39) utilizando coordenadas u, v, w definidas por

$$\begin{aligned} \vec{u} &= \vec{r}_2 + \vec{r}_{12} - \vec{r}_1, \\ \vec{v} &= \vec{r}_1 + \vec{r}_{12} - \vec{r}_2, \\ \vec{w} &= 2(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_{12}) \end{aligned} \quad (12)$$

propõs uma funç̃o tentativa, para o m̃todo variacional dada por

$$\psi = \exp \left[-(u + v + w) \right] F(u, v, w) \quad (13)$$

-com

$$F(u, v, w) = \sum_{\ell, m, n} A(\ell, m, n) L_{\ell}(u) L_m(v) L_n(w) \quad (14)$$

onde as funç̃es $L_j(z)$ s̃o polinômios de Laguerre. O valor obtido para H⁻ fazendo o c̃lculo com $\ell+m+n$ atē 16 e envolvendo 444 parâmetros $A(\ell, m, n)$ ē

$$E_{H^-} = - 0,527751006 \text{ u.a.} \quad (15)$$

e para o Hélio

$$E_{\text{He}} = - 2,90372 \text{ u.a.} \quad (16)$$

Utilizando o mesmo formalismo Frost et al. (40) chegaram com 50 termos em $F(u,v,w)$ ao seguinte valor para a energia de ligação de $e^-e^+e^-$

$$E_{e^-e^+e^-} = - 2.62 \text{ u.a.} \quad (17)$$

Mais recentemente foram realizados cálculos com os métodos de configuração-interação (41) e equações de Fadeev (42), sendo que este último fornece valores para $e^-e^+e^-$. Os resultados destes dois últimos grupos estão sumarizados na Tab. 3.

	$e^-e^+e^-$	H^-	He
C-I	---	---	-2,85649
Fadeev	-0,25142	-0,52798	-2,8837

Tabela 3 - Valores da energia do estado fundamental, utilizando os métodos de configuração (C-I) e as equações de Fadeev.

Ainda um outro problema de interesse, devido às aplicações em física nuclear, é saber o número de estados ligados dos íons, em particular do H^- (43,44) (muito usado recentemente como projétil em aceleradores de partículas).

RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 - Autovalores e Autovetores

Obtivemos no segundo Capítulo um sistema de equações diferenciais acopladas via uma expansão da função de onda total do problema de três corpos $\Psi(\rho; \Omega)$ em harmônicos-k (cf. equação (2.1.29)). Com o intuito de resolver o sistema, realizamos uma segunda expansão, desta vez das ondas parciais $\chi_{k\nu}(\rho)$ (cf. eq. (2.3.14)) em um conjunto completo de funções, conseguindo deste modo obter uma equação matricial de autovalores (cf. eq. (2.3.15)); nós empregamos as funções do oscilador harmônico generalizado $\phi_{nk}(\alpha\rho)$ (cf. eq. (2.3.19))

$$\Psi(\rho; \Omega) = \sum_{k\nu} \chi_{k\nu}(\rho) u_{k\nu}(\Omega) \quad (1)$$

$$\chi_{k\nu}(\rho) = \sum_n Q_{nk\nu} \phi_{nk}(\alpha\rho) \quad (2)$$

$$\phi_{nk}(\alpha\rho) = \left[\frac{2n!}{\Gamma(k+n+3)} \right]^{1/2} \rho^{2k} e^{-\frac{1}{2}\alpha\rho^2} {}_1F_1(-n, k+3, \alpha\rho^2) \quad (3)$$

Conforme explicamos no Capítulo 2 estas expansões devem ser interrompidas para algum valor de k e n se queremos encontrar os autovalores da eq. (2.3.15). Em geral, após fixarmos k e n, podemos procurar o parâmetro α que fornecerá o menor

autovalor; este procedimento equivale a um cálculo variacional. Entretanto, para um grande número de funções as quantidades calculadas não serão sensíveis à mudança do parâmetro α , em especial na vizinhança de um mínimo (19,25). Tendo em vista esta particularidade do uso da expansão de χ_{kV} , ao invés de para cada k e n fixados procurarmos o parâmetro α que otimiza o resultado, utilizaremos um único α que nos forneça um comportamento regular, i.é, que os valores calculados com este α , para os diversos k e n , estejam próximos dos ou sejam os melhores.

Com base nesta sistemática para encontrarmos o valor da energia do nível fundamental de um certo sistema devemos procurar o menor autovalor obtido com α , k e n fixados. Procedemos deste modo no estudo do átomo de He (com massa nuclear infinita) do íon H^- (com massa do próton M_p infinita e com seu valor real) e o íon $e^-e^+e^-$; calculando autovalores e autovetores com diversos valores de α , k e n .

No caso específico em que $k = 0$, ao invés de um sistema de equações (cf. eq. (2.1.30)), teremos uma única equação, com solução exata

$$\left[\frac{1}{\rho^5} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^5 \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{2E}{\hbar^2} - \frac{2}{\hbar} V_{00,00} \right] \chi_{00}(\rho) = 0 \quad (4)$$

cuja solução é do tipo $\chi_{00}(\rho) = N_0 e^{-k_0 \rho}$ e o valor para a energia é dado por

$$E = - \left[\frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \frac{A_{00,00}}{5} \right]^2 \text{ u.a.} \quad (5)$$

$$V_{00,00} = -\frac{1}{\rho} \frac{8}{3\pi} A_{00,00} \quad (6)$$

Nas Tabs. 1, 2, 3 e 4 estão contidos os valores da energia que obtivemos para os diferentes n , k e α .

k	n=9 $\alpha=0,5$	n=14 $\alpha=0,5$
0	-0.115281	-0.115281
2	-0.203794	-0.202314
4	-0.220021	-0.214318
6	-0.234499	-0.235417
8	-0.240796	-0.241886
10	-0.244796	-0.245849
12	-0.248105	

Tabela 1 - Autovalores da energia do íon e^+e^- em u.a.

k	n=9 $\alpha=0,7$	n=14 $\alpha=0,7$
0	-0.385068	-0.385068
2	-0.411513	-0.410829
4	-0.472267	-0.455140
6	-0.472607	-0.474052
8	-0.491866	-0.493991
10	-0.491933	-0.494065

Tabela 2 - Autovalores da energia do íon H^- (com massa do próton real) em u.a.

k	N=9 $\alpha=0,7$	N=14 $\alpha=0,7$
0	-0.385401	-0.385401
2	-0.411767	-0.411083
4	-0.478576	-0.457676
6	-0.478983	-0.480452
8	-0.498683	-0.500818
10	-0.506111	-0.510129

Tabela 3 - Autovalores da energia do íon H^{-} (com massa do próton $\rightarrow \infty$) em u.a.

k	n=9 $\alpha=1,8$	n=14 $\alpha=1,8$
0	-2.500017	-2.500017
2	-2.525135	-2.523696
4	-2.773994	-2.700426
6	-2.774572	-2.782179
8	-2.832803	-2.844403
10	-2.836355	-2.846499

Tabela 4 - Autovalores da energia do átomo de He (com massa do núcleo $\rightarrow \infty$) em u.a.

Os autovetores correspondentes a estes valores da energia nos dão os coeficientes da expansão (eq. (2.3.14))

$$X_{k\nu} = \sum a_{nk\nu} \phi_{nk} \quad (7)$$

Com estes coeficientes podemos construir as diversas ondas parciais $X_{k\nu}$ e ainda calcular a contribuição de cada uma destas à norma da função de onda com base em

$$\sum a_{nk}^2 \quad (8)$$

Na Tabela 5 damos a contribuição de cada onda parcial em termos de porcentagem para os íons $e^-e^+e^-$, H^- e para o átomo de He. Para o caso do átomo de He mostramos a forma da onda parcial χ_{00} , o que vale como um exemplo. Este gráfico está contido na Fig. 1.

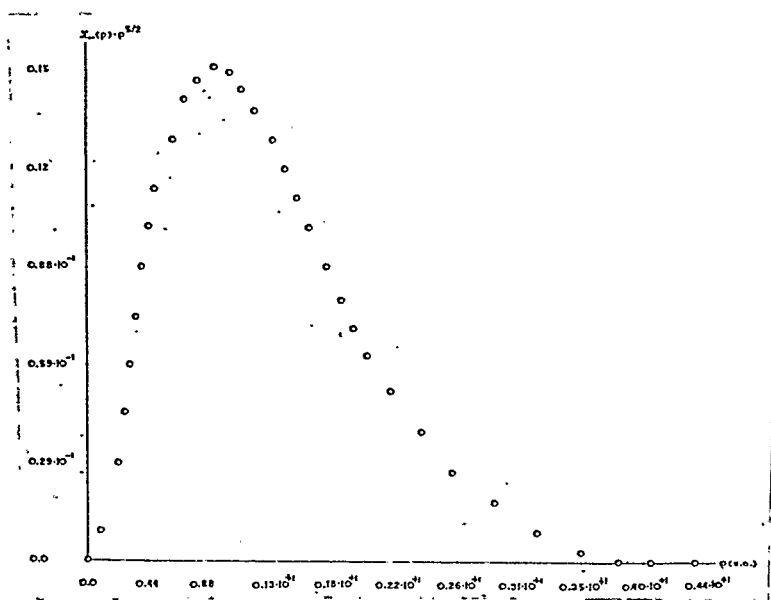


Figura 1 - Gráfico da onda parcial χ_{00} do átomo de He calculada com $k=10$ e multiplicada por $\rho^{5/2}$.

Devemos notar que na procura dos autovalores do sistema de equações (2.3.13) não fizemos um estudo rigoroso da precisão dos valores obtidos. Utilizamos apenas como argumento de plausibilidade o fato de que estes cálculos foram repetidos com diversas rotinas de diagonalização (como as do EISPACK⁽⁴⁵⁾, do IMSL⁽⁴⁶⁾ e outras fornecidas pelo Laboratório de Cálculo do

k	v	$\alpha = 0,5$ $e^-e^+e^-$	$\alpha = 0,7$ H^-	$\alpha = 1,8$ He
0	0	70,16	83,66	94,43
2	1	19,83	1,43	0,42
4	2	1,03	7,77	3,39
4	0	4,64	3,00	1,30
6	3	2,24	0,01	$\sim 10^{-4}$
6	1	0,77	0,01	$\sim 10^{-3}$
8	4	0,27	2,35	0,18
8	2	0,16	0,57	0,18
8	0	0,36	0,28	0,08
10	5	0,05	$\sim 10^{-3}$	$\sim 10^{-3}$
10	3	0,25	$\sim 10^{-3}$	$\sim 10^{-4}$
10	1	0,04	0,91	$\sim 10^{-3}$
12	6	0,09	—	—
12	4	0,03	—	—
12	2	0,02	—	—
12	0	0,05	—	—

Tabela 5 - Contribuição percentual das ondas parciais $\chi_{k\nu}$ à norma da função de onda.

CBPF). Como estas rotinas têm procedimentos diferentes e em geral os valores coincidiam até a sexta casa decimal, acreditamos que os resultados apresentados estejam bastante próximos da realidade. Entretanto, no caso do H^- os dois conjuntos de valores (Tabs. 2 e 3) deveriam diferir apenas de um fator da ordem de 6×10^{-4} , sendo mais altos (menos ligados) os valores com massa real. Podemos ver claramente que isto não ocorre. Acreditamos que este fato aconteça por alguma particularidade do método ou mesmo que alguns dos elementos de matriz $V_{k\nu, k'\nu'}$ do H^- com massas reais não estejam corretos dentro da aproximação 6×10^{-4} .

5.2 - Convergência em Função de k

Um dos problemas de interesse no formalismo dos harmônicos-k consiste em saber de que maneira o acréscimo de funções na expansão da função de onda (eq. (2.1.29))

$$\Psi(\rho; \Omega) = \sum_{k\nu} \chi_{k\nu}(\rho) u_{k\nu}(\Omega) \quad (1)$$

influi nos valores das quantidades que se deseja investigar. Ten-
do em vista o estado ligado de três nucleons, Schneider⁽⁴⁷⁾ estu-
dou o comportamento da expansão de $\Psi(\rho; \Omega)$, utilizando métodos de
análise funcional. Para o potencial de Yukawa ele sugere que a
convergência seja proporcional a k^{-4} ; já no caso de um potencial
Gaussiano ele espera que a convergência seja mais rápida do que
potências inversas de k, i.ê, seja exponencial. Mais recentemen-
te Demin⁽⁴⁸⁾ ampliou o estudo de Schneider para potenciais que
incluam interações do tipo tensor. De qualquer forma a convergên-
cia se apresenta, em geral, na forma de uma potência inversa de
k ou mais rápida.

Utilizando os resultados do trabalho de Schneider, Bru-
insma e Van Wageningen⁽⁴⁹⁾ propuseram, no caso da energia de
ligação do Triton com um potencial de Reid⁽⁵⁰⁾, a seguinte fórmu-
la de extrapolação

$$E(\infty) = E(k_{\max}) - \text{const.} \cdot (k_{\max})^{-\gamma} \quad (2)$$

onde k_{\max} é o maior k para o qual se interrompe a expansão da eq.
(1) e $E(k_{\max})$ é a energia calculada com este valor de k. Estudando
os valores obtidos para diversos valores de $E(k_{\max})$ eles che-

gam a um valor igual a 3 para γ .

Baseados nestes resultados resolvemos agir de forma semelhante para o potencial de Coulomb. Para tal, estudamos os valores da energia com diferentes k_{\max} e os colocamos em função das potências inversas de k . A nossa proposta é, então, utilizar a equação de uma reta

$$aE(k) + b(k)^{-\gamma} + c = 0 \quad (3)$$

e com o método usual de mínimos quadrados ajustar os valores dos parâmetros a , b e c para as diversas potências de k . A extrapolação é feita para $k \rightarrow \infty$ neste caso $k^{-\gamma} \rightarrow 0$, portanto

$$E(\infty) = -\frac{c}{a} \quad (4)$$

Uma outra maneira de estudarmos a convergência é a utilização dos aproximantes de Padé pontuais⁽¹⁴⁾. Com eles podemos construir tabelas em que cada linha, coluna e diagonal é uma sequência transformada da sequência original e que em princípio deve atingir mais rapidamente o limite correto. O uso dos aproximantes de Padé está explicado no Apêndice A. Nas Tabs. 6, 7, 8 e 9 temos as diversas sequências obtidas para os sistemas estudados. Nestas tabelas a primeira linha traz a sequência original dos valores da energia calculados com o k indicado; as outras linhas, colunas e diagonais, são as sequências geradas pelo método.

Das tabelas de Padé, podemos perceber que há uma série de discrepâncias como o valor $-0,238199$ para o aproximante $[2,2]$ do íon $e^-e^+e^-$ (Tab. 6) ou os valores $-0,672828$ e $-0,919084$ dos aproximantes $[1,2]$ e $[2,1]$ do íon H^- ($M_p \rightarrow \infty$) (Tab. 8), tam-

M \ N	0	1	2	3	4
0	-0,220021	-0,234499	-0,240796	-0,244595	-0,248105
1	-0,235519	-0,245641	-0,250373	-0,290715	—
2	-0,241806	-0,250585	-0,238199	—	—
3	-0,245525	-0,381281	—	—	—
4	-0,245363	—	—	—	—

Tabela 6 - Tabela de aproximantes de Padé para o íon $e^-e^+e^-$, $N=(k-4)/2$, $n = 9$.

M \ N	0	1	2	3	4
0	-2,529696	-2,700426	-2,782179	-2,844403	-2,846499
1	-2,712783	-2,857296	-3,042657	-2,846572	—
2	-2,796026	-3,063490	-2,892408	—	—
3	-2,860985	-2,852259	—	—	—
4	-2,850941	—	—	—	—

Tabela 7 - Tabela de aproximantes de Padé para o He, $N=(k-2)/2$, $n = 14$.

M \ N	0	1	2	3	4
0	-0,411083	-0,457676	-0,480452	-0,500818	-0,510129
1	-0,463632	-0,502233	-0,672828	-0,517971	—
2	-0,487008	-0,919085	-0,532404	—	—
3	-0,508955	-0,519337	—	—	—
4	-0,515692	—	—	—	—

Tabela 8 - Tabela de aproximantes de Padé para o íon $H^- (M_p \rightarrow \infty)$, $N=(k-2)/2$, $n = 14$.

bém o resultado -0,106928 para o aproximante $[1,2]$ do $H^- (M_p \text{ real})$ (Tab. 9). Este comportamento se deve, em parte, ao fato de que o método dos aproximantes de Padé não leva em conta que a

M \ N	0	1	2	3	4
0	-0,410829	-0,455140	-0,474052	-0,493991	-0,494065
1	-0,460497	-0,488134	-0,106928	-0,494065	—
2	-0,478966	-0,370465	-0,509757	—	—
3	-0,502308	-0,413022	—	—	—
4	-0,495678	—	—	—	—

Tabela 9 - Tabela de aproximantes de Padê para o íon H^- (M_p real) $N = (k-2)/2$, $n = 14$.

energia está sempre decrescendo para cada harmônico-k adicionado (cf. Tabs. 5.1.1, 2, 3, 4), embora seja preciso reconhecer que há harmonia com o comportamento já conhecido dos aproximantes, nos quais as diagonais vizinhas da principal ($[N, N]$) fornecem cotas superiores aos valores da diagonal principal. Entretanto estas discrepâncias também indicam que estamos distantes da convergência no caso dos íons $e^-e^+e^-$ e H^- (M_p real), pois quanto mais regular fosse o comportamento da sucessão de valores da energia mais regulares deveriam ser as sequências geradas pelos aproximantes de Padê. Como exercício especulativo, calculamos os aproximantes pontuais dos aproximantes diagonais. Os resultados são fornecidos na Tabela 10.

Destes resultados emergem duas características:

19. Do ponto de vista dos aproximantes de Padê, é significativo verificar que estes apresentam características de aumento da velocidade de convergência, ou seja, com os mesmos valores da sequência $[0, M]$ podemos construir sequências de melhor convergência (por exemplo, as diagonais ou a $[N, 0]$).

20. Do ponto de vista do método de solução da equação de Schrö -

$e^-e^+e^-$			
	-0,220021	-0,245641	-0,238199
	-0,249018	-0,239874	-
	-0,236343	-	-
He			
	-2,529696	-2,857296	-2,892402
	-2,906032	-2,896623	-
	-2,896413	-	-
$H^- (M_p \rightarrow \infty)$			
	-0,411083	-0,502233	-0,532404
	-0,528203	-0,547330	-
	-0,545174	-	-
$H^- (M_p \text{ real})$			
	-0,410829	-0,488134	-0,509757
	-0,506052	-0,518153	-
	-0,517022	-	-

Tabela 10 - Aproximantes de Padê sobre os aproximantes diagonais das Tabelas 6,7,8,9.

dingar, os números desejados estão à vista, faltando apenas critérios para limitar os valores obtidos.

Dentro da ótica do método dos harmônicos-k, embora seja atraente o uso dos aproximantes de Padê, é mais plausível a utilização dos trabalhos de Schneider⁽⁴⁷⁾ e Demin⁽⁴⁸⁾ e da fórmula linear que decorre (cf. eq. (3)). Para utilizarmos esta fórmula estudamos o comportamento das diversas potências inversas de k tendo como base os valores da energia do íon $e^-e^+e^-$ (calculados com $n = 9$) e verificamos que para $k \geq 4$ há um ajuste bastante significativo da reta (eq. (3)) quando $\gamma = 1$. Considerando os diversos k^{-1} como sendo os pontos do eixo y e os valores

da energia como sendo do eixo x , podemos calcular um coeficiente de determinação r^2 (51)

$$r^2 = \frac{\left[xy - \frac{\Sigma x \Sigma y}{N} \right]}{\left[\Sigma x^2 - \frac{(\Sigma x)^2}{N} \right] \left[\Sigma y^2 - \frac{(\Sigma y)^2}{N} \right]} \quad (5)$$

onde N é o número de pontos (x,y) .

Quanto mais próximo r^2 estiver de 1 melhor o ajuste da reta que passa pelos pontos (x,y) . O valor obtido para r^2 no caso do íon $e^-e^+e^-$ ($n = 9, 4 \leq k \leq 12$) foi

$$r^2 = 0,9988 \quad (6)$$

e o valor obtido para $E(\infty)$ (eq. (4)) foi

$$E(\infty)_{e^-e^+e^-} = -0,2617 \text{ a.u.} \quad (7)$$

Na Fig. 2 podemos ver o gráfico destes pontos. Na Tabela 11 mostramos os valores calculados com a eq. (3) e $\gamma = 1$ de $E(\infty)$ (eq. (4)) para os íons $e^-e^+e^-$ e H^- e para o átomo de He (calculados com $n = 14$ e $4 \leq k \leq 10$).

$e^-e^+e^-$	-0,2689
$H^- (M_p \text{ real})$	-0,5257
$H^- (M_p \rightarrow \infty)$	-0,5446
He	-2,9631

Tabela 11 - Valores de $E(\infty)$ para os íons $e^-e^+e^-$, H^- e átomo de He ($M_p =$ massa do próton), em unidades atômicas.

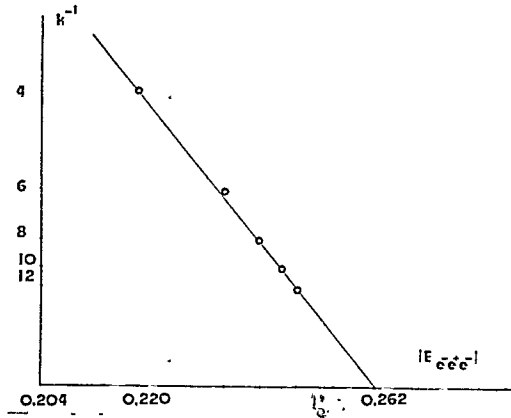


Figura 2 - Reta utilizada para a extrapolação dos valores da energia de $e^-e^+e^-$.

Como podemos verificar (cf. Tab. 11) os valores da energia, do nível fundamental dos sistemas estudados, obtidos com o uso da extrapolação linear (em k^{-1}) concordam bastante bem com os valores usualmente aceitos tanto teórica ($e^-e^+e^-$) quanto experimentalmente (H^-, He). Este é um resultado muito alentador já que esta extrapolação deveria apenas indicar o valor para o qual converge a energia.

Dos sistemas estudados o que apresenta maior regularidade considerando a equação linear (eq. (3)) e as Tabelas de Padé é o He. Vejamos outras particularidades. O valor exato que é obtido com o harmônico $k = 0$ representa para o He 86% da energia fundamental enquanto que para o íon $H^- (M_p \rightarrow \infty)$ este valor é 73% e para o íon $e^-e^+e^-$ apenas 44%. Estes valores parecem determinar fortemente a possibilidade de se obter um bom valor da energia do nível fundamental dos sistemas quando acrescentarmos mais valo

res de k na expansão da função de onda (cf. eq. (1)). Outro aspecto a ser considerado são as diferenças físicas destes sistemas, o átomo de He é estável, tem carga elétrica total nula e além disso existe em diversos níveis de energia⁽¹⁵⁾, enquanto que o íon H^- só é estável frente à dissociação em um átomo de Hidrogênio e um elétron livre não possuindo outros níveis discretos de energia, ou seja, só possui um estado ligado. O íon $e^-e^+e^-$ traz uma certa semelhança com o H^- porém o "átomo pai", i.é, o positrônio, se aniquila com relativa rapidez e o próprio íon $e^-e^+e^-$ deve se aniquilar. Estas particularidades devem favorecer o He no que concerne à aplicação do método dos Harmônicos-K e obtenção da convergência. Zickendraht⁽⁵⁾ com seu formalismo calcula um valor da energia do nível fundamental do átomo de He idêntico ao nosso para $k = 0$, com uma função que se assemelha à nossa expansão (eq.(2:1.29)) até $k = 4$ ele dá um valor para esta energia de $-2,783$ u.à., quantidade que está em concordância com as que obtivemos (cf. Tab. 5.2.4). O íon H^- comporta-se de uma maneira bastante semelhante a do átomo de He, principalmente na aproximação em que consideramos a massa do próton infinita. Realmente, a única diferença formal é o fato da carga do núcleo do átomo de He ser $Z_{He} = +2$ e no caso do íon H^- $Z_{H^-} = +1$, isto não modifica de maneira brusca o cálculo dos elementos de matriz, como pode ser visto na eq. (3.2.7). A utilização para o íon H^- de massas reais, aparentemente introduz uma perturbação no cálculo dos elementos de matriz do potencial influenciando na convergência dos valores, sendo que para $k = 10$ ainda não obtivemos um estado ligado, Quanto ao íon $e^-e^+e^-$ realizamos cálculos com valores de k até 12 e não obtivemos nem o valor do nível fundamental do positrônio. O fato de que o cálculo com $k = 0$ fornece um valor tão

baixo como $-0,115281$ u.a. ⁽¹²⁾ para a energia, já indica que a convergência será precária. Este comportamento está totalmente em contradição com um trabalho de Choudhury et al. ⁽¹¹⁾ que obtêm para $k = 2$ o valor $-0,256$ u.a. e para $k = 4$ $-0,259$ a.u.. H. Coelho et al. numa publicação recente ⁽¹²⁾ obtêm um valor para o $\bar{\nu}_n e^+ e^-$ com $k = 0$ idêntico ao nosso, e também concluem que é muito difícil que Choudhury tenha atingido convergência adicionando apenas mais uma onda parcial, fato que não ocorre nem mesmo para potenciais do tipo Gaussiano ⁽²⁹⁾ no cálculo com partículas idênticas (bósons).

De uma maneira mais geral devem influir na convergência, a simetria dos sistemas e o tipo de singularidade do potencial utilizado. Estudando sistemas de três corpos a uma dimensão Coelho e Amado ⁽¹³⁾ concluem que a assimetria introduzida por partículas não idênticas (massas diferentes, cargas diferentes etc) influi negativamente na convergência. Ou seja, não é exatamente uma surpresa o fato de não atingirmos rapidamente os valores que gostaríamos de obter. Quanto ao potencial, em cálculos realizados da energia de ligação do trítion ^(29,30) (neste caso as partículas são idênticas) percebe-se que quando utilizam-se potenciais mais singulares, como o de Yukawa, a convergência torna-se bem mais lenta. Mesmo com todas estas dificuldades, vemos que os valores obtidos (cf. Tabs. 1 a 10) são bastante bons e uma vez vencidas as barreiras computacionais espera-se uma melhora substancial nos resultados.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO

Neste trabalho explicitamos o método dos Harmônicos Hiperesféricos na solução de problemas com N corpos de massas diferentes. Demos alguns exemplos, como N corpos interagindo por um potencial do tipo oscilador harmônico e o do potencial "pseudo-Coulombiano" a^2/ρ . Em particular, nosso objetivo foi utilizar este método na solução de sistemas Coulombianos de três corpos, procurando o nível fundamental da energia. Com este intuito um primeiro passo foi calcular os elementos de matriz do potencial de Coulomb. Este cálculo foi realizado com auxílio do programa Schoonschip, conforme vimos no Capítulo 3. Obtivemos nesta aplicação uma eficácia muito acentuada, o que nos permite calcular estes elementos de matriz para valores de k bastante altos. Acreditamos que este procedimento deve ser utilizado de maneira mais ampla, ou seja, o cálculo com auxílio de um programa de computação algébrica provou ser um poderoso instrumento e deve servir no cálculo dos elementos de matriz para outros tipos de potenciais.

De posse destes elementos de matriz, resta o trabalho de montarmos a equação matricial de autovalores. Neste ponto surge uma das limitações do método, pois aparecem matrizes de ordem muito alta, havendo dificuldades na procura de seus autovalores. Estas dificuldades só podem ser superadas com a utilização de

algoritmos otimizados e com auxílio de computadores que tenham grande capacidade de memória.

Nas nossas aplicações ao átomo de He e aos íons $e^-e^+e^-$ e H^- , obtivemos resultados que são plenamente coerentes frente às aplicações anteriores do método, com exceção do já citado (cf. Cap.5) trabalho de Chowdhury et al. (11). Procuramos melhorar nossos resultados utilizando métodos de aceleração de convergência, como os aproximantes de Padé e a extrapolação linear do Capítulo 5. Em particular, com a fórmula linear que propusemos encontramos valores surpreendentemente bons, indicando que com o acréscimo de mais alguns harmônicos na expansão da função de onda podemos atingir valores ainda mais acurados. Esta é uma face do método que deve ser explorada, pois um conhecimento preciso da lei de convergência dos valores em função de k (i.é, do acréscimo de harmônicos na expansão) possibilita que com um número relativamente reduzido de harmônicos possamos obter valores bastante próximos dos reais. Em aplicações futuras esperamos desenvolver de uma maneira mais rigorosa este ponto, bem como investigar sistemas semelhantes aos que estudamos (como o H_2^+) e processos atômicos de colisão. De fato, apesar das dificuldades citadas, verificamos que é factível esperar bons resultados do uso dos harmônicos- k na solução de problemas atômicos e moleculares simples. Frente aos métodos variacionais os harmônicos- k apresentam a vantagem de ser um procedimento recorrente no qual as diferentes ordens de aproximação estão sob controle. Porém, existem dificuldades de fato no cálculo numérico que limitam a sua aplicabilidade e requerem, como vimos, a utilização de instrumentos adicionais de otimização dos resultados.

APÊNDICE A

MÉTODOS DE EXTRAPOLAÇÃO

A.1 - Aproximantes de Padê Pontuais

O aproximante de Padê $[N, M]_S(z)$ para uma série de potências formal (no sentido de que a série não precisa convergir)

$$S(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n \quad (\text{A.1})$$

é definido ⁽¹⁴⁾ pela função racional

$$[N, M]_S(z) = \frac{R_M(z)}{Q_N(z)}, \quad Q_N(0) = 1 \quad (\text{A.2})$$

onde $R_M(z)$ e $Q_N(z)$ são polinômios em z de ordens M e N , respectivamente, os coeficientes destes polinômios ficam determinados de maneira única, pela equação

$$S(z)Q_N(z) - R_M(z) = 0 \quad [z^{M+N+1}] \quad (\text{A.3})$$

No caso em que $z = 1$ teremos

$$S(1) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \quad (\text{A.4})$$

com somas parciais

$$S_r = \sum_{n=0}^r a_n \quad (\text{A.5})$$

O aproximante de Padê pontual $[n, n+r]_{S(1)}$ da expansão (A.4) fica determinado pelas equações (A.2) e (A.3) quando $z = 1$, desta maneira temos um procedimento para aproximar o limite de uma seqüência S_r (14). Em geral os valores $[n, n+r]_{S(2)}$ são arrumados na forma de uma matriz infinita.

$$\begin{array}{cccc}
 [0,0] & [0,1] & [0,2] & [0,3] \dots \\
 [1,0] & [1,1] & [1,2] & [1,3] \dots \\
 [2,0] & [2,1] & [2,2] & [2,3] \dots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots
 \end{array} \tag{A.6}$$

Os valores da primeira linha são os $[0, m] = S_m$, valores da seqüência, e de modo geral espera-se que para cada n fixo tenhamos uma seqüência que convirja rapidamente para o limite de S_r . Alguns teoremas concernentes à convergência podem ser encontrados nas refs. (14), (52), (53).

A.2 - Método de Extrapolação de Aitkên

Quando temos uma seqüência S_r podemos procurar seu limite usando o método de Aitkên (54), que consiste em escolher três valores da seqüência, digamos S_r, S_{r+1}, S_{r+2} , calculando então as diferenças

$$\begin{aligned}
 \Delta S_{r+1} &= S_{r+1} - S_r \\
 \Delta S_{r+2} &= S_{r+2} - S_{r+1}
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

Podemos então construir um plano Cartesiano com um eixo formado

pelas diferenças, e outro pelos valores da seqüência. A reta que passa pelos pontos $(S_r, \Delta S_{r+1})$ e $(S_{r+1}, \Delta S_{r+2})$ nos dará o valor do limite quando extrapolada para $\Delta S = 0$ (cf. Fig. A.1)

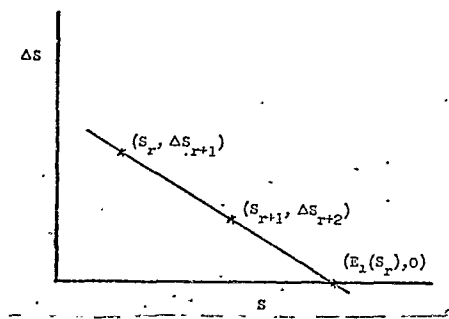


Figura A.1 - Reta de extrapolação do Método de Aitkên.

O valor $E_1(S_r)$ é fácil de ser calculado e seu valor é

$$E_1(S_r) = \frac{S_{r+1}^2 - S_r S_{r+2}}{2S_{r+1} - S_r - S_{r+2}} \quad (A.7)$$

Este método aplicado à seqüência (A.5) nos dá precisamente o aproximante de Padê pontual $[1, 1+r]$. Podemos generalizar esta sistemática construindo para $2n+1$ termos da seqüência $S_r, S_{r+1}, \dots, S_{r+2r}$ os $n+1$ vetores de dimensão $n+1$

$$\vec{V}(k) = \begin{pmatrix} S_{r+k} \\ \Delta S_{r+k+1} \\ \Delta S_{r+k+2} \\ \vdots \\ \Delta S_{r+k+n} \end{pmatrix} ; k = 0, 1, 2, \dots, n \quad (A.8)$$

o ponto

$$\vec{p} = \begin{bmatrix} E_n(S_r) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (A.9)$$

onde o hiperplano comum aos n+1 vetores intercepta o eixo dos S nos dá o aproximante $[\bar{n}, n+r]_{S(1)}$

$$E_n(S_r) = [\bar{n}, n+r]_{S(1)} \quad (A.10)$$

O valor de $E_n(S_r)$ será dado, seguindo esta construção geométrica, pelo quociente de determinantes

$$E_n(S_r) = \frac{\begin{vmatrix} \Delta S_{r+1} & \Delta S_{r+2} & \cdots & \Delta S_{r+n} & S_r \\ \Delta S_{r+2} & \Delta S_{r+3} & \cdots & \Delta S_{r+n+1} & S_{r+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \Delta S_{r+n+1} & & & \Delta S_{r+2n} & S_{r+n} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \Delta S_{r+1} & \cdots & \Delta S_{r+n} & 1 \\ \Delta S_{r+2} & \cdots & \Delta S_{r+n+1} & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ \Delta S_{r+n+1} & \cdots & \Delta S_{r+2n} & 1 \end{vmatrix}} \quad (A.11)$$

Outras construções nos dão fórmulas equivalentes ⁽¹⁴⁾

$$E_n(S_r) = \frac{H_{n+1}^{(r)} \{S_m\}}{H_n^{(r)} \{\Delta^2 S_m\}} \quad (A.12)$$

$$E_n(S_r) = \frac{H_{n+1}^0 \{\Delta^m S_r\}}{H_n^{(2)} \{\Delta^m S_r\}} \quad (A.13)$$

onde para $m \geq 1$, $\Delta^m S_r = \Delta^{m-1} S_{r+2} - \Delta^{m-1} S_r$, $\Delta^0 S_r = S_r$ e os

$$H_k^{(r)}\{S_m\} = \begin{vmatrix} S_r & S_{r+1} & \cdots & S_{r+k-1} \\ S_{r+1} & S_{r+2} & \cdots & S_{r+k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{r+k-1} & S_{n+k} & \cdots & S_{r+2k-2} \end{vmatrix} \quad (A.14)$$

são os determinantes de Hankel ⁽¹⁴⁾.

APÊNDICE B

TABELAS DE ELEMENTOS DE MATRIZ

Nas tabelas que se seguem estão contidos os elementos de matriz do potencial $V_{k\nu, k'\nu'}$, do íon $e^-e^+e^-$, do íon H^- e do átomo de He com:

$$V_{k\nu, k'\nu'} = \frac{1}{\rho} C_{n,m} \quad (B.1)$$

onde $n, m = 1, 2, 3, \dots, 10, 12$ equivalem ao conjunto de índices (k, ν) considerando, $(0, 0) = 1, (2, 1) = 2, (4, 2) = 3 \dots$. Além disso temos também que:

$$Z_1 = -\frac{8}{3} \frac{1}{\pi}$$

$$Z_2 = \sqrt{2}$$

$$Z_3 = \sqrt{3}$$

$$Z_6 = \sqrt{6}$$

$$Z_{MA} = 1 + 2Z\sqrt{2}$$

$$Z_{ME} = 1 - 2Z\sqrt{2}$$

onde $Z = +1$ para o íon H^- e $Z = +2$ para o átomo de He. Devemos notar que no caso do íon $e^-e^+e^-$ fornecemos para valores de k até 6 os $C_{n,m}$ em termos de quocientes, com base nos cálculos realizados com o programa Schoonschip.

ZY=	-8. /3 /PT	CA10=ZY+4.6978426335E-2
Z2=DSORT (220)		CA11=1.1913951671E-2Y
Z3=DSORT (320)		CA12=-0.523325773E-2Y
Z6=DSORT (620)		CA10=0.31433850537E-2Y
C11=ZY*2		CA11=-0.2483701044E-2Y
C12=Z1+ (8. /5)		CA12=1.1292973495E-2Y
C13=ZY*2+ (-12. /35)		CA10=1.77164853E-2Y
C14=ZY*26+ (-3. /35)		CA101=0.6350367169E-2Y
C15= (-4. /21.) *ZY		CA102=-0.172666096E-2Y
C16= (-8. /21.) *ZY		CA111=1.664818473E-2Y
C22=ZY*22+ (26. /35)		CA112=0.7551644371E-2Y
C23=ZY*23+ (158. /15)		CA121=1.0238956734E-2Y
C28=ZY*28+ (-124. /315)		CA13=ZY+8.1407732646E-2
C25= (-944. /1155.) *ZY		CA132=ZY+0.3325452981
C26= (4. /33.) *ZY		CA133=-ZY+0.4550991372
C33=ZY*22+ (101. /105)		CA134=-ZY+0.1270330591
C34=ZY* (268. /395)		CA135=-ZY+0.3194035444
C35=ZY*26+ (776. /1365.)		CA136=-ZY+0.3995569743
C36=-ZY*26+ (62. /315.)		CA137=-ZY+0.5497748432
C44=ZY*22+ (35. /33)		CA138=ZY+0.4566202037
C45=ZY*22+ (1408. /1001.)		CA139=ZY+0.1350593651
C46=ZY*23+ (2970. /35045.)		CA1013=ZY+1.5701103485
C55=ZY*22+ (93704. /75075.)		CA1113=ZY+0.2647845484
C56=ZY*22+ (40112. /75075.)		CA1713=ZY+0.3934602454
C66=ZY*22+ (10916. /15015.)		CA1313=ZY+1.8517700493
C17=-0.2710385427E-2Y		CA14 =ZY+0.1628154453
C18 =0.2710385427E-2Y		CA21 =ZY+ (-4.156569526E-2)
C19=ZY*0.580459575E-2		CA24 =ZY+0.2127484920
C27=ZY* (-1.4892227819E-3)		CA14 =ZY+ (-0.2992193153)
C28=-0.212958855E-2Y		CA14 =ZY+ (-0.5191840316)
C29=0.4001550153E-2Y		CA14 =ZY+3.0741640039E-2
C37=-0.5604611841E-2Y		CA14 =ZY+ (-0.1237131792)
C38=ZY* (-1.767994197E-2)		CA14 =ZY+ (-0.445197118)
C39=-0.662849237E-2Y		CA14 =ZY+0.3755537617
CA7=0.392818168E-2Y		CA1014=ZY+ (-0.530775725)
CA8=-0.6037193837E-2Y		CA114=ZY+1.2018769914
CA9=-0.2383509076E-2Y		CA1214=ZY+ (-3.04679369E-2)
CA7=1.4514204672E-2Y		CA1314=ZY+0.6112179864
CA58=-0.8120446073E-2Y		CA1414=ZY+1.4715212549
CA59=-0.2117489556E-2Y		CA15 =ZY+ (-0.1628154653)
CA6ZY+ (-2.366291731E-2)		CA215 =ZY+0.19495177
CA68=0.7379651358E-2Y		CA215 =ZY+ (-4.792133474E-2)
CA69=-1.0243092545E-2Y		CA215 =ZY+0.3966117349
CA77=1.5983372222E-2Y		CA215 =ZY+0.4476093172
CA78=0.413523721E-2Y		CA215 =ZY+ (-0.2264093571)
CA79=-0.3668117229E-2Y		CA215 =ZY+ (-0.213521137)
CA81=1.2899320014E-2Y		CA215 =ZY+ (-1.401954263E-2)
CA89=0.6987250194E-2Y		CA215 =ZY+ (-0.2913115643)
CA91=1.5092109267E-2Y		CA1015=ZY+ (-6.636140854E-3)
CA10=0.205515863E-2Y		CA1115=ZY+ (-0.856339992)
CA11=0.10277575734E-2Y		CA1215=ZY+0.6941822458
CA12=0.2055515868E-2Y		CA1315=ZY+ (-0.342403054)
CA101=-0.1971772629E-2Y		CA1415=ZY+0.4103492295
CA211=0.4232840394E-2Y		CA1515=ZY+1.2726715074
CA212=ZY+ (-8.7549704934E-2)		CA16 =ZY+ (-5.756399939E-2)
CA310=ZY+ (-0.842210939E-2)		CA216 =ZY+ (-0.231810978)
CA11=-0.5465423119E-2Y		CA16 =ZY+0.2811153585
CA312=0.173084542E-2Y		CA416 =ZY+0.1185612366
CA410=-0.3113020458E-2Y		CA516 =ZY+0.1497231162
CA411=-0.2091609137E-2Y		CA616 =ZY+0.4347449933
CA812=-0.4475083794E-2Y		CA716 =ZY+0.602541973
CA510=-0.9614404975E-2Y		CA816 =ZY+ (-0.9873475362)
CA511=-0.3255064837E-2Y		CA916 =ZY+ (-0.2434771476)
CA512=ZY+1.1027416113E-2		CA1016=ZY+ (-0.211133323)
CA610=0.2111217376E-2Y		CA1116=ZY+ (-0.2182253197)
CA611=-0.7344922499E-2Y		CA1216=ZY+ (-1.0842409346)
CA612=0.133513337E-2Y		CA1316=ZY+ (-0.1237339993)
CA710=1.377864543E-2Y		CA1416=ZY+ (-0.367 0205793)
CA711=-0.704112134E-2Y		CA1516=ZY+0.605452935
CA712=ZY+4.1021555991E-2		CA1616=ZY+1.132199755

Tabela B.1 - Elementos $C_{n,m}$ para o Ton $e^{-}e^{+}$.

```

C11=-ZY*ZNF*72
C12=-ZY*ZNF*75.
C13=-ZY*ZNF*73*6./15.
C14=-ZY*ZNF*73./35.
C22=-ZY*ZNF*73*6./35. + ZNF*38./351
C23=-ZY*73*124./315.
C24=-ZY*76*62./315.
C33=-ZY*73*72*142L./1155.
C34=-ZY*73*134./385.
C44=-ZY*72*ZNF*35./33.
C15=-ZY*4./21.
C55=-ZY*(ZNF*332./1155. + ZNF*4./13.)
C56=-ZY*(17L./715. + 4./105.)*ZG
C65=-ZY*73*148./1001.
C55=-ZY*22*(ZNF*1.18617206 + ZNF*2./65.)
C16=-ZY*4./21.
C26=-ZY*(ZNF*268./1155. + ZNF*69./385)
C36=-ZY*76*0.19311779
C86=-ZY*73*0.325714737
C56=-ZY*ZNF*(ZNF*0.1757708955 + ZNF*0.0913752912)
C66=-ZY*72*(ZNF*0.17406592 + ZNF*1.075138183)
C17=-ZY*ZNF*0.1355192713
C27=-ZY*(0.1891312903*0.3321034E-2)
C37=-ZY*(0.3223633286*0.4265473077D-2)*ZNF
C47=-ZY*0.196207061*ZNF
C57=-ZY*(0.6513037004*7.4406533176D-2)
C67=-ZY*(0.1917523311*0.10770715292)
C77=-ZY*(1.7246883274*6.5675552415D-2)*ZNF
C18=-ZY*ZNF*0.1355192713
C28=-ZY*(0.1653017266*0.1176485982)
C38=-ZY*(0.2406855374*0.1115027977)*ZNF
C48=-ZY*ZNF*0.3018596943
C58=-ZY*(0.3066401500*3.938215270D-2)
C68=-ZY*(0.8523709087*0.1667766916)
C78=-ZY*ZNF*(0.2503771633*8.7230605515D-2)
C88=-ZY*ZNF*(1.548865538745*0.1293609366)
C19=-ZY*ZNF*9.582659550D-2
C29=-ZY*0.2000775076
C39=-ZY*73*0.2314246192
C49=-ZY*ZNF*0.2323509096
C59=-ZY*0.2117497565
C69=-ZY*0.5131546273
C79=-ZY*ZNF*0.1934058614
C89=-ZY*ZNF*0.349362054
C99=-ZY*73*1.5092109267
C110=-ZY*0.1027757934
C210=-ZY*(ZNF*0.136273089*ZNF*7.5368915169D-2)
C310=-ZY*(0.229921571*7.05865235294D-2)
C410=-ZY*0.1556742227
C510=-ZY*(ZNF*0.3366761007*ZNF*6.434863683D-2)
C610=-ZY*(ZNF*0.1512301285*ZNF*9.074807758D-2)
C710=-ZY*(0.6497988191*5.824035106D-2)
C810=-ZY*(0.1945009030*7.6511933756D-2)
C910=-ZY*0.1571740298
C1010=-ZY*ZNF*1.77164953
C111=-ZY*0.1027757934
C211=-ZY*(ZNF*0.1262022543*ZNF*8.7549749944D-2)
C311=-ZY*(0.1419122705*8.6394204031D-2)
C411=-ZY*0.2010609397
C511=-ZY*(ZNF*0.249312071*ZNF*8.013810124D-2)
C611=-ZY*(ZNF*0.2412071*ZNF*0.1233140539)
C711=-ZY*(0.299102564 + 7.2857537218D-2)
C811=-ZY*(0.402271219*0.1037462991)
C911=-ZY*0.2433701066
C1011=-ZY*(ZNF*0.2517612315*ZNF*6.575711695D-2)
C1111=-ZY*(ZNF*1.5748030705*ZNF*8.7079801821D-2)
C112=-ZY*0.1927757934
C212=-ZY*(ZNF*0.111014954*ZNF*9.9730584710D-2)
C312=-ZY*(0.1420441151*0.110203522)
C412=-ZY*0.2237543922
C512=-ZY*(ZNF*0.112141564 - ZNF*0.1062677408)
C612=-ZY*(ZNF*0.247454403*ZNF*0.1174206405)
C712=-ZY*(0.1864317136*9.7247659525)
C812=-ZY*(0.3412271144*0.153113649)
C912=-ZY*0.5646468742
C1012=-ZY*(ZNF*0.110037970*ZNF*8.717111211D-2)
C1112=-ZY*(ZNF*0.2480216374*ZNF*0.127675P11)
C1212=-ZY*(ZNF*1.5173573944*ZNF*0.2469308966)

```

Tabela B.2 - Elementos C_{n,m} para o fon H⁻ e átomo de He com massas nucleares infinitas.

C11=ZY*2.58467
 C12=ZY*3.66556D-1
 C13=-ZY*1.11651
 C14=-ZY*3.83722D-1
 C22=ZY*1.87A25
 C23=ZY*0.68185435
 C24=ZY*4.82463D-1
 C33=ZY*3.191145
 C34=ZY*1.33221
 C44=ZY*2.78132
 C15=ZY*1.8959914E-1
 C25=ZY*(-A.7870745E-1)
 C35=ZY*6.9706971E-1
 C45=ZY*(-2.54940827E-1)
 C55=ZY*2.8992214
 C16=ZY*(-1.9076937E-1)
 C24=ZY*(0.2519706)
 C36=-ZY*4.7330665E-1
 C46=ZY*5.7196167E-1
 C56=ZY*(0.71529060)
 C66=ZY*1.8366698
 C17=ZY*0.2476739991
 C27=ZY*0.782803552
 C37=-ZY*1.5564279242
 C47=-ZY*0.3585942431
 C57=ZY*0.7259109861
 C67=-ZY*0.29980565939
 C77=ZY*3.2813061588
 C18=ZY*0.5187189907
 C28=ZY*0.296650661
 C38=-ZY*0.6836768401
 C48=-ZY*1.1554093665
 C58=-ZY*0.407259169
 C68=ZY*0.6190759547
 C78=ZY*1.292240374
 C88=ZY*3.066830978
 C19=ZY*0.17513907
 C29=ZY*0.2003058669
 C39=-ZY*0.8058094535
 C49=-ZY*0.4356235176
 C59=ZY*0.2107749517
 C69=-ZY*0.5139444749
 C79=ZY*0.3351983296
 C89=ZY*1.33723583
 C99=ZY*2.7583187073
 C110=ZY*0.103566797
 C210=-ZY*3.9428167226D-2
 C310=ZY*0.2485710909
 C410=-ZY*0.1568721523
 C510=-ZY*1.3613020434
 C610=ZY*7.0066743185D-2
 C710=ZY*0.7581052118
 C810=-ZY*0.2742708994
 C910=ZY*0.158333704
 C1010=ZY*3.2379644282
 C111=-ZY*0.1023025612
 C211=ZY*0.3148713354
 C311=-ZY*0.2692412561
 C411=ZY*0.2001351526
 C511=-ZY*0.1414259716
 C611=-ZY*0.7081976902
 C711=-ZY*0.371731576
 C811=ZY*0.5972514183
 C911=-ZY*0.247226408
 C1011=ZY*0.8034709598
 C1111=ZY*2.547851646
 C112=ZY*0.1029330959
 C212=-ZY*0.1771968864
 C312=ZY*0.7519609153
 C412=-ZY*0.224998801
 C512=0.6356081914*ZY
 C612=ZY*0.2748912913
 C712=ZY*0.2488857019
 C812=-ZY*0.500133399
 C912=ZY*0.865517815
 C1012=-ZY*9.6608875271D-2
 C1112=ZY*0.7125478226
 C1212=ZY*1.8280457926

Tabela B.3 - Elementos $C_{n,m}$ para o Ion H^+ com massa nuclear real.

BIBLIOGRAFIA

1. Ivo Slaus, S.A. Moszkowski, R.P. Haddock, W.T.H. van Oers, Few Particle Problems in the Nuclear Interaction, North Holland/American Elsevier, 1972.
2. L.D. Fadeev, Scattering Theory for a Three-Particle System , Zh. Eksp. Teor. Fiz. 39 (1960) 1459; Sov. Phys. - JETP 12 , (1961) 1014.
3. J.S. Levinger, The Two and Three Body Problem; Editado por G. Hühler em Springers Tracts in Modern Physics, vol. 71, Springer-Verlag, 1974.
4. E.W. Schmid, H. Ziegelman, The Quantum Mechanical Three- Body Problem, Editado por H. Srumpf em Vieweg Tracts in Pure and Applied Physics, vol. 2, Friedr. Vieweg & Sohn/Pergamon Press, 1974.
5. W. Zickendraht, Construction of a Complete Orthogonal System for the Quantum Mechanical Three-Body Problem, Annals of Physics, 35 (1965) 18.
6. Yu. A. Simonov, The Three-Body Problem. A Complete System of Angular Functions, Yad. Fiz. 3 (1966) 630; Sov. J. Nucl. Phys. 3 (1966) 461.
7. A.M. Badalyan, Yu. A. Simonov, The Three-Body Problem. Equation for the Partial Waves, Yad. Fiz. 3 (1966) 1032; Sov. J. Nucl. Phys. 3 (1966) 755.
8. Yu. A. Simonov, The Hyperspherical Expansion Approach to Nuclear Bound States, Editado por F. Calogero e C.C. Degliatti, em Proceedings of The International Symposium on "Present Status and Novel Developments in the Nuclear Many-Body Problem", Rome 1972, Editrice Compositori, Bologna, 1973.
9. J.D. Louck, H.W. Galbraith, Application of Orthogonal and Unitary Group Methods to the N-Body Problem, Rev. Mod. Phys. 41 (1972) 540.

10. C.D. Lin, Ground State and Elastic Phase Shift of the Electron-Hydrogen System Studied in Hyperspherical Coordinates, Phys. Rev. A12 (1975) 493.
11. K. Roy Chowdhury (Gupta), D.P. Sural, T. Roy, Method of K Harmonics and the Ground-State Energy of the Positronium Negative Ion, Phys. Rev. A12 (1975) 763.
12. H.T. Coelho, L. Consoni, M. Valliêres, K-harmonic Solution for Three Bound Unequal Particles, Rev.Bras.Física, 8 (1978) 734.
13. R.D. Amado, H.T. Coelho, K Harmonics in one Dimension, An.J. Phys. 46 (1978) 1057.
14. C.R. Garibotti, F.F. Grinstein, Summation of Partial Wave Expansions in the Scattering by Long Range Potentials, Preprint IFT-247/77, Instituto de Física Teórica, São Paulo, 1977.
15. H.A. Bethe, E.E. Salpeter, Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms, 1^a edição, Springer-Verlag, 1957.
16. I. Lukáč, The Generalized Symmetrical Jacobis' Coordinates for the Non-Relativistic Many-Body Problem, Preprint E4-10737, JINR (Dubna) 1977.
17. D.I. Blokhintsev, Quantum Mechanics, D. Reidel Publishing Company, 1964, pág. 355.
18. K.D. Granzow, N-Dimensional Total Orbital Angular-Momentum Operator, J. Math. Phys. 4 (1963) 897.
19. M. Valliêres, T.K. Das, H.T. Coelho, Generalized N-Body Harmonic Oscillator Basis Functions for the Hyperspherical Approach, Nucl. Phys. A257 (1976) 389.
20. A.J. Dragt, Classification of Three-Particle States According to SU_3 , J. Math. Phys. 6 (1965) 533.
21. J.M. Lévy-Leblond, M. Lévy-Nahas, Three-Particle Nonrelativistic Kinematics and Phase Space, J.Math.Phys. 6 (1965) 1571.

22. V.D. Efros, Hyperspheric Functions for Three Particles, *Yad. Fiz.* 13 (1971) 1318; *Sov. J. Nucl. Phys.* 13 (1971) 758.
23. V.A. Knyr, Yu. F. Smirnov, K.V. Shirikova, Group of Canonical Transformations and the Method of K Harmonics, *Teor. Mat. Fiz.* 30 (1977) 370.
24. M. Fabre de La Ripelle, The Hyperspherical Formalism, *Rev. Roum. Phys.* 14 (1969) 1215.
25. G. Erens, J.L. Visschers, R. van Wageningen, Solution of a Three-Body Problem in a Six-Dimensional Isotropic Harmonic Oscillator Basis, Edição por J.S.C. McKee e P.M. Rolph em Three-Body Problem in Nuclear and Particle Physics, North-Holland, Amsterdam, 1970.
26. E. Mezbacher, Quantum Mechanics, 2^a edição, John Wiley & Sons, Inc., 1970.
27. W. Magnus, F. Oberhettinger, R.P. Soni, Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics, Springer-Verlag, New York, 1966.
28. M. Moshinsky, The Harmonic Oscillator in Modern Physics: From Atoms to Quarks, Gordon and Breach, 1969.
29. H.T. Coelho, T.K. Das, M. Vallières, A Basis Expansion for the Hyperspherical Approach in a Simple Triton Model. *Rev. Bras. Física*, 7 (1977) 237.
30. G. Erens, J.L. Visschers, R. van Wageningen, Variational Calculations on a Simple Triton Model Using a Complete Hyperspherical Function Basis, *Ann. of Phys.* 67 (1971) 461.
31. V.F. Demin, Yu. E. Pokrovsky, V. D. Efros, Bound-State Properties of Three and Four Nucleons with Realistic Forces, *Phys. Lett.* 44B (1973) 227.
32. I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, Table of Integrals, Series, and Products, 4^a edição, Academic Press, 1965.
33. J.A. Wheeler, *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 48 (1946) 219.

34. G. Ferrante, Annihilation of Positrons from Positronium Negative Ion $e^-e^+e^-$, Phys. Rev. 170 (1968) 76.
35. I. Aronson, C.J. Kleinman, L.S. Pruch, Nonexistence of a Positron-Hydrogen-Atom Bound State, Phys.Rev. A4 (1971) 841.
36. G.D. Doolen, J. Nuttal, C.J. Wherry, Evidence for a Resonance in $e^+ - H$ S-Wave Scattering, Phys.Rev.Lett. 40(1978) 313.
37. G. Fiorentini, G. Torelli, Exotic Atoms, Servizio Documentazione dei Laboratori Nazionali di Frascati, 1977.
38. I.I. Gol'dman, V.D. Krivchenkov, Problems in Quantum Mechanics, Pergamon Press, 1961.
39. C.L. Pekeris, 1^1S , 2^1S , and 2^3S States of H^- and of He, Phys. Rev. 126 (1962) 1470.
40. A.A. Frost, M. Inokuti, J.P. Lowe, Approximate Series Solution of Nonseparable Schrödinger Equations. II. General Three-Particle System with Coulomb Interaction, J. Chem. Phys. 41 (1964) 482.
41. M.H. Chowdhury, D.G. Pitchers, Energy Eigenvalues and Eigenfunctions of Two-Electron Atoms, J.Phys. B10 (1977) 1225.
42. R.K. Colegrave, A.M. King, Binding Energies of Atomic Systems by The Fadeev Method, J. Phys. B10 (1977) L269.
43. R.N. Hill, Proof that the H^- ion has Only One Bound State. Details and Extension to Finite Nuclear Mass, J. Math. Phys. 18 (1977) 2316.
44. D.R. Beck, C.A. Nicolaiades, How Many Bound States do H^- and H^{2-} Have ?, Chem. Phys. Lett. 59 (1978) 525.
45. B.T. Smith, J.M. Boyle, J.V. Dongarra, B.S. Garbow, Y. Ikebe, V.C. Klema, C.B. Moler, Matrix Eigensystem Routines-Eispack Guide, Second Edition, Springer-Verlag, N.York, 1976.
46. International Mathematical and Statistical Libraries Inc., Library Manual, Fifth Edition, 1975.

47. T.R. Schneider, Convergence of Generalized Spherical Harmonic Expansions in the Three Nucleon Bound State, Phys. Lett. 40B (1972) 439.
48. V.F. Demin, Convergence of the Hyperspherical Expansion in the Problem of Three and Four Bodies and the Properties of the Interaction Potentials, Yad. Fiz. 26 (1977) 720; Sov. J. Nucl. Phys. 26 (1977) 379.
49. J. Bruinsma, R. van Wageningen, Calculations of the Triton Binding Energy for Reid's Soft-Core Nucleo-Nucleon Interaction, Phys. Lett. 44B (1973) 221.
50. R.V. Reid, Local Phenomenological Nucleon-Nucleon Potentials, Ann. of Phys. 50 (1968) 411.
51. B. Carnahan, H.A. Luther, J.O. Wilkes, Applied Numerical Methods, John Wiley & Sons, Inc. 1969.
52. G.A. Baker, J.L. Gammel, The Padé Approximant in Theoretical Physics, Academic Press, 1970.
53. C.R. Garibotti, F.F. Grinstein, Punctual Padé Approximants as a Regularization Procedure for Divergent and Oscillatory Partial Wave Expansions of the Scattering Amplitude, Preprint IFT 272/78, Instituto de Física Teórica, São Paulo, 1978.
54. R.C. Johnson, Alternative Approach to Padé Approximants, Invited Talk at the Canterbury International Padé Conference, July 1972.