

ESTUDIO DE PROPIEDADES MEDIAS O GLOBALES

DE SISTEMAS ATOMICOS Y NUCLEARES

FRANCISCO JAVIER GALVEZ CIFUENTES

GRANADA 1985

UNIVERSIDAD DE GRANADA

ACTA DEL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS FISICAS

Curso de 19 85 a 19 86

Folio.....

Número.....

Reunido en el día de la fecha el Tribunal nombrado para el Grado de Doctor de D. Francisco Javier Galvez Gifuentes, el aspirante leyó un discurso sobre el siguiente tema, que libremente había elegido: Estudio de propiedades medias o globales de sistemas atomicos y nucleares

Terminada la lectura y contestadas las objeciones formuladas por los Jueces del Tribunal, éste calificó de Apto " cum laude "

Granada 21 de Octubre de 19 85

EL PRESIDENTE,

El Secretario del Tribunal,

[Signature]
El Vocal,

[Signature]
ALFREDO PONES
El Vocal,

El Vocal,

[Signature]

[Signature]
JOSE LUIS GONZALEZ

[Signature]
FRANCISCO MARCELLAN

Firma del Graduando,

[Signature]

VESTIDURA.

En el día de la fecha se ha conferido a D. el Grado de Doctor en la Facultad de ... conforme a lo prevenido en las disposiciones vigentes.

Granada de de 19

EL DECANO,

CERTIFICO: Que el Acta que antecede concuerda con la del expediente del interesado remitida a la Secretaría de la Universidad.

Granada de de 19

El Catedrático Secretario,

V.º B.º
EL DECANO,

UNIVERSIDAD DE GRANADA
FACULTAD DE CIENCIAS
COMPULSADO Y CONFORME
CON EL ORIGINAL

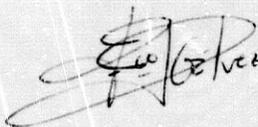


GRANADA 7 DE Noviembre 1990
EL FUNCIONARIO

[Signature]

Memoria que presenta el licenciado
D. Francisco Javier Gálvez Cifuentes
para optar al grado de Doctor en
Ciencias (Sección Físicas)

El Licenciado:



Fdo: Francisco J. Gálvez Cifuentes

El Director del Trabajo:

Fdo: Jesús Sánchez Dehesa
Prof. Titular de Física Atómica, Molecular y Nuclear.

A mi madre.

A Maribel.

Sirvan estas líneas para demostrar mi agradecimiento al Profesor Jesús Sánchez Dehesa por su interés y apoyo en la realización de este trabajo.

Asimismo mi agradecimiento a todos los miembros de los Departamentos de Física Teórica y Física Atómica y Nuclear por la colaboración prestada.

INDICE.

INTRODUCCION.

	1
I. <u>ACOTACION DE LAS ENERGIAS CINETICA Y DE INTERCAMBIO DE LOS SISTEMAS ATOMICOS Y NUCLEARES.</u>	4
1. METODO.	7
2. BONDAD DE LAS COTAS.	15
3. APLICACIONES.	22
3.1. Acotación de la energía cinética de un sistema de muchos fermiones.	22
3.2. Cotas inferiores a la energía cinética nuclear.	25
3.3. Cotas inferiores a la energía cinética atómica.	31
3.4. Acotación de la energía de intercambio.	36
BIBLIOGRAFIA.	41
II. <u>DISTRIBUCION DE NIVELES DE ENERGIA DE SISTEMAS CUANTICOS.</u>	43
1. GENERALIDADES SOBRE EL METODO DE LAN CZOS Y LA DENSIDAD DE NIVELES.	48
1.1. Método de Lanczos.	48
1.2. Densidad de niveles.	51
2. ACOTACION DE AUTOVALORES DEL HAMILTONIANO DE LAN CZOS DE UN SISTEMA CUANTICO.	54
3. METODOS DE CALCULO DE LA DENSIDAD DE CEROS DE POLINOMIOS ORTOGONALES.	57
4. APLICACIONES.	69
4.1. Densidad de niveles de los sistemas cuánticos.	69
4.2. Densidad de ceros de varios sistemas de polinomios ortogonales.	81
APENDICE A. Reglas de suma de ceros $J_r^{(i)}$.	98
APENDICE B. Derivación de la densidad de niveles regular.	100
BIBLIOGRAFIA.	102

III. <u>DETERMINACION DEL POTENCIAL Y ENERGIA ELECTROSTATICOS</u> <u>DEBIDOS A UNA DENSIDAD DE CARGA DE FERMI PARABOLICA.</u>	107
1. POTENCIAL ELECTROSTATICO NUCLEAR.	111
2. ENERGIA ELECTROSTATICA NUCLEAR.	121
APENDICE A. Cálculo de las integrales $I_{1,n}$.	132
APENDICE B. Cálculo de las integrales $J_{i,n}$.	134
APENDICE C. Algunas series especiales.	139
TABLAS.	141
BIBLIOGRAFIA.	149
CONCLUSIONES.	150

INTRODUCCION.

En esta memoria se analizan diversos aspectos relativos a algunas propiedades medias (también llamadas globales o colectivas) de los sistemas cuánticos de muchos fermiones y, particularmente, de los sistemas atómicos y nucleares. Aquí se usa el término "propiedad media" en un doble sentido. Por una parte significa una propiedad que viene descrita por una magnitud física del sistema como un todo, como por ejemplo la energía cinética y la energía electrostática. Por otra, cuando nos referimos al espectro de niveles del sistema, representa también una propiedad en la que participa una porción importante de niveles; este es el caso, por ejemplo, de la densidad de niveles (i.e., el número de niveles por unidad de intervalo de energía).

En primer lugar (Capítulo I) se presenta un método de acotación de las magnitudes físicas de un sistema cuántico que puedan expresarse como integrales de potencias de la función densidad de carga o de materia. Las cotas obtenidas dependen de un solo momento (por lo demás arbitrario) de la densidad citada, obteniendo así una gradación de cotas a cada magnitud física. Este método se aplica detalladamente a la energía cinética y de intercambio de átomos y núcleos, dando lugar a cotas muy precisas.

Al ser la energía cinética una componente esencial de la energía de ligadura de un sistema, la obtención de buenas cotas inferiores a esta energía en términos de parámetros bien conocidos de la densidad de carga ó de materia (e.g., el radio cuadrático medio) es intrínsecamente importante en tanto en cuanto permite soslayar la realización de cálculos detallados de la misma que en muchas ocasiones resultan problemáticos y dependen del modelo usado en la descripción de la estructura interna del sistema. Además, el conocimiento de buenas cotas inferiores a la energía cinética constituye un elemento de referencia para los cálculos autoconsistentes de la estructura de los sistemas fermiónicos.

Por otra parte, la acotación de la energía cinética en términos de la integral de una potencia de la función densidad juega un papel central en el problema de la estabilidad de la materia, como recientemente han hecho notar Lieb y Thirring. En efecto, estos autores han mostrado que la energía del estado fundamental, $E(A)$, de un sistema de A fermiones está acotada inferiormente en la forma $E(A) \geq B \cdot A$, siendo B una constante independiente de

A de valor sensiblemente mejor que el encontrado anteriormente por Dyson y Lenard.

En segundo lugar (Capítulo II) se considera el problema de la determinación de la densidad de niveles (como una función de la energía de excitación) del sistema directamente en términos de la interacción a dos cuerpos característica del sistema. Este es un problema de difícil solución, aún no resuelto. Nosotros lo simplificamos resolviéndolo en los siguientes términos: cálculo de la densidad de niveles a partir del Hamiltoniano de Lanczos del sistema directamente, o sea sin resolver la ecuación de Schrödinger asociada. Esto se lleva a cabo desarrollando previamente técnicas de la teoría de polinomios ortogonales y caracterizando, como hace Bruce French en su método de las distribuciones espectrales, la densidad de niveles por medio de sus momentos (que son trazas de potencias del Hamiltoniano). De paso, se utilizan estas técnicas en el cálculo de la densidad de ceros de algunos sistemas específicos no-triviales de polinomios ortogonales, que son de interés en otros problemas físicos y de los que a menudo no se conocían previamente otro tipo de propiedades espectrales.

Aunque los análisis teóricos del modelo de capas permiten una buena interpretación de la estructura detallada de los estados excitados de baja energía de los sistemas complejos, como ya señalaron Kisslinger-Sorensen y Baranger en los años sesenta, llega un momento más allá del cual tales análisis dejan de ser útiles. Así, por ejemplo, se dispone de información rigurosa, procedente de medidas de niveles de energía de núcleos muy pesados en la región de captura neutrónica, sobre los niveles energéticos desde N a $N + n$, donde n y N son números enteros del orden de cien y un millón respectivamente; sin embargo, parece improbable que algún modelo teórico sea capaz alguna vez de calcular niveles de orden del millón. En efecto, cuando se excita un sistema de muchos cuerpos arbitrario por encima de una cierta energía umbral (e.g., $E \sim 10-50$ MeV en núcleos) el número de grados de libertad que puede adoptar el sistema, y por tanto el número de niveles que puede aparecer en el espectro es tan grande que el conocimiento de las magnitudes de carácter individual (como es la energía y la función de onda) deja de tener sentido para estudiar el espectro del sistema, resultando más significativo la caracterización de éste por magnitudes colectivas de las que la densidad de niveles es quizás la más importante. Aunque en algunos casos, como por ejemplo en física nuclear, se dispone de información abundante de

esta densidad por medio de la mecánica de matrices aleatorias de Wigner, Dyson y Mehta, y del modelo de partícula independiente, aún hoy día constituye un problema abierto. En esta memoria no se adopta el punto de vista probabilista de Wigner y colaboradores sino que se presenta un método de determinación de la densidad de niveles siempre que se disponga del Hamiltoniano de Lanczos del sistema.

Finalmente, el Capítulo III constituye una contribución a la determinación de la energía electrostática nuclear partiendo de expresiones parametrizadas de la densidad de carga, de gran utilidad en la obtención de fórmulas semiempíricas de masa, en el estudio de la fisión nuclear, etc.. Aquí se utiliza la función de Fermi parabólica o triparamétrica como modelo de densidad de carga. Además del parámetro radial, esta función depende del parámetro de difusividad a , que es proporcional a la anchura de la superficie nuclear, y del parámetro parabólico w que nos indica la existencia de una elevación o depresión central en la densidad. Contrariamente a Myers y Swiatecki nosotros determinamos analítica y exactamente el potencial y la energía electrostáticos nucleares partiendo de una densidad de carga de Fermi parabólica, encontrándose expresiones cerradas en términos de los parámetros R , a y w .

I.- ACOTACION DE LAS ENERGIAS CINETICA Y DE INTERCAMBIO DE LOS SISTEMAS ATOMICOS Y NUCLEARES.

La obtención de cotas inferiores para la energía cinética y de intercambio de un sistema de muchos fermiones y su utilización en el estudio de los sistemas atómicos y nucleares es de gran interés en el contexto de, por ejemplo, la teoría de la funcional de la densidad (GAD80) así como en uno de los problemas más fundamentales de la física, el de la estabilidad de la materia (LIE75,76a). En este último problema hay dos aspectos que hemos de distinguir:

(i) ¿Por qué son estables los átomos, i.e. por qué los electrones no caen al núcleo?, o de forma más precisa ¿por qué la energía del estado fundamental de un átomo es finita?. La respuesta está, desde luego, en el hecho de que cuando la función de onda del electrón se contrae, la energía cinética aumenta más rápido de lo que disminuye la energía potencial. Una demostración rigurosa (LIE76a) de ello permite observar la necesidad de ir a un principio de incertidumbre mejor que el ordinario de Heisenberg; nos referimos al principio de Sobolev (SOB38,KAT51).

(ii) ¿Por qué satura la materia, i.e. por qué la energía del estado fundamental está acotada inferiormente por k veces el número total de partículas A del sistema?. Esta cuestión, que es mucho más delicada que la anterior, fue respondida por primera vez por Dyson y Lenard (DYS67a) que encontraron una cota de 10^{14} Rydbergs/partícula. Más tarde, Lieb y Thirring (LIE75) mejoraron sensiblemente este resultado al encontrar una cota de 23 Rydbergs/part. La demostración de la saturación se basa en una cota inferior de la energía cinética T en términos de una integral de la función densidad, a saber (LIE75)

$$(1.1) \quad T \geq \frac{3}{5} \left(\frac{3}{2} \pi\right)^{2/3} q^{-2/3} \int \rho(x)^{5/3} dx$$

donde q es el número posible de estados de spin para cada partícula y donde

hemos utilizado unidades en las que $\hbar^2/2=1$ y $m=1$. Estas unidades serán usadas en este capítulo salvo que se señale otra cosa.

Esta desigualdad juega un papel esencial, siendo válida solamente para sistemas de fermiones, puesto que la materia no saturaría si los electrones fuesen bosones (DYS67b). Un estudio detallado de esta y otras desigualdades de la energía cinética de un sistema de fermiones, así como de sus aplicaciones puede verse en (LIE76b).

Por otra parte, la funcional de energía $E(\rho)$, donde ρ es la densidad de electrones en un átomo o en una molécula, en la teoría de Thomas-Fermi generalizada viene dada por (LIE81)

$$E(\rho) = E_{TF}(\rho) + E_D(\rho) + E_W(\rho)$$

donde los dos últimos sumandos representan, respectivamente, la corrección de Dirac o energía de intercambio

$$(1.2) \quad E_D = -\frac{3}{4} C_e \int [\rho(x)]^{4/3} dx \quad ; \quad C_e = \text{const. positiva}$$

(que se debe a la antisimetrización de la función de onda), y la corrección de von Weiszäcker

$$E_W \sim \int [\nabla^2 \rho^{1/2}(x)]^2 dx$$

(que permite obtener con esta teoría una densidad finita en el núcleo) a la energía del estado fundamental en el modelo de Thomas-Fermi convencional

$$E_{TF}(\rho) = T_{TF}(\rho) + V_{TF}(\rho)$$

Aquí

$$(1.3) \quad T_{TF}(\rho) = k \int [\rho(\vec{r})]^{5/3} d\vec{r}$$

es la energía cinética del sistema, con $k=3\hbar^2(3\pi^2)^{2/3}/10m$ según la

formulación original del modelo, y

$$V_{TF} = -Ze^2 \int \frac{\rho(\vec{r})}{r} d\vec{r} + \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}'$$

denota la energía potencial electrostática debida a la interacción electrón-núcleo y a la autointeracción de la nube electrónica.

Consideraciones de parecida índole pueden hacerse con sistemas nucleares. Más detalles y extensiones de esta teoría pueden consultarse en (KIR67) y (DRE84) para sistemas arbitrarios de muchos fermiones, (LIE81) para sistemas atómicos y moleculares, y (BRA85) para sistemas nucleares.

Puede observarse que tanto la energía de intercambio (1.2) como la energía cinética (1.3) de un sistema de muchos fermiones son magnitudes físicas que, salvo una constante, pueden expresarse en la forma

$$(1.4) \quad w_n = \int [\rho(\vec{r})]^n d\vec{r}$$

donde n es un número real (no necesariamente entero) mayor o igual a la unidad. Estas magnitudes han sido someramente estudiadas (SIC49), (ORD72) para el caso monodimensional en estadística, donde reciben el nombre de "momentos de frecuencia" de la densidad correspondiente. Sin embargo, aparecen repetidamente en diferentes ramas de la física representando magnitudes físicas significativas. En este sentido, veanse por ejemplo las referencias (GAZ81, GAD82, GHO82, PAT82, KVE81, DEH82) además de las mencionadas anteriormente.

En este capítulo describimos primeramente un método que permite acotar inferiormente las magnitudes físicas del tipo (1.4) de un sistema arbitrario de muchas partículas y que tiene la característica singular de que las cotas correspondientes se expresan de manera sencilla y compacta en términos del número total de partículas y del momento alrededor del origen de orden k , $\langle r^k \rangle$, de la densidad monoparticular $\rho(\vec{r})$ del sistema. A continuación, se particulariza al caso de sistemas fermiónicos y las cotas obtenidas se aplican a las energías cinética y de intercambio de los sistemas atómicos y

nucleares. Algunos de los resultados referidos al caso nuclear han aparecido recientemente (DEH85).

En primer lugar (ver Sección I.1) se muestra la forma general de acotar los momentos de frecuencia w_n de una función densidad arbitraria $\rho(\vec{r})$ en términos de los momentos alrededor del origen $\langle r^k \rangle$ de dicha densidad. Después, en la siguiente sección, se hace un estudio de la bondad de las cotas encontradas para diferentes densidades monoparticulares realistas de sistemas atómicos y nucleares. Se observa que las cotas son muy buenas siempre que se utilicen momentos de orden k positivo en el caso nuclear, y de orden k negativo en el caso atómico. En la sección I.3, las cotas obtenidas para $n=5/3$ junto a un teorema de Lieb-Thirring (LIE75,76a) permiten la acotación de la energía cinética de un sistema de muchos fermiones, lo cual es aplicado tanto a los sistemas atómicos como a los nucleares. Esta sección termina con la obtención de cotas superiores a la energía de intercambio de un átomo en el contexto de la teoría de Thomas-Fermi-Dirac, así como a la energía de intercambio nuclear.

I.1.-METODO

En esta sección se presenta un método para obtener cotas inferiores al momento de frecuencia de orden n , w_n , de una función densidad $\rho(\vec{r})$ en términos de un momento arbitrario alrededor del origen $\langle r^k \rangle$.

Dada una distribución $\rho(\vec{r})$ normalizada en la forma:

$$(1.5) \quad A = \int \rho(\vec{r}) \, d\vec{r}$$

definimos el momento de frecuencia de orden n ($n \geq 1$) de esta distribución como

$$(1.6) \quad w_n = \int [\rho(\vec{r})]^n \, d\vec{r}$$

Además, podemos definir los momentos alrededor del origen de orden k de dicha distribución, en caso de que existan, como

$$(1.7) \quad \langle r^k \rangle = \frac{1}{A} \int r^k f(\vec{r}) d\vec{r}$$

Para encontrar una cota inferior a w_n generalizaremos algunas ideas desarrolladas en (MOR52) para funciones densidad definidas en el espacio monodimensional. Sea una función densidad (definida positiva c.p.d.) $f(\vec{r})$ tal que

$$(1.8) \quad A = \int f(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$\sigma^k = A \langle r^k \rangle = \int r^k f(\vec{r}) d\vec{r}$$

y minimicemos la cantidad $\int [f(\vec{r})]^n d\vec{r}$ sujeta a la condición (1.8). Para ello tomemos variaciones en la forma

$$\delta \left[\int [f(\vec{r})]^n d\vec{r} - \lambda \int r^k f(\vec{r}) d\vec{r} - \mu \int f(\vec{r}) d\vec{r} \right] = 0$$

donde λ y μ son multiplicadores de Lagrange. Obtenemos entonces que

$$n[f(\vec{r})]^{n-1} - \lambda r^k - \mu = 0$$

de donde

$$(1.9) \quad f(r) = \left[\frac{\lambda r^k + \mu}{n} \right]^{1/(n-1)}$$

Por supuesto, $r \geq 0$. Suponiendo λ negativo, entonces μ debe ser positivo. Por lo tanto, el intervalo soporte de la densidad $f(r)$ es $[0, (-\lambda/\mu)^{1/k}]$. Podemos hacer un cambio de escala y escribir (1.9) como

$$(1.10) \quad f(r) = \begin{cases} C [a^k - r^k]^{1/(n-1)} & 0 \leq r \leq a \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

El factor C podemos calcularlo mediante la condición de normalización

$$A = \int f(\vec{r}) d\vec{r} = 4\pi C \int_0^a r^2 [a^k - r^k]^{1/(n-1)} dr$$

Teniendo en cuenta (GRA65) que

$$(1.11) \quad \int_0^1 x^{\mu-1} (1-x^\lambda)^{\nu-1} dx = \frac{1}{\lambda} B\left(\frac{\mu}{\lambda}, \nu\right), \text{Re } \mu > 0, \text{Re } \nu > 0, \lambda > 0$$

donde $B(x,y)$ es la función Beta definida por

$$(1.12) \quad B(x,y) = \frac{\Gamma(x) \Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$$

cuyas propiedades son bien conocidas (ABR72), y donde $\Gamma(x)$ es la función gamma (ABR72) que cumple la propiedad

$$(1.13) \quad \Gamma(1+x) = x \Gamma(x)$$

se obtiene

$$(1.14) \quad C = A k \left[4\pi a^{3+k/(n-1)} B\left(\frac{n}{n-1}, \frac{3}{k}\right) \right]^{-1}$$

De la misma forma podemos calcular la cantidad $\overline{r^k}$ ($k > 0$) como

$$\overline{r^k} = A \langle r^k \rangle = 4\pi C \int_0^a r^{k+2} (a^k - r^k)^{1/(n-1)} dr$$

y teniendo en cuenta de nuevo (1.11) obtenemos

$$(1.15) \quad \overline{r^k} = \frac{4\pi C}{k} a^{3+k/(n-1)} a^k B(1+3/k, n/(n-1))$$

Usando (1.12) y (1.13) podemos comprobar que

$$B(1+3/k, n/(n-1)) = \frac{3n-3}{(k+3)n-3} B(3/k, n/(n-1))$$

resultado que, junto a (1.14) permite transformar la ecuación (1.15) en

$$(1.16) \quad \nabla^k = \frac{3n-3}{(k+3)n-3} a^k A$$

Podemos calcular también el momento de frecuencia de orden n de la distribución $f(r)$

$$(1.17) \quad w_n^* = 4 \pi c^n \int_0^\infty r^2 (a^k - r^k)^{n/(n-1)} dr = \\ = \frac{4 \pi}{k} c^n a^{3+k/(n-1)} a^k B(3/k, 1+n/(n-1))$$

donde de nuevo hemos utilizado (1.11)

Usando de nuevo (1.12)-(1.13) es fácil obtener la relación

$$B(3/k, 1+n/(n-1)) = \frac{nk}{(k+3)n-3} B(3/k, n/(n-1))$$

que incluida en (1.17) nos lleva a

$$w_n^* = c^{n-1} a^k \frac{nk}{(k+3)n-3} A$$

Introduciendo en esta última expresión los valores de C y a dados por (1.14) y (1.16) llegamos por fin a la igualdad

$$(1.18) \quad w_n^* = \frac{nk}{(k+3)n-3} a^k A \left[\frac{A^k}{4 \pi a^{3+k/(n-1)} B(n/(n-1), 3/k)} \right]^{n-1} \\ = \frac{nk}{(k+3)n-3} A^n \left[\frac{k \left[\frac{3n-3}{(k+3)n-3} \right]^{3/k}}{4 \pi B(n/(n-1), 3/k) \langle r^k \rangle^{3/k}} \right]^{n-1}$$

Una vez obtenido el momento de frecuencia de orden n para la distribución $f(r)$ definida por (1.10), veamos ahora que dada una función densidad $\rho(\vec{r})$ con su momento de frecuencia w_n definido por (1.6), entonces w_n^* es efectivamente una cota inferior a dicho w_n .

Para ello, supongamos que $\varrho(\vec{r})$ tiene una norma y una cantidad asociada \varGamma^k dadas por (1.8). Tomemos la función $f(r)$ dada por (1.10) tal que su norma y cantidad asociada \varGamma^k coincidan con las de $\varrho(\vec{r})$. Nótese que esto es siempre posible, sin más que ajustar los parámetros C y a de $f(r)$ mediante las expresiones (1.14) y (1.16). Una vez hecho esto, evaluemos la cantidad $w_n - w_n^*$ de la siguiente forma

$$\begin{aligned} w_n - w_n^* &= \int d\vec{r} \left[\varrho(\vec{r})^n - f(r)^n \right] \\ &= \int d\vec{r} \left[\varrho(\vec{r})^n - f(r)^n \right] - nC^{n-1} (a^k - r^k) \left[\varrho(\vec{r}) - f(r) \right] \\ &= \int_{|\vec{r}| \leq a} d\vec{r} \left\{ \varrho(\vec{r})^n - f(r)^n - nf(r)^{n-1} \left[\varrho(\vec{r}) - f(r) \right] \right\} + \\ &\quad + \int_{|\vec{r}| \geq a} d\vec{r} \left[\varrho(\vec{r})^n + nC^{n-1} (r^k - a^k) \varrho(\vec{r}) \right] \end{aligned}$$

Como podemos observar, la segunda integral del último miembro de la igualdad es no-negativa, ya que $\varrho(\vec{r})$ es una distribución definida positiva y estamos integrando en la región $|\vec{r}| \geq a$.

Veamos que la primera integral del último miembro de la igualdad es también positiva. Para ello, utilicemos el desarrollo de Taylor con la forma de Lagrange para el resto (WHI52) y obtenemos

$$\varrho(\vec{r})^n = f(r)^n + nf(r)^{n-1} \left[\varrho(\vec{r}) - f(r) \right] + \frac{n(n-1)}{2} \varrho_1(\vec{r})^{n-2} \left[\varrho(\vec{r}) - f(r) \right]^2$$

donde ϱ_1 es un valor comprendido entre f y ϱ . Por lo tanto, el integrando de la primera integral es también no-negativo, con lo que tenemos que $w_n - w_n^* \geq 0$, o lo que es lo mismo

$$w_n \geq w_n^*$$

En conclusión, dada una distribución $\varrho(\vec{r})$ de la que conocemos su norma y su momento $\langle r^k \rangle$ alrededor del origen de orden k ($k > 0$), sabemos ya que una cota inferior a su momento de frecuencia w_n definido por (1.6) viene dada por

$$(1.19) \quad w_n \geq \frac{nk}{(k+3)^{n-3}} A^n \left[\frac{k \left[\frac{3n-3}{(k+3)^{n-3}} \right]^{3/k}}{4 \pi B(n/(n-1), 3/k) \langle r^k \rangle^{3/k}} \right]^{n-1}$$

Esta desigualdad simple y compacta da pues una cota inferior al momento de frecuencia de orden n de cualquier distribución $\rho(\vec{r})$ definida positiva con un momento $\langle r^k \rangle$ ($k > 0$) alrededor del origen finito. Su importancia se basa, como indicamos en la sección anterior, en que existen cantidades físicas que se expresan o pueden ser determinadas por medio de momentos de frecuencia de funciones densidad.

La desigualdad (1.19) generaliza a la encontrada implícitamente por Lieb (LIE76a) en el sentido de que es válida para cualquier $n \geq 1$, no necesariamente entero.

Como ya hemos mencionado, y como veremos más adelante, las cotas inferiores dadas por (1.19) funcionan bien para un cierto tipo de densidades, pero no lo hacen tan bien para otras. Es por esto por lo que nos planteamos de nuevo el mismo problema pero ampliado a momentos $\langle r^k \rangle$ alrededor del origen con k negativo. Es decir, dada una distribución $\rho(\vec{r})$ normalizada a una cierta cantidad A , y cuyo momento alrededor del origen $\langle r^k \rangle$, $k < 0$, es conocido, queremos encontrar una expresión que minimice su momento de frecuencia w_n definido por (1.6)

Entonces, de forma análoga al caso anterior, dada $\rho(\vec{r})$ tal que

$$(1.20a) \quad A = \int \rho(\vec{r}) \, d\vec{r}$$

$$(1.20b) \quad \langle r^{-k} \rangle = \int \frac{\rho(\vec{r})}{r^k} \, d\vec{r}, \quad k > 0$$

$$(1.20c) \quad w_n = \int [\rho(\vec{r})]^n \, d\vec{r}$$

debemos encontrar una distribución $f(\vec{r})$ normalizada a A y con el mismo $\langle r^{-k} \rangle$, ($k > 0$), de $\rho(\vec{r})$ tal que su momento de frecuencia w_n^* minimice al w_n de $\rho(\vec{r})$.

Trabajando en la misma forma que cuando consideramos momentos de orden k positivo, obtenemos que la función $f(r)$ viene dada por

$$(1.21) \quad f(r) = \begin{cases} c [r^{-k} - b^k]^{1/(n-1)} & r < 1/b \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

Imponiendo la normalización de $f(r)$ a A y utilizando la ecuación (1.11) obtenemos

$$(1.22a) \quad A = \frac{4\pi C}{k} b^{k/(n-1)-3} B(3/k-1/(n-1), n/(n-1))$$

siempre que se verifique

$$(1.22b) \quad k < 3n-3$$

De la misma forma podemos obtener el momento $\langle r^{-k} \rangle$ alrededor del origen de $f(r)$, que resulta valer, después de llevar a cabo algunas transformaciones análogas a las realizadas con $\langle r^k \rangle$, $k > 0$, lo siguiente

$$(1.23a) \quad \langle r^{-k} \rangle = \frac{3n-3}{n(3-k)-3} b^k$$

y de nuevo, debido a las condiciones de (1.11), aparece la siguiente limitación para el valor de k

$$(1.23b) \quad k < (3n-3)/n$$

También podemos evaluar el momento de frecuencia de orden n , w_n^* , de la distribución $f(r)$ dada por (1.21) obteniendo

$$(1.24) \quad w_n^* = \frac{nkA}{n(3-k)-3} c^{n-1}$$

de nuevo con la condición (1.22b)

Ahora bien, teniendo en cuenta las relaciones (1.22a)-(1.23a) la expresión (1.24) se transforma en

$$(1.25a) \quad w_n^* = \frac{n k A^n}{n(3-k)-3} \left[\frac{k \left[\frac{n(3-k)-3}{3n-3} \langle r^{-k} \rangle \right]^{3/k}}{4 \pi B(3/k-1/(n-1), n/(n-1))} \right]^{n-1}, \quad n \geq 1$$

valida para

$$(1.25b) \quad k < (3n-3)/n$$

De nuevo podemos plantearnos si este w_n^* dado por (1.25a) con la condición (1.25b) acota inferiormente al momento de frecuencia de orden n de una distribución arbitraria $\varrho(\vec{r})$ definida positiva, normalizada a A y con un momento $\langle r^{-k} \rangle$ alrededor del origen. La respuesta, en forma análoga a la expuesta anteriormente cuando trabajábamos con momentos de orden k positivos, es afirmativa, por lo que podemos decir que dada una distribución $\varrho(\vec{r})$ que cumple (1.20a)-(1.20c), entonces su momento de frecuencia w_n está acotado inferiormente mediante la relación

$$(1.26) \quad w_n \geq \frac{n k A^n}{n(3-k)-3} \left[\frac{k \left[\frac{n(3-k)-3}{3n-3} \langle r^{-k} \rangle \right]^{3/k}}{4 \pi B(3/k-1/(n-1), n/(n-1))} \right]^{n-1}$$

siempre y cuando se cumpla la relación (1.25b)

Nótese que, debido a la relación (1.25b), podremos acotar inferiormente el momento de frecuencia w_n de una cierta función densidad $\varrho(\vec{r})$ en función de $\langle r^{-1} \rangle$ solamente si $n > 3/2$. De la misma forma, la acotación inferior en función de $\langle r^{-2} \rangle$ será sólo posible para aquellos momentos de frecuencia de orden n mayor que 3. Debido a que los valores de n en los que estamos interesados son $n=5/3$ (energía cinética) y $n=4/3$ (energía de intercambio), no consideraremos el momento alrededor del origen $\langle r^{-2} \rangle$, ni aquellos $\langle r^{-k} \rangle$ con $k \geq 3$; y para $n=4/3$ no podremos considerar el momento $\langle r^{-1} \rangle$ desde el punto de vista de calcular cotas inferiores a dicho momento de frecuencia.

I.2 BONDAD DE LAS COTAS

Aquí se comparan las cotas obtenidas en la sección anterior con el valor exacto de los correspondientes momentos de frecuencia para varias distribuciones que aparecen frecuentemente en el estudio de los sistemas atómicos y nucleares de A partículas. Consideraremos, además de la distribución uniforme, las distribuciones gaussiana modificada (DEJ74), de Fermi a dos parámetros (DEJ74), de Thomas-Fermi (MAR75,83) y de Thirring (THI81). La segunda y la tercera permiten obtener buenas parametrizaciones de la densidad de nucleones en núcleos ligeros y pesados, mientras que las dos últimas aproximan razonablemente bien (salvo la finitud en el origen) la densidad de electrones en un átomo.

Una idea de la bondad de las cotas (1.19) y (1.26) para cada distribución viene indicada por el error relativo

$$(1.27) \quad \epsilon_{\text{rel}} = \frac{\text{valor exacto} - \text{cota}}{\text{valor exacto}}$$

A.- Distribución Uniforme

Definición:

$$(1.28) \quad \rho(r) = \begin{cases} q & r \leq R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

Normalizando a A se obtiene la relación

$$A = R^3 4\pi q/3$$

Los momentos alrededor del origen $\langle r^k \rangle$, $k=-1,1,2,\dots$ de esta distribución y los momentos de frecuencia w_n toman los valores

$$\langle r^k \rangle = \frac{3R^k}{k+3}, \quad k = -1,1,2,\dots$$

$$w_n = \left[\frac{3}{4\pi R^3} \right]^{n-1} A^n$$

respectivamente.

TABLA I: Error relativo de las cotas inferiores obtenidas en función de $\langle r^k \rangle$, $k = -1, 1, 2, 3, 4, 7$ y 10 , para los momentos de frecuencia w_n , $n = 4/3, 5/3, 2, 3$ y 4 , cuando la distribución considerada es la uniforme.

$k \backslash n$	-1	1	2	3	4	7	10
4/3		0.114	0.082	0.064	0.053	0.035	0.026
5/3	0.997	0.157	0.117	0.094	0.078	0.052	0.039
2	0.999	0.180	0.137	0.111	0.093	0.062	0.047
3	0.999	0.210	0.166	0.136	0.115	0.079	0.060
4	0.999	0.227	0.178	0.147	0.125	0.086	0.066

TABLA II: Error relativo de las cotas inferiores obtenidas en función de $\langle r^k \rangle$, $k = -1, 1, 2, 3$ y 4 , para los momentos de frecuencia w_n , $n = 4/3, 5/3, 2, 3$ y 4 , cuando la distribución considerada es la gaussiana modificada dada por (1.29) Los parámetros a y α usados son $a = 1.805$, $\alpha = 1.517$.

$k \backslash n$	-1	1	2	3	4
4/3		0.009	0.005	0.016	0.031
5/3	0.405	0.017	0.033	0.065	0.100
2	0.283	0.044	0.085	0.137	0.190
3	0.213	0.201	0.300	0.393	0.474
4	0.248	0.387	0.510	0.611	0.690

El error relativo de las cotas inferiores obtenidas viene indicado para nuestro caso en la Tabla I para varios valores de n y k .

B.- Distribución Gaussiana Modificada

Definición

$$(1.29) \quad f(r) = \int_0^\infty (1 + \alpha r^2/a^2) e^{-r^2/a^2}$$

Normalizando a A se obtiene

$$A = \pi^{3/2} \int_0^\infty a^3 (1 + 3\alpha/2)$$

Los momentos alrededor del origen vienen dados por

$$\langle r^{2k+1} \rangle = \frac{4}{\pi^{1/2} (2+3\alpha)} (k+1)! a^{2k+1} (1+(k+2)\alpha), \quad k=-1,0,1,\dots$$

$$\langle r^{2k} \rangle = \frac{a^{2k}}{2+3\alpha} \frac{(2k+1)!!}{2^k} (2+(2k+3)\alpha), \quad k=1,2,\dots$$

Para los momentos de frecuencia w_n , con n entero, se obtienen expresiones analíticas análogas más complicadas. Cuando n no es entero, los momentos de frecuencia de orden n tenemos que evaluarlos numéricamente.

El error relativo de las cotas inferiores obtenidas viene dado, para una distribución de este tipo, en la Tabla II para varios valores de n y k . En esta tabla hemos usado para los parámetros a y α de (1.29) aquellos valores que permiten reproducir los resultados experimentales de colisión e^{-16} (DEJ74), i.e. $a=1.805$, $\alpha=1.517$.

C.- Distribución de Fermi

Definición

$$(1.30) \quad f(r) = \frac{\int_0^\infty}{1+e^{(r-R)/a}}$$

TABLA III: Error relativo de las cotas inferiores obtenidas en función de $\langle r^k \rangle$, $k = -1, 1, 2, 3$ y 4 , para los momentos de frecuencia w_n , $n = 4/3, 5/3, 2, 3$ y 4 , cuando la distribución considerada es la de Fermi dada por (1.30). Los parámetros usados son $a = 0.563$, $R = 3.51$.

$k \backslash n$	-1	1	2	3	4
4/3		0.015	0.008	0.018	0.034
5/3	0.420	0.017	0.035	0.064	0.101
2	0.305	0.046	0.078	0.128	0.184
3	0.228	0.168	0.257	0.351	0.442
4	0.235	0.320	0.440	0.551	0.644

La norma y los momentos alrededor del origen de orden k pueden evaluarse analíticamente usando por ejemplo algunas técnicas integrales de (KRI81), (ver Apéndice A del tercer capítulo). Las relaciones que se obtienen normalizando la función (1.30) a A , y las expresiones para algunos de los primeros momentos alrededor del origen las exponemos a continuación.

$$A = 4\pi \int_0^{\infty} \left(\frac{R^3}{3} + \frac{\pi^2}{3} a^2 R - 2a^3 \beta_3(R/a) \right)$$

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{4\pi \int_0^{\infty}}{A} \left(R^2/2 + \pi^2 a^2/6 + a^2 \beta_2(R/a) \right)$$

$$\langle r \rangle = \frac{4\pi \int_0^{\infty}}{A} \left(R^4/4 + \pi^2 a^2 R^2/2 + 7\pi^4 a^4/60 + 6a^4 \beta_4(R/a) \right)$$

donde los símbolos β_i denotan las series (LEW81)

$$\beta_i(R/a) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k e^{-kR/a}}{k^i}$$

Los momentos de frecuencia w_n , con n entero, pueden ser calculados también en una forma analítica, siendo su expresión más complicada. En el caso de que n no sea entero, la evaluación de estos momentos de frecuencia hay que llevarla a cabo en una forma numérica.

El error relativo de las cotas inferiores obtenidas para una distribución de Fermi y distintos valores de n y k los damos en la Tabla III. En esta tabla hemos tomado para los parámetros a y R los valores 0.563 y 3.51, respectivamente, que reproducen los resultados experimentales de colisión $e^{-40}\text{Ca}$ (DEJ74).

D.- Distribución de Thomas-Fermi.

Definición

$$(1.31) \quad \varphi(r) = \begin{cases} k (Z/r - \mu)^{3/2} & Z/r - \mu > 0 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

En particular, el valor $k=2^{3/2}/3\pi^2$ es utilizado en (MAR83), ajustando el

parámetro μ de forma que $\rho(r)$ esté normalizada a A.
Norma

$$A = \frac{2^{1/2} Z^3}{6 \mu^{3/2}}$$

Los momentos alrededor del origen de esta distribución vienen dados por

$$\langle r^{-1} \rangle = 2^{1/2} 18^{1/6} Z/A^{2/3}$$

$$\langle r^k \rangle = 16 \frac{18^{k/3}}{\pi} B(k+3/2, 5/2) A^{2k/3} / Z^k$$

siendo $B(x,y)$ la función Beta definida por (1.12)

El momento de frecuencia w_n de esta distribución existe sólo en el caso de que $n < 2$. Para estos valores de n su valor es

$$w_n = 4\pi \left[\frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \right]^n 18^{1-n/2} B((6-3n)/2, (2+3n)/2) Z^{3n-3} A^{2-n}$$

El error relativo para las cotas inferiores obtenidas en este caso toma el valor para $n=4/3$ y $k=1,2$ y 3 de 0.125, 0.189 y 0.233, respectivamente. En el caso $n=5/3$ y $k=-1,1,2,3$ se obtienen respectivamente los siguientes valores del error relativo: 0, 0.526, 0.603, y 0.649. Nótese que para $n=5/3$, la función densidad que minimiza en función de $\langle 1/r \rangle$ es precisamente la densidad dada por el modelo de Thomas-Fermi, de ahí que el error relativo de la cota inferior en el caso $n=5/3$ y $k=-1$ valga cero. Recordemos que en caso $n = 4/3$ no es posible dar una cota inferior en función de $\langle r^{-1} \rangle$ debido a la restricción (1.25b).

E.- Distribución de Thirring.

Definición

$$(1.32) \quad \rho(r) = \frac{C}{4\pi r(r+a)^4}, \quad a = (9/2A)^{1/3}$$

Normalizando a A se obtiene

$$C = 6(9/2)^{2/3} A^{1/3}$$

Como se puede observar directamente los únicos momentos alrededor del origen que existen para esta distribución son $\langle r^{-1} \rangle$ y $\langle r \rangle$. El valor de estos momentos viene dado por

$$\langle r^{-1} \rangle = 4(9/2)^{2/3} A^{1/3} / 9$$

$$\langle r \rangle = 2(9/2)^{1/3} A^{-1/3}$$

Igualmente puede verse que el momento de frecuencia w_n existe sólo para $n < 3$. Para estos posibles valores de n , el valor de w_n viene dado por

$$w_n = \frac{18}{3^n \pi^{n-1}} B(5n-3, 3-n) A^{2n-1}$$

El error relativo para las cotas inferiores vale 0.774 cuando $n=4/3$ y acotamos en función de $\langle r \rangle$. Cuando $n=5/3$ el error relativo vale 0.099 y 0.865 según se acote en función de $\langle r^{-1} \rangle$ ó $\langle r \rangle$, respectivamente. En el caso $n=2$, los valores del error relativo vienen dados por 0.3086 y 0.874, de nuevo acotando en función de $\langle r^{-1} \rangle$ ó $\langle r \rangle$ respectivamente

Como puede observarse en los resultados expuestos en las tablas I-III, junto con los resultados dados en los apartados D y E de esta sección, fijado un $k > 0$, el error relativo para las cotas inferiores aumenta con n . O lo que es lo mismo, cuanto menor sea el orden del momento de frecuencia que queremos acotar, mayor será la fiabilidad de la cota obtenida. En particular, para $n=4/3$, $n=5/3$, que son los casos en los que estamos interesados, pueden obtenerse cotas muy buenas en, al menos, los casos de las densidades consideradas que corresponden a densidades de carga y de materia realistas de ciertos sistemas atómicos y nucleares.

De la misma forma, fijado un n , la cota inferior obtenida en función de $\langle r^k \rangle$, con $k > 0$, empeora en todos los casos al aumentar k , salvo en el caso de una distribución uniforme donde dichas cotas mejoran al tomar k mayores. Este resultado es lógico: la densidad que minimiza en función de $\langle r^k \rangle$ se va

aproximando más y más a la densidad uniforme cuando k aumenta, coincidiendo con ella cuando k tiende a infinito.

Además, nótese que las cotas obtenidas para el momento de frecuencia w_n en función de $\langle 1/r \rangle$ funcionan bien allí donde no lo hacen las cotas en función de $\langle r^k \rangle$, $k > 0$, es decir, en densidades como las expuestas en los apartados D y E.

I.3.-APLICACIONES

I.3.1.- Acotación de la energía cinética de un sistema de muchos fermiones.

Consideremos un sistema de A fermiones con q estados de spin posibles para cada partícula. La función de onda que describe al sistema

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_A)$$

es antisimétrica en los pares (\vec{r}_i, σ_i) . La energía cinética del sistema viene definida (LIE76a) por

$$T = A \sum_{\sigma_i=1}^q \int |\vec{\nabla}_i \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A; \sigma_1, \dots, \sigma_A)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_A$$

y la densidad monoparticular, o sea la probabilidad de encontrar una partícula en \vec{r} , viene dada (LIE76a) por

$$g(\vec{r}) = A \sum_{\sigma_i=1}^q \int |\Psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_A)|^2 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_A$$

En 1975, Lieb y Thirring (LIE75) probaron que la aproximación de Thomas-Fermi es una cota inferior de la energía cinética del sistema de A fermiones. Exactamente, estos autores mostraron que si Ψ está normalizada a la unidad, o sea si

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{\sigma_i=1}^q \int |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A; \sigma_1, \dots, \sigma_A)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_A = 1$$

entonces

$$(1.33) \quad T \geq Kq^{-2/3} \int [\rho(\vec{r})]^{5/3} d\vec{r} \equiv Kq^{-2/3} w_{5/3}$$

con

$$K = \frac{3}{5} \left[\frac{3\pi}{2} \right]^{2/3} = 1.6865$$

Esta cota, que sólo es válida para fermiones, es esencial (LIE75,76a) para poder explicar la estabilidad de la materia. Dyson (DYS67b) mostró que la materia no saturaría si los electrones fueran bosones. En efecto, el principio de Pauli, o sea la naturaleza antisimétrica de la función de onda del sistema, juega un papel determinante en la obtención de esta cota. Nos dice que al ir añadiendo fermiones al sistema, la energía cinética crece al menos tan rápido como $A^{5/3}$ (LIE76a). Esta presión de Fermi se hace necesaria para evitar un colapso, o sea, sin ella la materia no sería estable.

Comparando esta cota con la expresión de la energía cinética del estado fundamental de partículas libres en una caja de volumen V , Lieb (LIE76a) conjeturó razonablemente que la cota dada por (1.33) debiera ir multiplicada por un factor $(4\pi)^{2/3} = 5.405$. En otras palabras, la conjetura de Lieb es que

$$(1.34) \quad T \geq (4\pi)^{2/3} Kq^{-2/3} w_{5/3} = 9.116 q^{-2/3} w_{5/3}$$

De hecho el mismo autor ha mejorado recientemente la cota dada por (1.33) en un factor multiplicativo 1.643. Ver en este sentido (LIE76a, pag.556) y (LIE84, ecuación (52)). Así pues la desigualdad (1.33) se transforma en

$$(1.35) \quad T \geq K_1 q^{-2/3} w_{5/3}$$

con $K_1 = 1.643K = 2.7709$. Obsérvese que la cota conjeturada por Lieb es igual a la cota dada en esta desigualdad multiplicada por el factor 3.290.

La desigualdad (1.35) nos muestra que la energía cinética de un sistema fermiónico está acotada inferiormente por el momento de frecuencia de orden $n=5/3$ de su densidad monoparticular, salvo el factor $2.7709q^{-2/3}$.

Por otra parte, en la sección I.1 hemos visto que los momentos de frecuencia w_n están a su vez acotados inferiormente. En particular, las desigualdades (1.19) y (1.26) nos dicen que para $n=5/3$ se verifica que

$$(1.36) \quad w_{5/3} \geq \frac{5k}{5k+6} \left[\frac{k [6/(5k+6)]^{3/k}}{4\pi B(5/2, 3/k)} \right]^{2/3} \frac{A^{5/3}}{\langle r^k \rangle^{2/k}}$$

para $k = 1, 2, 3, \dots$, y que

$$(1.37) \quad w_{5/3} \geq \frac{5}{36} \left[\frac{4}{\pi^2} \right]^{2/3} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^2 A^{5/3}$$

respectivamente. Combinando cada una de estas inecuaciones con la desigualdad (1.35) se obtiene que

$$(1.38) \quad T \geq T_C = \frac{5k}{5k+6} \left[\frac{k [6/(5k+6)]^{3/k}}{4\pi B(5/2, 3/k)} \right]^{2/3} K_1 q^{-2/3} \frac{A^{5/3}}{\langle r^k \rangle^{2/k}}$$

para $k = 1, 2, \dots$, y que

$$(1.39) \quad T \geq T'_C = \frac{5}{36} \left[\frac{4}{\pi^2} \right]^{2/3} K_1 q^{-2/3} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^2 A^{5/3} = .2108 q^{-2/3} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^2 A^{5/3}$$

Estas desigualdades nos suministran cotas a la energía cinética de un sistema de A fermiones que dependen solamente del número total de partículas del sistema y de un momento alrededor del origen de la densidad monoparticular del sistema. Así pues, en realidad las inecuaciones (1.38) y (1.39) nos permiten obtener una infinitud de cotas inferiores a la energía cinética a medida que cambiamos de momento $\langle r^k \rangle$. Surge inmediatamente la pregunta de cuál será la mejor de todas estas cotas. La respuesta es que ello depende de cada caso concreto, como de hecho ya ha quedado puesto de manifiesto en la sección anterior al estudiar la bondad de las cotas a los momentos de frecuencia w_n .

Señalemos finalmente que las correspondientes cotas "conjeturadas" se obtienen de las anteriores sin más que multiplicarlas por el factor 3.290, o sea que

$$(1.40) \quad T_C^{\text{con}} = 3.290 T_C ; T_C'^{\text{con}} = 3.290 T_C'$$

I.3.2.- Cotas inferiores a la energía cinética nuclear.

Teniendo en cuenta la desigualdad (1.34) y las tablas II y III de la sección I.2, que nos muestran que el momento $w_{5/3}$ de densidades monoparticulares realistas (Fermi, gaussiana modificada) se deja acotar mejor en términos de momentos $\langle r^k \rangle$ con k positivo, es fácil concluir que la desigualdad (1.38) suministrará mejores cotas que la (1.39) a la energía cinética T de un núcleo.

A partir de (1.38) y como cada nucleón dispone de cuatro estados de spin posibles (i.e. $q=4$), resulta que la expresión

$$(1.41) \quad T_C = \frac{5.4982k}{5k+6} \left[\frac{k [6/(5k+6)]^{3/k}}{4 \pi B(5/2, 3/k)} \right]^{2/3} \frac{A^{5/3}}{\langle r^k \rangle^{2/k}}$$

válida para $k=1,2,3,\dots$, nos acota inferiormente la energía cinética nuclear en términos del número total de nucleones A y del momento alrededor del origen $\langle r^k \rangle$ de la densidad mononucleónica de dicho núcleo. En caso de haber considerado separadamente protones y neutrones (DEH85) hubiéramos obtenido la expresión

$$(1.42) \quad T_C'' = \frac{8.7278k}{5k+6} \left[\frac{k [6/(5k+6)]^{3/k}}{4 \pi B(5/2, 3/k)} \right]^{2/3} \left[\frac{N^{5/3}}{\langle r^k \rangle_n^{2/k}} + \frac{Z^{5/3}}{\langle r^k \rangle_p^{2/k}} \right]$$

con $k=1,2,3,\dots$, y donde N es el número de neutrones, Z el de protones y $\langle r^k \rangle_{n,p}$ denota el momento alrededor del origen de la densidad de neutrones y de protones respectivamente.

TABLA IV: Error relativo de las cotas inferiores obtenidas en función de $\langle r^k \rangle$, $k = 1, 2, 3$ y 4 , para el momento de frecuencia $w_{5/3}$ cuando las distribuciones consideradas para los diversos núcleos son la gaussiana modificada ($A \leq 16$) y la de Fermi ($A \geq 24$). Los parámetros a , α y R han sido tomados (DEJ74) de tal forma que reproduzcan los experimentos de scattering electrón-núcleo.

Núcleo	a	α ó R	k=1	k=2	k=3	k=4
^{10}B	1.71	0.837	0.016	0.044	0.082	0.123
^{12}C	1.687	1.067	0.015	0.039	0.075	0.113
^{14}N	1.76	1.234	0.016	0.036	0.070	0.107
^{16}O	1.833	1.544	0.017	0.033	0.065	0.100
^{24}Mg	0.548	2.99	0.025	0.046	0.085	0.129
^{28}Si	0.569	2.93	0.026	0.052	0.095	0.143
^{40}Ca	0.563	3.51	0.024	0.035	0.064	0.100
^{56}Fe	0.5935	3.971	0.024	0.030	0.054	0.086
^{62}Ni	0.548	4.223	0.027	0.023	0.038	0.062
^{112}Cd	0.532	5.38	0.038	0.019	0.020	0.030
^{124}Sn	0.539	5.44	0.038	0.020	0.021	0.031
^{148}Nd	0.644	5.6703	0.031	0.020	0.027	0.044
^{184}W	0.535	6.51	0.048	0.023	0.016	0.019
^{208}Pb	0.549	6.624	0.048	0.022	0.016	0.019
^{238}U	0.605	6.8054	0.044	0.021	0.017	0.022

Para los núcleos en que los valores esperados $\langle r^k \rangle$ de neutrones y protones sean iguales, la cota T_C'' es ligeramente superior que T_C y por tanto es mejor cota. Ambos valores coinciden cuando $N = Z = A/2$. En el caso de que la densidad neutrónica $\rho_n(\vec{r})$ sea proporcional a la protónica $\rho_p(\vec{r})$, e.g. $\rho_n(\vec{r}) = N \rho_p(\vec{r})/Z$, entonces los momentos $\langle r^k \rangle$ de ambas densidades coinciden. Aquí supondremos que

$$\langle r^k \rangle_p = \langle r^k \rangle_n$$

ya que su diferencia afecta de forma poco significativa al valor de la cota.

Veamos ahora qué valor de k nos suministra la mejor cota T_C . Para ello recordemos que, según (1.34), T_C es directamente proporcional a $w_{5/3}$. En la tabla IV se muestra en las últimas cuatro columnas el error relativo (1.27) de las cotas inferiores (1.36) a $w_{5/3}$ para varios núcleos y para varios valores de k , que nos da una idea de la bondad de tales cotas. Los momentos $\langle r^k \rangle$ involucrados en el cálculo de las cotas a $w_{5/3}$ contenidas en la tabla han sido evaluados suponiendo una distribución gaussiana, $\rho(r) = (1 + \alpha(r/a)^2)e^{-(r/a)^2}$, y una de tipo Fermi, $\rho(r) = 1/(1 + e^{(r-R)/a})$ para los núcleos con $A \leq 16$ y con $24 \leq A \leq 238$, respectivamente, considerados en ella. Los parámetros (a, α) y (a, R) que caracterizan tales distribuciones y que se muestran en las dos primeras columnas de la tabla, han sido tomadas de (DEJ74), donde se recogen aquellas distribuciones mononucleónicas que son capaces de dar cuenta de los datos de los experimentos de difusión de electrones por núcleos.

Esta tabla nos muestra algunas características dignas de mención:

(i) Para $k = 1$ ó 2 , o sea utilizando el centroide $\langle r \rangle$ o la varianza $\langle r^2 \rangle$ de la densidad mononucleónica en el cálculo de la cota, el error relativo de esta es menor del 5.2% en todos los núcleos considerados (que constituye una muestra bastante representativa de la tabla periódica de núcleos).

(ii) La mejor cota se obtiene para un k cuyo valor aumenta al subir en la tabla periódica. En efecto el k óptimo es igual a 1 para núcleos ligeros ($10 \leq A \leq 56$), a 2 para núcleos medios ($62 \leq A \leq 148$) y a 3 para núcleos pesados ($184 \leq A \leq 238$). Esto puede entenderse cualitativamente si nos fijamos en el

TABLA V: Energías monoparticulares promediadas (primera columna) y la energía por partícula E/A (segunda columna) obtenidas en diversos cálculos autoconsistentes. Se muestra además la energía cinética por partícula $\langle T \rangle$ obtenida a partir de la ec. (1.43). Todos estos datos vienen expresados en MeV.

Nucleo	$-1/2A(\sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda})$	E/A	$\langle T \rangle$	Ref.
$^{16}_O$	11.0438	-4.41	13.27	(BRU61)
"	10.91	-2.41	17.0	(KER66)
"	11.71	-3.84	15.73	(DAV69)
"	13.1	-6.05	14.1	(VAU69)
$^{40}_{Ca}$	12.85	-6.12	13.46	(BRU61)
"	12.62	-3.74	17.76	(KER66)
"	14.3	-4.20	20.2	(DAV69)
$^{90}_{Zr}$	14.92	-6.28	17.29	(VAU69)
$^{208}_{Pb}$	15.81	-2.82	25.99	(DAV69)
"	14.40	-5.40	18.0	(VAU69)

método de obtención de las cotas a w_n en función de $\langle r^k \rangle$, $k=1,2,\dots$ descrito en la sección I.1. Allí vimos que la función densidad que minimiza dicho momento de frecuencia depende de n y k . En el caso particular $n=5/3$, esta función es

$$\rho(r) = \begin{cases} (a^k - r^k)^{3/2} & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

Aquí se observa que al aumentar k , la función $\rho(r)$ se aproxima a una distribución uniforme. Por otra parte, cuando el número másico nuclear crece, la densidad monoparticular se acerca a la función uniforme. De aquí que al pasar de núcleos ligeros a pesados, las funciones minimizadoras de $w_{5/3}$ serán las más parecidas posibles a las realistas para valores de k distintos que irán progresivamente aumentando.

(iii) En todos los núcleos considerados, el error relativo de la mejor cota es siempre menor del 3%.

(iv) El error relativo de la cota obtenida a partir del radio cuadrático medio es ≤ 2 para los núcleos con $A \geq 62$.

A continuación mostraremos explícitamente los valores exactos, T_C'' , dados por la expresión (1.42), y conjeturados $T_C''^{\text{con}} = 3.290T_C''$ de las mejores cotas inferiores (expresadas en MeV) a la energía cinética de algunos núcleos ($^{16}_0\text{O}$, $^{40}_{20}\text{Ca}$, $^{90}_{40}\text{Zr}$ y $^{208}_{82}\text{Pb}$). Esto se hace en la tabla VI, en donde se lleva a cabo también una comparación con los valores de la energía cinética nuclear (en MeV) hallada en varios cálculos autoconsistentes no renormalizados de tipo Hartree-Fock y Brueckner-Hartree-Fock (SVE79,80). En estas dos teorías se verifica de forma exacta la relación

$$(1.43) \quad \frac{E}{A} = \frac{1}{2} \langle T \rangle + \frac{1}{2A} \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda}$$

que nos liga la energía de enlace por nucleón E/A y la energía monoparticular media con la energía cinética media $\langle T \rangle$ (BEC70), (KOL72). Partiendo de los valores de las dos primeras energías, puede obtenerse una estimación teórica de $\langle T \rangle$. Esto se lleva a cabo explícitamente en la Tabla V para varios cálculos autoconsistentes.

TABLA VI: Comparación de las mejores cotas inferiores (exacta y "conjeturada") a la energía cinética nuclear con las obtenidas mediante diversos cálculos autoconsistentes. En la última fila se dan los valores pseudoempíricos encontrados por Svenre para algunos núcleos.

Tipo de calculo	Magnitud (MeV)	Nucleo			
		$^{16}_O$	$^{40}_{Ca}$	$^{90}_{Zr}$	$^{208}_{Pb}$
Cota inferior exacta	T_C''	65.0	187.1	466.2	1148.4
Cota inferior conjeturada	$T_C''^{con}$	213.9	615.6	1533.8	3778.4
B-H-F (BRU61)	$\langle T \rangle$	212.32	538.4		
H-F (KER66)		272.0	710.4		
B-H-F (DAV69)		251.7	808		5405.9
H-F (VAU69)		225.6	632.8	1556.1	3744.0
Valor pseudoempirico (SVE80)		234.5			3855.6

En la tabla VI también se muestran en la última fila los valores semiempíricos (en MeV) de la energía cinética media de los núcleos ^{16}O y ^{208}Pb obtenidos por Svenne (SVE80). Este autor determina la energía cinética media por medio de la fórmula $T = 2C \langle r^2 \rangle^{-1}$, donde C es una constante que se ajusta a fin de que la relación (1.43) se satisfaga pero tomando los valores experimentales para la energía total y las energías monoparticulares. Para los núcleos ^{16}O y ^{208}Pb , Svenne obtiene para C los valores de 52.4 y 282.6 MeV.fm² respectivamente.

De la tabla VI merecen hacerse algunas consideraciones. En primer lugar, la cota T_C^u y su valor conjeturado $T_C^{u\text{con}}$ son siempre mayores del 22% y 70%, respectivamente, de la energía cinética obtenida en varios cálculos autoconsistentes. Además, se observa que la cota modificada para tener en cuenta la conjetura de Lieb es del mismo orden de magnitud (coincidiendo en algunos casos prácticamente) que los valores autoconsistentes de la energía cinética. Digamos finalmente que dicha cota $T_C^{u\text{con}}$ se comporta de forma similar a la energía cinética obtenida semiempíricamente al menos en los dos núcleos en que la comparación es posible (SVE80).

Debido a que una de las mejores magnitudes nucleares conocidas es el radio cuadrático medio, en la Tabla VII presentamos la cota inferior a la energía cinética en función de $\langle r^2 \rangle$ y su valor conjeturado para diversos núcleos de la tabla periódica. Como puede observarse la diferencia es poco significativa cuando se comparan estas cotas con las mejores cotas en función de k dadas en la tabla VI.

I.3.3.- Cotas inferiores a la energía cinética atómica.

Las desigualdades (1.38) y (1.39) indican que las expresiones

$$(1.44) \quad T_C = \frac{8.7278k}{5k+6} \left[\frac{k[6/(5k+6)]^{3/k}}{4\pi B(5/2, 3/k)} \right]^{2/3} \frac{Z^{5/3}}{\langle r^k \rangle^{2/k}} ; k=1,2,\dots$$

TABLA VII: Cotas inferiores (exacta y "conjeturada") a la energía cinética de diversos núcleos en función del radio cuadrático medio.

Nucleo	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$ (fm)	T_C'' (MeV)	T_C'' con
^{10}B	2.45	36.0	118.3
^{12}C	2.454	48.6	159.8
^{14}N	2.58	56.8	186.9
^{16}O	2.718	63.9	210.4
^{24}Mg	3.08	97.9	322.0
^{28}Si	3.10	124.9	410.9
^{40}Ca	3.43	184.9	608.3
^{56}Fe	3.787	266.5	876.7
^{62}Ni	3.854	305.6	1005.4
^{112}Cd	4.61	575.8	1894.5
^{124}Sn	4.666	703.7	2315.1
^{148}Nd	5.002	784.8	2582.0
^{184}W	5.42	962.1	3165.4
^{208}Pb	5.521	1141.5	3755.5
^{238}U	5.8434	1280.2	4211.9

TABLA VIII: Cotas inferiores (exacta y "conjeturada") a la energía cinética de diversos átomos en función de $\langle 1/r \rangle$ y haciendo uso de teorema del virial. En la tercera columna se dan los valores de $\langle T \rangle$ obtenidos en (HUA76) y en la cuarta el error relativo para la cota inferior conjeturada.

Z	T'_C (u.a.)	T'^{con}_C (u.a.)	$\langle T \rangle$ (u.a.)	ϵ_{rel}
6	8.46	27.83	37.128	0.250
12	42.53	140.24	199.234	0.296
18	109.79	361.21	530.176	0.319
28	307.82	1012.74	1541.276	0.343
48	1082.67	3561.97	5859.553	0.392
62	1967.19	6472.05	11299.727	0.427
82	3777.15	12426.82	24306.195	0.489

y

$$(1.45) \quad T'_C = 0.13277 Z^{5/3} \langle 1/r \rangle^2$$

acotan inferiormente la energía cinética de un átomo en términos de su número atómico Z y de un momento alrededor del origen de orden $k = -1, 1, 2, \dots$ de su densidad de electrones. Para obtener estas expresiones hemos tenido en cuenta que el número total de partículas del sistema es $A=Z$ y que cada electrón sólo dispone de dos estados de spin, por lo que $q=2$. Los correspondientes valores de las cotas T'_C y T''_C en la conjetura de Lieb, o sea, T'^{con}_C y T''^{con}_C se obtienen sin más que multiplicar las primeras por el factor 3.290 de acuerdo a las expresiones (1.40).

Haciendo uso del teorema del virial, puede mostrarse (THI81, pag271) que

$$(1.46) \quad \langle 1/r \rangle \geq 1.3956 Z^{1/3} [1 - O(Z^{-1/3})]$$

por lo tanto la expresión (1.45) deviene

$$(1.47) \quad T'_C \geq T''_C \equiv 0.1293 Z^{7/3} [1 - O(Z^{-1/3})] \quad \text{u.a.}$$

(donde 1 unidad atómica (u.a.) = 2 Rydbergs = 27.2116 eV.), y la correspondiente cota conjeturada es

$$(1.48) \quad T'^{\text{con}}_C \geq T''^{\text{con}}_C \equiv 0.4254 Z^{7/3} \quad \text{u.a.}$$

Merece la pena subrayar en estas cotas a la energía cinética atómica su dependencia en $Z^{7/3}$ por una parte, y su enorme sencillez por otra. Para tener una idea de la calidad de estas cotas, representamos en la Tabla VIII sus valores para varios átomos y las comparamos con los correspondientes valores de la energía cinética $\langle T \rangle$ obtenidos con la teoría Hartree-Fock-Slater (HUA76, pag.251). Obsérvese que las cotas no son excepcionales y que su calidad se va deteriorando paulatinamente al subir en la tabla periódica.

Estas cotas han de mejorar desde luego si en lugar de tomar las

TABLA IX: Cotas inferiores (exacta y "conjeturada") a la energía cinética de diversos átomos en función de $\langle 1/r \rangle$. Los valores de $\langle 1/r \rangle$ han sido hallados en cálculos de Hartree-Fock-Slater (DES73).

Z	$\langle 1/r \rangle$	T'_C	$T'_C{}^{\text{con}}$	$\langle T \rangle$	ϵ_{rel}
6	2.448	7.88	25.93	37.128	0.302
12	3.335	47.84	157.41	199.234	0.210
18	3.895	124.51	409.64	530.176	0.227
28	4.6487	370.39	1218.59	1541.276	0.209
48	5.8571	1438.86	4733.86	5859.553	0.192
62	6.3572	2605.68	8572.69	11299.727	0.241
82	7.6767	6054.93	19920.71	24306.195	0.180

TABLA X: Comparación de las cotas inferiores exactas a la energía cinética de varios átomos en función de $\langle 1/r \rangle$, $\langle r \rangle$ y $\langle r^2 \rangle$. Estos valores han sido tomados de (DES73). Todas las magnitudes vienen expresadas en unidades atómicas.

Z	$\langle 1/r \rangle$	$\langle r \rangle$	$\langle r^2 \rangle$	$T_C(-1)$	$T_C(1)$	$T_C(2)$
6	2.448	1.1987	2.345	7.88	2.20	1.51
12	3.335	1.02	2.462	47.84	9.62	4.54
18	3.895	0.893	1.448	124.51	24.68	15.18
28	4.6487	0.7822	1.3335	370.39	67.18	37.43
48	5.8571	0.7039	1.0993	1438.86	203.70	102.54
62	6.3572	0.4827	1.4230	2605.68	663.60	121.35
82	7.6767	0.6137	0.9529	6054.93	654.22	288.78

estimaciones mínimas de $\langle 1/r \rangle$ dadas por la desigualdad (1.46), tomamos sus valores calculados exactamente. Con la única finalidad de obtener información fiable sobre la bondad de las cotas inferiores dadas por la expresión (1.45), calcularemos exactamente el valor de $\langle 1/r \rangle$ en el seno de algún modelo teórico (PEK59), (DES73), (GAD81,82), hallaremos la cota (1.45) correspondiente y este valor será finalmente comparado con la energía cinética del átomo, también evaluada de forma exacta. Esto se hace en la Tabla IX donde para varios átomos se muestran en la primera columna los valores de $\langle 1/r \rangle$ dados en (DES73), y en la cuarta columna los de la energía cinética $\langle T \rangle$ obtenidos al resolver las ecuaciones de Hartree-Fock-Slater (HUA76). Se observa que la bondad de la cota aumenta al subir en la tabla, siendo el error relativo de T_C^{con} de 0.302 en el átomo ${}_6\text{C}$, que es el caso más desfavorable.

Finalmente, a fin de mostrar que la expresión (1.45) da una cota inferior a la energía cinética mejor que la expresión (1.44), comparemos relativamente entre sí los valores de T_C y T_C^{\dagger} . Para ello utilizaremos los momentos $\langle r^k \rangle$, con $k=-1, 1$ y 2 calculados usando las soluciones de las ecuaciones de Dirac-Fock atómicas (DES73). Los correspondientes valores de las cotas dadas por (1.44) y (1.45) se denotarán en la forma $T_C(-1)$, $T_C(1)$ y $T_C(2)$ respectivamente. Todo ello se muestra en la Tabla X. En esta tabla se observa claramente que las cotas $T_C(-1)$, o sea aquellas obtenidas con el momento $\langle 1/r \rangle$, son más positivas y por tanto mejores que las cotas $T_C(1)$ y $T_C(2)$; en general puede verse que son mejores que cualquier cota del tipo (1.44), dependiente de algún momento de orden positivo.

I.3.4.- Acotación de la energía de intercambio.

La energía de intercambio o corrección de Dirac a la energía de Thomas-Fermi viene dada (MAR75, pag.93), (LIE81) por la expresión (1.2), o sea

$$(1.49) \quad E_D = -C_e \int [\rho(\vec{x})]^{4/3} d\vec{x} \equiv -C_e w_{4/3}$$

donde C_e es una constante positiva. El valor más usado para la constante C_e es el de $C_e = 3(3/\pi)^{1/3}/4 = 0.7386$.

TABLA XI: Comparación de las cotas inferiores al momento de frecuencia $w_{4/3}$ en función de $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$ y $\langle r^4 \rangle$. Estos valores han sido tomados de (DES73). Todas las magnitudes vienen expresadas en unidades atómicas.

Z	$\langle r \rangle$	$\langle r^2 \rangle$	$\langle r^4 \rangle$	$K_1 Z^{4/3}$	$K_2 Z^{4/3}$	$K_3 Z^{4/3}$
6	1.1987	2.345	17.7233	3.751	3.141	2.526
12	1.02	2.462	46.0248	11.107	7.725	5.014
18	0.893	1.448	8.0806	21.784	17.297	13.300
28	0.7822	1.3335	15.5637	44.825	32.484	20.348
48	0.7039	1.0993	10.8224	102.198	73.405	45.718
62	0.4827	1.4230	32.710	209.64	90.757	48.775
82	0.6137	0.9529	10.6463	239.383	161.010	93.749

El momento de frecuencia $w_{4/3}$ viene acotado inferiormente por la desigualdad (1.19) con $n=4/3$, obteniéndose

$$(1.50) \quad w_{4/3} \geq K_k Z^{4/3} = \frac{4k}{4k+3} \left[\frac{k [3/(4k+3)]^{3/k}}{4 \Gamma B(4, 3/k) \langle r^k \rangle^{3/k}} \right]^{1/3} Z^{4/3}$$

válida para $k=1,2,3,\dots$. Aquí el valor $k=-1$ no está permitido como ya se discutió en la sección I.1.

A.- Atomos

En este caso, nótese que estas cotas son proporcionales a $\langle r^k \rangle^{-1/k} Z^{4/3}$ y por tanto la cota que se obtiene con $k=1$ es proporcional a $Z^{5/3}$ ya que $\langle r \rangle \sim Z^{-1/3}$ (THI81).

La mera sustitución de la cota inferior a $w_{4/3}$ dada por (1.50) en (1.49), suministra una cota superior E_D^{CS} a la energía de intercambio E_D . De hecho E_D^{CS} es una función de k y Z , o sea $E_D^{CS} = E_D^{CS}(k,Z)$. Habrá pues tantas cotas superiores E_D^{CS} a la energía de intercambio de un átomo dado como valores diferentes de k . El k óptimo, o sea el valor de k que suministra la mejor cota inferior a $w_{4/3}$ y por tanto la mejor cota superior a E_D , es $k=1$ como muestra la Tabla XI. En esta tabla damos en las tres primeras columnas los valores de los momentos $\langle r^k \rangle$, $k=1,2$ y 4 de la densidad electrónica de varios átomos, que han sido obtenidos resolviendo las ecuaciones de Dirac-Fock atómicas (DES73). En las tres últimas columnas se muestran las cotas (1.50) a $w_{4/3}$ obtenidas para cada uno de los momentos anteriormente citados.

Finalmente compararemos estas cotas $E_D^{CS}(k=1)$, primero con los valores de la energía de intercambio obtenidos semiempíricamente por medio de expresiones del tipo $E_D = -cZ^{5/3}$, con $c=0.2208$ (SCH81), y segundo con los valores E_D de dicha magnitud obtenidos haciendo uso de (1.49) y de la expresión (PAT81)

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &\equiv 4\pi \int \chi(p) p^3 dp \\ &= \frac{3\pi}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} w_{4/3} \end{aligned}$$

donde $\chi(p)$ es la densidad monoparticular en el espacio de momentos, o sea

TABLA XII: Comparación de la cota inferior en función de $\langle r \rangle$ a la energía de intercambio con los valores obtenidos en (SCH81) y (GAD83). En la última columna se presenta el error relativo cometido por esta cota respecto a los valores de (SCH81). Los diversos valores de la energía de intercambio y de las cotas vienen expresadas en unidades atómicas.

Z	E_D (SCH81)	E_D (GAD83)	$E_D^{CS}(k=1)$	ϵ_{rel}
6	4.375	4.603	2.771	0.367
12	13.888	14.811	8.204	0.409
18	27.297	28.233	16.090	0.411
28	57.007	59.290	33.108	0.419
48	139.981	142.962	75.483	0.461
62	214.444		154.841	0.278
82	341.735		176.809	0.483

TABLA XIII: Comparación de las cotas inferiores a la energía de intercambio de diversos núcleos en función del radio cuadrático medio con los valores obtenidos en (TIT74). En la última columna se da el error relativo de la cota respecto de los valores exactos (TIT74).

Nucleo	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$ (fm)	E_D (MeV)	Cota (MeV)	ϵ_{rel}
$^{16}_O$	2.71	-2.87	-2.77	0.035
$^{20}_{Ne}$	3.00	-3.64	-3.33	0.074
$^{24}_{Mg}$	3.08	-4.44	-4.19	0.058
$^{28}_{Si}$	3.10	-5.24	-5.11	0.025
$^{32}_S$	3.263	-6.0	-5.80	0.034
$^{40}_{Ca}$	3.48	-7.52	-7.32	0.027

por medio de la relación

$$E_D = -C e \frac{4}{3\pi} \left(\frac{\pi}{3}\right)^{1/3} \langle p \rangle$$
$$= -0.3183 \langle p \rangle \quad \text{u.a.}$$

El valor esperado $\langle p \rangle$ fue calculado (GAD83) usando el programa de estructura atómica de Clementi y Roetti (CLE74). Esta comparación se lleva a cabo en la Tabla XII, donde las dos primeras columnas corresponden al valor semiempírico dado en (SCH81) y a E_D respectivamente. En la tercera columna se muestra la cota E_D^{CS} para $k=1$. Finalmente se dan los errores de esta cota relativos a los valores semiempíricos de Schwinger. Nótese que la bondad de las cotas obtenidas depende del átomo considerado y en todo caso dichas cotas son mayores del 51% de los valores semiempíricos correspondientes.

B.- Núcleos.

En este caso la energía E_D denota la energía de intercambio de Coulomb (NEG72), que da lugar a una contribución local al Hamiltoniano nuclear de Hartree-Fock. A continuación se muestra en la Tabla XIII la comparación de las cotas superiores obtenidas para esta energía en función de $\langle r^2 \rangle$ con los valores exactos suministrados en un cálculo Hartree-Fock (TIT74). Nótese que en todos los núcleos considerados el error relativo de la cota es siempre mucho menor de 0.1. Esto significa que dicha cota es $\gg 90\%$ del valor exacto.

BIBLIOGRAFIA

- (ABR72) M. Abramowitz y I.S. Stegun, Handbook of Mathematical Functions (Dover, New York, 1972). Capítulo 6.
- (BEC70) R.L. Becker, Phys. Lett. 32B(1970)263
- (BRA85) M. Brack, J. de Physique (1985)
- (BRU61) K.A. Brueckner et al., Phys. Rev. 121(1961)255
- (CLE74) E. Clementi y C. Roetti, Atomic Data and Nuclear Data Tables 14(1974)177
- (DAV69) K.T.R. Davies et al., Phys. Rev 177(1969)1519
- (DEJ74) C.W. de Jaeger, H. de Vries y C. de Vries, Atomic Data and Nuclear Data Tables 14(1974)479
- (DEH82) J.S. Dehesa, Nuovo Cimento D1(1982)442
- (DEH85) J.S. Dehesa y F.J. Gálvez, Phys. Lett. 156B(1985)287
- (DES73) J.P. Desclaux, Atomic Data and Nuclear Data Tables 12(1973)312
- (DRE84) R. Dreizler y J. da Providencia (editores), Density Functional Methods in Physics (Plenum, New York, 1984).
- (DYS67a) F.J. Dyson y A. Lenard, J. Math. Phys. 8(1967)423
- (DYS67b) F.J. Dyson, J. Math. Phys. 8(1967)1538
- (GAD80) S.R. Gadre, L.J. Bartolotti y N.C. Handy, J. Chem. Phys. 72(1980)1034
- (GAD81) S.R. Gadre y R.K. Pathak, Phys. Rev. A24(1981)2906.
- (GAD82) S.R. Gadre, S.P. Gejji y N. Venkatalaxmi, Phys Rev. A26 (1982)1768
- (GAD83) S.R. Gadre, S.P. Gejji y S.J. Chakravorty, Atomic Data and Nuclear Data Tables 3(1983)477
- (GAZ81) J.L. Gazquez y J. Robles, J. Chem. Phys. 74(1981)5927
- (GHO82) S.K. Ghosh y B.M. Deb, Phys. Rep. 92(1982)1
- (GRA65) I.S. Gradshteyn y I.M. Ryzhik, Table of Integrals, Series and Products (Academic Press, New York, 1965)
- (HUA76) K.N. Huang et al., Atomic Data and Nuclear Data Tables 18(1976)243
- (KAT51) T. Kato, Trans. Amer. Math. Soc. 70(1951)195
- (KER66) A.K. Kerman, J.P. Svenne y F.M.H. Villars, Phys. Rev. 147(1966)710
- (KIR67) D.A. Kirzhnits, Field Theoretics Methods in Many Body Systems (Pergamon, Oxford, 1967).
- (KOL72) D.S. Koltun, Phys. Rev. Lett. 28(1972)182
- (KRI81) H. Krivine y J. Treiner, J. Math. Phys. 22(1981)2484
- (KVE81) G.F. Kventsel y J. Katriel, Phys. Rev. A24(1981)2299
- (LEW81) L. Lewin, Polylogarithms and Associated Functions (North Holland, New York, 1981)

- (LIE75) E.H. Lieb y W.E. Thirring, Phys. Rev. Lett. 35(1975)1975; Errata:
Phys. Rev. Lett. 35(1975)1116
- (LIE76a) E.H. Lieb, Rev. Mod. Phys. 48(1976)553
- (LIE76b) E.H. Lieb y W.E. Thirring, en Studies in Mathematical Physics:
Essays in Honor of Valentine Bargmann, editado por E.H. Lieb,
B. Simon y A.S. Wightman (Princeton Univ. Press, 1976)
- (LIE81) E.H. Lieb, Rev. Mod. Phys. 53(1981)603
- (LIE84) E.H. Lieb, Comm. Math. Phys. 92(1984)473
- (MAR75) N.H. March, Self-consistent fields in Atoms (Pergamon, Oxford, 1975)
- (MAR83) N.H. March, J. Chem. Phys. 79(1983)3404
- (MOR52) S. Moriguti, Ann. Math. Statist. 23(1952)286
- (NEG72) J.W. Negele y D. Vautherin, Phys. Rev. C5(1972)1472
- (ORD72) J.K. Ord, Families of Frequency Distributions, (Griffin, London, 1972)
- (PAT81) R.K. Pathak y R.S. Gadre, J. Chem. Phys. 74(1981)5925
- (PAT82) R.K. Pathak, P.V. Panat y S.R. Gadre, Phys. Rev. A26(1982)3073
- (PEK59) C.L. Pekeris, Phys. Rev. 115(1959)1216
- (SCH81) J.S. Schwinger, Phys. Rev. A24(1981)2353
- (SIC49) H.S. Sichel, Biometrika 36(1949)404
- (SOB38) S.L. Sobolev, Mat. Sbornik 46(1938)471 y
Math. Soc. Transl. of Monographs 7(1963)
- (SVE79) J.P. Svenne, Adv. Nucl. Phys. 11(1979)179
- (SVE80) J.P. Svenne, J. Phys. G6(1980)465
- (THI81) W. Thirring, Quantum Mechanics of Atoms and Molecules, (Springer,
New York, 1981)
- (TIT74) C. Titin-Schneider y P. Quentin, Phys. Lett. B49(1974)397
- (VAU69) D.G. Vautherin, Ph.D. Thesis (Univ. Paris, Orsay, 1969)
- (WHI52) E.T. Whittaker y G.M. Watson, A course of modern analysis (Cambridge
Univ. Press, Cambridge, England, 1952)

II.- DISTRIBUCION DE NIVELES DE ENERGIA DE SISTEMAS CUANTICOS.

El estudio mecano-cuántico de los sistemas físicos requiere la determinación de las autosoluciones de operadores de tipo matricial, diferencial o integral. Generalmente este problema es difícil de resolver no solo analíticamente sino también numéricamente. Por ello, resulta deseable la obtención de la máxima cantidad de información posible acerca de los autovalores y autofunciones de los operadores físicos directamente en términos de los parámetros que caracterizan tales operadores, es decir, sin necesidad de resolver previamente el problema de autovalores asociado. En este capítulo se investigan métodos para obtener tal tipo de información en lo que respecta a las propiedades globales o colectivas (a veces llamadas también propiedades medias) de los autovalores y/o de los nodos de las autofunciones de los operadores. El objetivo final es la determinación de la densidad de niveles de energía de los sistemas cuánticos y la distribución de nodos de las autofunciones correspondientes.

Las propiedades espectrales de naturaleza global de los sistemas de muchos cuerpos tienen un gran interés debido a su significado físico. La excitación de un sistema de muchas partículas por encima de una energía umbral (e.g. 10MeV para núcleos) permite al sistema tener un número de grados de libertad extraordinariamente grande. Entonces el número de niveles que aparecen en el espectro es tan elevado que las magnitudes espectrales relevantes ya no son de carácter individual, tales como la energía y autofunción correspondiente de cada nivel por separado, sino que tienen un carácter colectivo o global. La magnitud más importante de este tipo es la densidad de niveles, definida como el número de niveles por unidad de intervalo de energía. Esta magnitud puede medirse experimentalmente como una función de la energía de excitación (DAL80). La determinación de esta función a partir de primeros principios (o sea, a partir de los grados de libertad monoparticulares), o mejor, directamente a partir de la interacción a dos cuerpos característica en el sistema sigue siendo hoy día un problema no

resuelto en la teoría de los sistemas de muchos fermiones (POR65, MEH67, GAR72, DAL80, BER80, BRO81, CAR83, DEH84a). No obstante se ha obtenido mucha información acerca de la densidad de niveles de tales sistemas por medio de métodos de matrices aleatorias (POR65, GAR72, MEH67, BRO81, BOH84) o basándose en el modelo de partícula independiente (DAL80, BER80).

Quizás el intento más fundamental y completo de inclusión de interacciones residuales realistas es el llamado método de las distribuciones espectrales de French (FRE84). En este método las distribuciones de niveles energéticos se especifican a través de sus momentos (que son trazas ponderadas de potencias del Hamiltoniano y de sus productos con ciertos operadores de excitación) y se calculan sin resolver la ecuación de Schrodinger exactamente.

En este capítulo consideraremos el problema descrito en el párrafo anterior especificando la densidad de niveles a través de sus momentos al igual que French pero adoptando por lo demás un punto de vista completamente diferente. La resolución de un problema de muchos cuerpos (por ejemplo el problema nuclear en el modelo de capas) empieza por la truncación del espacio de Hilbert del sistema por consideraciones de e.g. teoría de grupos, exigiendo que el espacio suministre la representación del grupo que se crea pertinente. La representación del Hamiltoniano del sistema en términos de una base del espacio de Hilbert reducido es una matriz real y simétrica de dimensión N generalmente muy grande. Entonces nuestro problema se reduce al de la determinación de la densidad de autovalores (o de sus momentos) de una matriz real y simétrica directamente (o sea, sin diagonalizarla) en términos de sus elementos de matriz. Este es desde luego un problema muy difícil aún no resuelto. Sin embargo, este problema puede simplificarse aún más si tenemos en cuenta que:

1.- Cualquier matriz real y simétrica puede transformarse en una matriz tridiagonal real y simétrica (llamada matriz de Jacobi o de Lanczos) por medio de algoritmos standard de tridiagonalización tales como los de Householder, Givens o cualquiera de sus numerosas variantes.

2.- El Hamiltoniano del sistema (ya venga dado matricialmente o como operador diferencial o integral) puede ponerse directamente en la forma de una matriz de Jacobi o de Lanczos H por medio del método de Lanczos (véase

Sección II.1)

3.- Existen aproximaciones físicas que dan directamente el Hamiltoniano del sistema en la forma H de Jacobi o de Lanczos. Tal es el caso de los llamados modelos de enlace fuerte ("tight-binding") en física atómica (SCH77) y en teoría de estado sólido (BUL80, MAT80 y 81, MAN83, PET85), de los modelos de tipo Toda en física no-lineal (TOD75) y en general en cualquier modelo que suponga que cada partícula del sistema interacciona predominantemente con sus vecinos más próximos.

4.- Asimismo para algunos sistemas atómicos y moleculares es posible encontrar bases en términos de las cuales la representación matricial del Hamiltoniano es del tipo Jacobi o Lanczos (YAM75, BRO78, REI79, BAN85).

Entonces, el problema físico inicial ha quedado reducido a la determinación de la densidad de autovalores $\rho_N(E)$ (o de sus momentos) del Hamiltoniano de Jacobi o de Lanczos H del sistema en términos de sus elementos de matriz

$$(2.1) \quad \begin{cases} H_{n,n} = a_n & ; n=1,2,\dots,N \\ H_{n,n+1} = H_{n+1,n} = b_n & ; n=1,2,\dots,N-1 \end{cases}$$

La matriz secular de este problema es por tanto

$$(2.2) \quad H - EI_N = \begin{pmatrix} a_1 - E & b_1 & & & & \\ & b_1 & a_2 - E & b_2 & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & b_{N-1} \\ & & & & \cdot & \\ & & & & & b_{N-1} & a_N - E \end{pmatrix}$$

donde I_N es la matriz unidad N -dimensional.

Por otra parte, se verifica (WIL62) que los polinomios característicos de las submatrices principales de una matriz de este tipo constituyen un sistema de polinomios ortogonales que vienen definidos unívocamente por la siguiente relación de recurrencia a tres términos

$$P_n(E) = (E - a_n) P_{n-1}(E) - b_{n-1}^2 P_{n-2}(E) \quad (2.3)$$

$$P_{-1}(E) = 0, P_0(E) = 1; n = 1, 2, \dots, N$$

Nótese que los ceros del polinomio $P_N(E)$ son los autovalores del Hamiltoniano de Jacobi N-dimensional H y por tanto los niveles de energía del sistema. De esta forma nos vemos abocados al problema de la "determinación de la densidad de ceros de polinomios ortogonales analíticamente en términos de los coeficientes a_n y b_n de su relación de recurrencia a tres términos". Este problema ha sido resuelto recientemente (DEH76, 77a y b, 78a y b, 81a BOS84) en sus dos aspectos discreto (N finito) y asintótico ($N \rightarrow \infty$), y es descrito brevemente en la Sección II.3. Las expresiones así obtenidas son utilizadas en esta memoria para la caracterización e identificación de dos grandes clases de (Hamiltonianos de Lanczos de) sistemas cuánticos que presentan la misma densidad de niveles. Como casos particulares se encuentran las subclases de sistemas de muchos cuerpos que presentan una densidad de niveles de tipo regular, uniforme ó la famosa ley del semicírculo de Wigner (WIG55 y 65). Estos resultados se describen en la Sección II.4. Sin embargo, a veces ocurre que las expresiones que se obtienen para los momentos de la densidad de ceros en función de a_n y b_n no se dejan tratar numéricamente bien, al menos en el caso discreto. De aquí que sea conveniente encontrar soluciones alternativas. Con este fin, supondremos que conocemos o podemos encontrar (lo cual, al menos en principio, es siempre posible partiendo de la relación de recurrencia)

(i) la expresión explícita del polinomio $P_N(E)$

o bien

(ii) la ecuación diferencial de segundo orden que tales polinomios satisfacen.

En este capítulo se presentan sendos métodos que permiten determinar los momentos de la densidad de ceros directa y analíticamente bien en términos de

los coeficientes del desarrollo en potencias del polinomio de forma compacta, bien en función de los parámetros que caracterizan la ecuación diferencial satisfecha por tales polinomios. Con respecto a este segundo punto hemos de decir que el método encontrado se aplica a ecuaciones diferenciales de orden arbitrario susceptibles de tener autofunciones polinómicas, generalizando así algunos resultados hallados por otros autores (CAS80a y b, DEH85a, BUE85a). Todo esto se describe en la Sección II.3, donde asimismo se ilustra su aplicabilidad en varios sistemas específicos de polinomios ortogonales que han mostrado su utilidad en varios campos de la física.

Este capítulo está estructurado en la forma siguiente. La Sección II.1 contiene algunas definiciones relativas a la densidad de niveles de energía de un sistema físico y a sus momentos, y en ella se describe brevemente el método de Lanczos cuya utilización no como algoritmo numérico sino como método teórico está en la base y motivación de todos los resultados de este capítulo. En la Sección II.2 se obtienen analíticamente cotas superiores al autovalor más bajo y cotas inferiores al autovalor más alto del Hamiltoniano de Lanczos H del sistema físico considerado en términos de los valores esperados de H evaluados en un vector, en principio arbitrario, del espacio de Hilbert. La Sección II.3 contiene una breve descripción de los dos métodos existentes para calcular la densidad de ceros de polinomios ortogonales partiendo de su relación de recurrencia, y una detallada exposición de dos métodos de cálculo de tal densidad partiendo bien de la expresión explícita de tales polinomios, bien de la ecuación diferencial satisfecha por dichos polinomios. Finalmente, en la Sección II.4 los métodos descritos en la sección anterior son utilizados en el estudio analítico de la densidad de niveles de una gran variedad de sistemas cuánticos, y en la determinación de la densidad de ceros de polinomios ortogonales no-convencionales de interés físico.

Los resultados obtenidos en este capítulo han sido publicados parcialmente en varios artículos recientes (GAL84, GAL85a, GAL85b, DEH85b, BUE85b).

II.1.- GENERALIDADES SOBRE EL METODO DE LANZOS Y LA DENSIDAD DE NIVELES

A.- Método de Lanczos.

Uno de los ingredientes básicos de este capítulo es, como vamos a ver, la utilización del método de Lanczos que permite tridiagonalizar el Hamiltoniano de un sistema cuántico. Este método (LAN50, PAI72) parte de un vector inicial $|u_1\rangle$ (que, salvo su normalización a la unidad, es completamente arbitrario) del espacio de Hilbert del sistema y transforma el problema de autovalores asociado al operador (matricial, diferencial o integral) en el de encontrar las autosoluciones de una matriz tridiagonal.

Aunque existen otros métodos de tri- y diagonalización de matrices muy potentes y sofisticados, e.g. los de Householder y Rutishauser (HOU64, WIL65), el método de Lanczos tiene sin embargo un cierto número de peculiaridades (la menor de las cuales no es su gran sencillez) que lo hacen particularmente adecuado en el estudio de las autosoluciones de las matrices Hamiltonianas de gran dimensionalidad que caracterizan a los sistemas de muchos cuerpos. Un tratamiento completo y actualizado del método como herramienta numérica puede verse en (PAR80, CUL84), donde se pone de manifiesto como la idea primitiva de Lanczos modificada en el sentido de Paige (PAI72) conduce a un algoritmo de gran precisión y estabilidad. Aquí solamente describiremos brevemente el método y señalaremos las características que lo hacen adecuado en el estudio de la estructura de los sistemas cuánticos.

Sea H cualquier operador hermítico y $|u_1\rangle$ un vector cualquiera del espacio N -dimensional sobre el que H opera, que supondremos normalizado a la unidad, i.e. $\langle u_1|u_1\rangle = 1$. Ahora hacemos actuar H sobre $|u_1\rangle$ para generar otro vector normalizado a la unidad, $|u_2\rangle$, ortogonal a $|u_1\rangle$; es decir,

$$H|u_1\rangle = a_1|u_1\rangle + b_1|u_2\rangle$$

de forma que se verifiquen las condiciones

$$\langle u_2 | u_2 \rangle = 1$$

$$\langle u_2 | u_1 \rangle = 0$$

A continuación se genera un nuevo vector normalizado a la unidad, $|u_3\rangle$, ortogonal a $|u_1\rangle$ y $|u_2\rangle$ por medio de la acción de H sobre $|u_2\rangle$; o sea

$$H|u_2\rangle = b_1|u_1\rangle + a_2|u_2\rangle + b_2|u_3\rangle$$

con

$$\langle u_3 | u_3 \rangle = 1$$

$$\langle u_1 | u_3 \rangle = \langle u_2 | u_3 \rangle = 0$$

Y así sucesivamente hasta completar el espacio de vectores mutuamente independientes. Tenemos así las ecuaciones

$$H|u_1\rangle = a_1|u_1\rangle + b_1|u_2\rangle$$

$$(2.4) \quad H|u_n\rangle = b_{n-1}|u_{n-1}\rangle + a_n|u_n\rangle + b_n|u_{n+1}\rangle$$

$$H|u_N\rangle = b_{N-1}|u_{N-1}\rangle + a_N|u_N\rangle$$

donde

$$(2.5) \quad \begin{aligned} a_n &= \langle u_n | H | u_n \rangle \\ b_n &= \langle u_{n+1} | H | u_n \rangle \end{aligned}$$

Los vectores $\{|u_n\rangle; n = 1, 2, \dots, N\}$ constituyen una base ortonormal (la llamada base de Lanczos), en la que el operador Hamiltoniano presenta una representación matricial de tipo tridiagonal real y simétrico, o sea una matriz de Jacobi:

$$(2.6) \quad H = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & \\ & b_2 & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & b_{N-1} \\ & & & b_{N-1} & a_N \end{pmatrix}$$

Los autovectores $|V\rangle$ del Hamiltoniano original pueden calcularse a partir de los de la matriz tridiagonal, denotados por $|v\rangle$, por medio de la relación $|V\rangle = L|v\rangle$, donde L denota una matriz cuyas columnas son los vectores de la base de Lanczos.

Nótese que si $|u_1\rangle$ es ortogonal a cualquier autovector de H , entonces la serie de operaciones descrita por (2.4) y (2.5) termina después de $m < N$ pasos, o sea que $b_m = 0$ para algún $m < N$. Un caso en que esto puede ocurrir es cuando H tiene autovalores degenerados. Entonces, puede escogerse un nuevo vector normalizado a la unidad, ortogonal a los $|u_n\rangle$ ya obtenidos y se continúan y/o repiten las operaciones indicadas en (2.4) y (2.5).

De su misma construcción, se observa una propiedad importante de este método: puede aplicarse directamente a operadores cualesquiera sin el paso intermedio que supone la construcción de una representación matricial del operador. Otra propiedad interesante del método de Lanczos es su mayor eficiencia con respecto a otros métodos numéricos existentes (Householder, Rutishauser, Jacobi, Givens, etc.) ya que, contrariamente a estos métodos, no se requiere completar el paso de tridiagonalización para obtener algún tipo de información (SEB69, WHI77, PAR80, CUL84). Esta segunda característica del método es una consecuencia de la propiedad de Sturm de los ceros de los polinomios ortogonales y de que los autovalores de las submatrices principales de una matriz de Jacobi son los ceros de sus polinomios característicos, los cuales constituyen un sistema de polinomios ortogonales (WIL62, DEH78a) con respecto a la función peso $w_1(E)$ que nos da la distribución del vector inicial $|u_1\rangle$ entre los autoestados del sistema.

Estas dos propiedades han hecho que el método de Lanczos sea objeto intenso de investigación por sí mismo (PAR80, DEH81a, CUL84) y que sea

aplicado en numerosas ramas de la física, e.g. en física atómica y molecular (DAV75a, SCH77, PAL79), física nuclear (SEB69, NIS73, WHI77, BRU77), materia condensada (DEH78b, BUL80), física matemática (BES75, ZNO76, DEH78c), etc.. En la actualidad, el método de Lanczos es una herramienta indispensable para investigar no solamente las propiedades de carácter individual (o sea los niveles de energía y las autofunciones) del espectro de un sistema de muchos cuerpos, sino también las propiedades espectrales de carácter global o colectivo (e.g. la densidad de niveles).

Desde el primer punto de vista, el método de Lanczos define un algoritmo computacional que es muy eficiente en la diagonalización del Hamiltoniano de los sistemas cuánticos, especialmente si se está interesado solamente en un pequeño número (e.g. ~ 20 o 30 en los cálculos de modelo de capas nuclear) de los autovalores más bajos y/o más altos y en los autovectores correspondientes. Las principales características de este algoritmo de iteraciones minimizadas son que: (i) los autovalores de la submatriz $m \times m$ formada después de $m < N$ iteraciones convergen rápida y monótonamente a los autovalores del Hamiltoniano N -dimensional completo, y (ii) la precisión y estabilidad del método son increíblemente grandes (PAI72, WHI77, PAR80, CUL84)

Desde el segundo punto de vista, el proceso de Lanczos puede ser considerado como un método teórico que permite la determinación de un número de propiedades relevantes del espectro de niveles de un sistema cuántico en términos de los valores esperados del Hamiltoniano evaluados en el vector inicial $|u_1\rangle$. Ello es posible gracias a la estrecha conexión de este método con el problema de momentos (BES75, AKH76), la teoría de las matrices de Jacobi y la teoría de los polinomios ortogonales (AKH76, DEH78a y c, DEH81a).

B.- Densidad de Niveles.

La densidad total de niveles, normalizada a la unidad, del Hamiltoniano de Jacobi o Lanczos N -dimensional H de un sistema cuántico viene dada por

$$(2.7) \quad \rho_N(E) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(E-E_i) = \frac{1}{N} \text{Tr} \delta(E-H)$$

Los momentos alrededor del origen de esta función densidad son

$$(2.8) \quad \mu_r^{(N)} = \int_a^b E^r \rho_N(E) dE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i^r = \frac{1}{N} \text{Tr } H^r, \quad r = 1, 2, \dots, N$$

Cuando el intervalo soporte (a, b) de la distribución $\rho_N(E)$ es finito, los N momentos $\{\mu_r^{(N)}; r = 1, 2, \dots, N\}$ determinan unívocamente la función $\rho_N(E)$. Si dicho intervalo fuese infinito o semiinfinito, tales momentos habrían de satisfacer determinadas condiciones a fin de que el problema de momentos tuviera solución única (SH050). Nótese de que hemos hecho uso de que los autovalores de H son simples y que todos ellos están contenidos en el intervalo soporte de su función peso asociada $w_1(E)$.

La densidad asintótica de autovalores $\rho(E)$ de H se define como

$$(2.9) \quad \rho(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \rho_N(E)$$

Los momentos respecto al origen de esta función densidad $\rho(E)$ satisfacen por tanto la relación

$$(2.10) \quad \mu_r' = \int_a^b E^r \rho(E) dE = \lim_{N \rightarrow \infty} \mu_r^{(N)}; \quad r=1, 2, \dots, N$$

A menudo ocurre que todos los momentos μ_r' son iguales a cero o a infinito, en cuyo caso la función $\rho(E)$ no es de utilidad. En estos casos resulta conveniente una modificación de la escala de energías. Por ejemplo, si todos los momentos se hacen infinito, resulta útil a veces considerar la densidad discreta $\rho_N(E/N^A)$ siendo A una constante positiva; entonces ocurre que la densidad asintótica $\rho^*(E)$ definida como

$$(2.11) \quad \rho^*(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \rho_N(E/N^A)$$

tiene unos momentos respecto al origen

$$(2.12) \quad \mu_r'' = \int_a^b E^r \rho^*(E) dE = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\mu_r^{(N)}}{N^{rA}}; \quad r=1, 2, \dots$$

con valores finitos. Al hacer esto, hemos usado una propiedad conocida de los

momentos: si los valores de la variable son multiplicados por una constante a , los momentos correspondientes μ_r' habrán de multiplicarse por a^r (KEN69).

La función característica $\Psi(s)$ o transformada de Fourier de la densidad $\rho(E)$ viene dada por (CRA46, KEN69)

$$(2.13) \quad \Psi(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(E) e^{iEs} dE = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(is)^n}{n!} \mu_n'$$

Nótese entonces que conocidos los momentos μ_n' y calculado $\Psi(s)$, la densidad $\rho(E)$ puede determinarse a través de la transformada inversa de Fourier de $\Psi(s)$. Es decir,

$$(2.14) \quad \rho(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-isE} \Psi(s) ds$$

Finalmente, resulta conveniente señalar aquí que la densidad de autovalores (2.7) del Hamiltoniano de Lanczos N -dimensional de un sistema cuántico puede ponerse en la forma (DEH78a, DEH81a)

$$(2.15) \quad \rho_N(E) = \frac{w_1(E)}{N} \sum_{n=1}^N \bar{P}_n^2(E)$$

donde $\{\bar{P}_n(E); n=1, \dots, N\}$ son los polinomios característicos de las submatrices principales del Hamiltoniano de Jacobi (2.6), los cuales constituyen como ya ha sido señalado un sistema de polinomios ortogonales con respecto a la densidad espectral $w_1(E)$ del vector inicial $|u_1\rangle$ y convenientemente normalizados a la unidad. O sea que se verifica

$$(2.16) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{P}_n(E) \bar{P}_m(E) w_1(E) dE = \delta_{n,m}$$

II.2.- ACOTACION DE AUTOVALORES DEL HAMILTONIANO DE LANZOS DE UN SISTEMA CUANTICO

En esta sección se describe un nuevo método (GAL85b) de determinación analítica de cotas superiores al autovalor más bajo $E_1^{(n)}$ del Hamiltoniano de Lanczos N-dimensional (y por tanto a la energía del estado fundamental) del sistema cuántico que estemos considerando y cotas inferiores al autovalor más alto $E_n^{(n)}$. Una de las características más importantes y novedosas de estas cotas es que se dejan expresar de manera sencilla en términos de los valores esperados del Hamiltoniano evaluados en el vector inicial $|u_1\rangle$ (que, recuérdese, es un vector completamente arbitrario del espacio de Hilbert reducido del sistema). Estas cotas vienen dadas para el autovalor más bajo en la forma:

$$(2.17) \quad E_1^{(n)} < \tau_{2n-1} - \frac{h_n}{m_{2n-1}} < \tau_{2n-2} \quad ; n > 1$$

donde (DEH81a)

$$(2.18) \quad m_k = \int_a^b E^k w_1(E) dE = \langle u_1 | H^k | u_1 \rangle \quad ; k=0,1,2,\dots$$

son los momentos respecto al origen de la densidad espectral del vector inicial $|u_1\rangle$, y las cantidades τ y h son de la forma

$$(2.19) \quad \tau_k = \frac{m_{k+1}}{m_k} \quad ; k=0,1,2,\dots$$

$$(2.20) \quad h_n = \int_a^b P_n^2(E) w_1(E) dE = \frac{D_n}{D_{n-1}}$$

Aquí los D-símbolos son los determinantes de Hankel siguientes

$$(2.21) \quad D_k = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \dots & \mu_k \\ \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_{k+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_k & \mu_{k+1} & \dots & \mu_{2k} \end{vmatrix}$$

donde μ_k corresponde al momento con respecto al centroide $m_1 = \langle u_1 | H | u_1 \rangle = \langle H \rangle$ de orden k . Estos momentos están relacionados con los m_k por

$$(2.22) \quad \mu_k = \langle u_1 | (H - \langle H \rangle)^k | u_1 \rangle = \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} m_{k-j} (-m_1)^j$$

Por otra parte, la cota obtenida al autovalor más alto viene expresada por la desigualdad

$$(2.23) \quad E_n^{(n)} > \tau'_{2n-1} - \frac{h_n}{m'_{2n-1}} - a > \tau'_{2n-2} - a, \quad n > 1$$

donde las τ' -cantidades se definen de manera análoga a las τ_k dadas en (2.19) pero usando los momentos "primas" m'_k respecto al origen, que vienen definidos por

$$(2.24) \quad m'_k = \int_a^b (E-a)^k w_1(E) dE = \sum_{j=0}^k (-a)^{k-j} \binom{k}{j} m_j$$

Generalmente los términos h_n/m'_{2n-1} en (2.17) y h_n/m'_{2n-1} en (2.23) son muy pequeños con respecto a τ_{2n-1} y τ'_{2n-1} respectivamente. La no-consideración de tales términos hace que no aparezcan en la expresión de las cotas los objetos-D que tienen un mal comportamiento numérico. Por tanto, aquí sugerimos la utilización de las desigualdades

$$E_1^{(n)} < \tau_{2n-2}$$

$$E_n^{(n)} > \tau'_{2n-2} - a$$

para la obtención de cotas superiores al autovalor más bajo y de cotas

inferiores al más alto, respectivamente.

Para la demostración de (2.17) recordemos que los polinomios característicos P_n de las submatrices principales del Hamiltoniano de Lanczos constituyen un sistema ortogonal con respecto a la función $w_1(E)$. Suponiendo que los autovalores del Hamiltoniano de Lanczos, $E_i^{(n)}$ $i=1,2,\dots,N$, estén contenidos en el intervalo $[a,b]$, con

$$a < E_1^{(n)} < E_2^{(n)} \dots < E_n^{(n)} < b \leq 0$$

podemos definir las funciones

$$(2.25) \quad u_k = \sum_{i=1}^n c_i (E_i^{(n)})^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

siendo c_i constantes positivas, y

$$(2.26) \quad \mathcal{T}_k = \frac{u_{k+1}}{u_k}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Es directo comprobar que $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{T}_k = E_1^{(n)}$ (COS80). Además, aplicando la desigualdad de Hölder a u_{k+1}^2 puede obtenerse la desigualdad

$$u_{k+1}^2 \leq u_k u_{k+2}$$

que nos conduce, sin más que dividir por $u_k u_{k+1}$, a

$$(2.27) \quad \mathcal{T}_k > \mathcal{T}_{k+1} > E_1^{(n)}$$

Construyendo a continuación las funciones τ_k definidas por (2.18)-(2.19) y teniendo en cuenta la relación exacta (DAV75b)

$$(2.28) \quad \int_a^b w_1(E) f(E) dE = \sum_{k=1}^n w_k f(E_k^{(n)}) + \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} \int_a^b w_1(E) P_n^2(E) dE,$$

(donde $\zeta \in [a,b]$ y w_k son los pesos asociados a $w_1(E)$) válida para

cualquier función con derivada $2n$ -ésima continua, puede comprobarse que, tomando c_i de (2.25) igual a w_i y $f(E) = E^k$ se obtiene

$$(2.29) \quad u_k = n_k \quad ; \quad k = 0, 1, 2, \dots, 2n-1$$

$$(2.30) \quad u_{2n} = m_{2n} + \int_a^b w_1(E) P_n^2(E) dE = m_{2n} + h_n$$

Las ecuaciones (2.29) y (2.30) junto con la desigualdad (2.27) nos conducen directamente a la expresión (2.17). Análogamente, haciendo una traslación del intervalo $[a, b]$ al intervalo $[0, b-a]$ puede obtenerse la cota (2.23).

II.3.- MÉTODOS DE CÁLCULO DE LA DENSIDAD DE CEROS DE POLINOMIOS ORTOGONALES.

La determinación de la distribución de los niveles de energía de los sistemas cuánticos se reduce a menudo, como hemos comentado anteriormente, al cálculo de la densidad de ceros de ciertos sistemas de polinomios ortogonales. Por otra parte es conocido que las funciones de onda de ciertos sistemas físicos se reduce a polinomios ortogonales una vez que uno haya separado aquella parte de la función que tenga en cuenta el buen comportamiento mecano-cuántico en el origen y en el infinito (y en general en todos los puntos singulares). De aquí que la distribución de los nodos de estas funciones de onda venga dada por la densidad de ceros de polinomios $P_n(x)$ que vengan caracterizados de una de las tres formas siguientes:

- 1.- A través de una relación de recurrencia a tres términos, i.e. una relación del tipo (2.3). En este caso los polinomios definen unívocamente un sistema de polinomios ortogonales.
- 2.- A través de su expresión explícita, o sea de su desarrollo en potencias de la variable x .
- 3.- A través de una ecuación diferencial ordinaria de orden arbitrario.

y sin tener un conocimiento explícito de tales ceros.

Primeramente describiremos esquemáticamente dos métodos de determinación (Métodos I y II) de la densidad de ceros discreta $\rho_N(x)$ (DEH76 y 77a) y asintótica $\rho(x)$ de un sistema de polinomios $\{P_n(x), n=1,2,\dots,N\}$ ortogonales directamente en términos de su relación de recurrencia a tres términos, o sea en función de

$$(2.31) \quad \begin{aligned} P_n(x) &= (x - a_n)P_{n-1}(x) - b_{n-1}^2 P_{n-2}(x) \\ P_{-1}(x) &= 0, \quad P_0(x) = 1; \quad n = 1, 2, \dots, N \end{aligned}$$

A continuación detallaremos dos nuevos métodos de cálculo de la densidad de ceros en términos de la expresión explícita de los polinomios (Método III) y en términos de los coeficientes que caracterizan la ecuación diferencial ordinaria que satisfacen tales polinomios (Método IV).

METODO I.

Sea un sistema de polinomios ortogonales $\{P_n(x); n=1,2,\dots,N\}$ caracterizados por la relación de recurrencia (2.31). Los momentos $\mu_m^{(N)}$, $m=0,1,\dots$ de la densidad de ceros $\rho_N(x)$ del polinomio $P_N(x)$ pueden expresarse en función de los coeficientes a_n, b_n de la relación de recurrencia por:

$$(2.32) \quad \mu_m^{(N)} = \frac{m}{N} \sum_{(m)} F(r'_1, r_1, r'_2, \dots, r_j, r'_{j+1}) \cdot \sum_{i=1}^{N-t} a_i^{r'_1} b_i^{2r_1} a_{i+1}^{r'_2} \dots a_{i+j-1}^{r'_j} b_{i+j-1}^{2r_j} a_{i+j}^{r'_{j+1}}$$

donde la primera suma se extiende sobre todas las particiones $(r'_1, r_1, r'_2, \dots, r_j, r'_{j+1})$ del número m tales que

(i) $r'_1 + r'_2 + \dots + r'_{j+1} + 2(r_1 + \dots + r_j) = m$

(ii) Si $r'_s = 0, 1 < s < j$, entonces $r_k = r'_k = 0$ para todo $k > s$

(iii) $j = m/2$ ó $(m-1)/2$ para m par o impar respectivamente.

En la segunda suma, t denota el número de r_i no-nulos que toman parte en la correspondiente partición de m . Los coeficientes factoriales F vienen dados por

$$(2.33) \quad F(r'_1, r_1, r'_2, \dots, r_{p-1}, r'_p) = m \prod_{i=1}^p \frac{(r_{i-1} + r'_i + r_i - 1)!}{(r_{i-1} - 1)! r'_i! r_i!}$$

con $r_0 = r_p \equiv 1$. Asimismo, se hace uso de la convención

$$F(r'_1, r_1, r'_2, \dots, r'_{j-1}, 0, 0) = F(r'_1, r_1, r'_2, \dots, r'_{j-1})$$

Este método fue descrito por J.S. Dehesa en (DEH76 y 77a), donde se dan más detalles y en particular se explicitan las expresiones de los primeros momentos de orden más bajo. A menudo, la ecuación general (2.32) no se comporta bien, numéricamente hablando. Sin embargo, este método ha mostrado su utilidad en el estudio analítico de la distribución asintótica de autovalores de una clase numerosa de matrices: las matrices de Jacobi racionales, o sea, matrices tridiagonales, reales y simétricas cuyos únicos elementos no-nulos son funciones racionales del subíndice

$$(2.34) \quad a_n = \frac{Q_\alpha(n)}{Q_\beta(n)} ; \quad b_n = \frac{Q_\theta(n)}{Q_\gamma(n)}$$

donde $Q_i(n)$; $i = \alpha, \beta, \theta, \gamma$ son polinomios arbitrarios de grados α, β, θ y γ respectivamente (DEH77b y 80a, BOS84). Este tipo de matrices ha sido encontrado, por ejemplo, en el estudio de materiales desordenados en materia condensada (GAS70), en la caracterización de los procesos de nacimiento y muerte con ritmos de crecimiento racionales (MAK76) y en el estudio de la ecuación de onda esferoidal (DEH82a).

METODO II.

Sea un sistema de polinomios ortogonales $\{P_n(x); n = 1, 2, \dots, N\}$ definido por una relación de recurrencia del tipo (2.31) que verifica las condiciones

$$(2.35) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{\phi(n)} = a \in \mathbb{R} \quad \text{y} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_n}{\phi(n)} = b/2 \in \mathbb{R}^+$$

donde \mathbb{R} y \mathbb{R}^+ son los conjuntos de números reales y reales positivos

respectivamente, y el símbolo ϕ denota una función no decreciente $R^+ \rightarrow R^+$ tal que para todo $t \in R$ fijado satisface la relación

$$(2.36) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\phi(x+t)}{\phi(x)} = 1$$

Entonces, para todo entero no-negativo r se verifica que

$$(2.37) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \int_0^n [\phi(t)]^r dt \right\}^{-1} \sum_{l=1}^n x_{ln}^r =$$

$$= \sum_{j=0}^{[r/2]} (b/2)^{2j} a^{r-2j} \binom{2j}{j} \binom{r}{2j}$$

donde x_{ln} son los ceros del polinomio $P_n(x)$ y $[r/2]$ es igual a $r/2$ ó $(r-1)/2$ si r es par o impar respectivamente. Nótese que las reglas de suma asintóticas de ceros (2.37) son mucho más generales que los momentos

$$\mu'_r = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n x_{ln}^r$$

de la densidad asintótica de ceros $\rho(x)$. Este método nos permite por tanto una determinación analítica de los momentos μ'_r mucho más sencilla y directa que el método anterior, pero presenta la desventaja de que no es aplicable a cualquier sistema de polinomios ortogonales debido a la condición (2.35).

Este método se debe a J.S. Dehesa y P. Nevai (NEV79). Ha sido aplicado en el estudio de la densidad asintótica de estados de los Hamiltonianos de enlace fuerte en física del estado sólido (DEH78b), para investigar la integrabilidad de ciertos sistemas discretos no-lineales tales como e.g. redes de Toda (DEH80b) y en el análisis espectral de los problemas de dispersión en el transporte de neutrones en medios anisótropos (DEH81b y 82b). Asimismo este método será usado por nosotros en el problema de la caracterización e identificación vía el Hamiltoniano de Lanczos de los sistemas cuánticos con una misma densidad de niveles, que se muestra detalladamente en el apartado II.4.1.

METODO III.

Consideremos el polinomio $P_N(x)$ cuya expresión explícita

$$(2.38) \quad P_N(x) = \sum_{i=0}^N (-1)^i a_i x^{N-i}$$

está normalizada de forma que el coeficiente de la potencia N -ésima es la unidad, o sea que

$$(2.39) \quad a_0 = 1$$

Entonces, los momentos alrededor del origen $\mu_r^{(N)}$ de la densidad de cercos $\mathcal{S}_N(x)$ vienen dados por (GAL84)

$$(2.40) \quad \mu_r^{(N)} = \frac{r}{N} \sum_{(\lambda)} (-1)^{r-\sum \lambda} (-1+\sum \lambda)! \prod_{i=1}^N \frac{a_i^{\lambda_i}}{\lambda_i!} ; r = 1, 2, \dots, N$$

donde $\sum \lambda = \sum_{i=1}^N \lambda_i$ y la sumatoria $\sum_{(\lambda)}$ corre sobre todas las particiones $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$ del número r tales que

$$(2.41) \quad \sum_{i=1}^N i \lambda_i = r$$

Explícitamente, los primeros momentos $\mu_r^{(N)}$ tienen las expresiones

$$(2.42) \quad \begin{aligned} \mu_1^{(N)} &= \frac{1}{N} a_1 \\ \mu_2^{(N)} &= \frac{1}{N} (a_1^2 - 2a_2) \\ \mu_3^{(N)} &= \frac{1}{N} (a_1^3 - 3a_1 a_2 + 3a_3) \\ \mu_4^{(N)} &= \frac{1}{N} (a_1^4 - 4a_1^2 a_2 + 2a_2^2 + 4a_1 a_3 - 4a_4) \end{aligned}$$

Puede mostrarse que los momentos $\mu_r^{(N)}$ dados por (2.40) pueden también

calcularse recurrentemente si uno se percata de que (RAG72)

$$(2.43) \quad \mu_r^{(N)} = \frac{1}{N} V_r^{(N)}(a_1, a_2, \dots, a_N)$$

y que (RI058, LAV75)

$$(2.44) \quad \mu_r^{(N)} = - \frac{1}{N (r-1)!} Y_r(-f_1 a_1, f_2 a_2, \dots, f_r (-1)^r a_r)$$

donde los símbolos V_r e Y_r denotan los polinomios de Lucas generalizados de segundo tipo y los polinomios de Bell usados en teoría de números, respectivamente. En particular, se obtiene que

$$(2.45) \quad \mu_r^{(N)} = (-1)^{r+1} \left\{ \frac{r}{N} a_r + \sum_{j=1}^{r-1} (-1)^j a_{r-j} \mu_j^{(N)} \right\}$$

Por completitud, mencionaremos aquí la obtención de otras reglas de suma de ceros del polinomio $P_N(x)$ dado por (2.38), denominadas "funciones simétricas homogéneas de suma-producto" o brevemente "sumas-productos de ceros" del polinomio, denotadas por

$$(2.46) \quad h_r = h_r(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

y definidas por medio de la relación (RI058)

$$(2.47) \quad \left\{ \prod_{i=1}^N (1 - x_i x) \right\}^{-1} = 1 + h_1 x + h_2 x^2 + h_3 x^3 + \dots$$

Las primeras sumas-productos de ceros son:

$$(2.48) \quad \begin{aligned} h_1 &= \sum_{i=1}^N x_i \\ h_2 &= \sum_{i=1}^N x_i^2 + \sum_{i < j} x_i x_j \\ h_3 &= \sum_{i=1}^N x_i^3 + \sum_{i < j} x_i^2 x_j + \sum_{i < j < k} x_i x_j x_k \end{aligned}$$

Las sumas-producto de ceros h_r del polinomio $P_N(x)$ dado por (2.38) vienen

dadas en términos de los coeficientes a_i por la relación

$$(2.49) \quad h_r = \sum_{(\lambda)} (-1)^{r-\sum \lambda} (\sum \lambda)! \prod_{i=1}^N \frac{a_i^{\lambda_i}}{\lambda_i!}$$

donde los signos de sumación usados tienen el mismo significado que en la expresión (2.40). Los primeros valores son:

$$(2.50) \quad \begin{aligned} h_1 &= a_1 \\ h_2 &= a_1^2 - a_2 \\ h_3 &= a_1^3 - 2a_1a_2 + a_3 \\ h_4 &= a_1^4 - 3a_1^2a_2 + a_2^2 + 2a_1a_3 - a_4 \end{aligned}$$

Digamos finalmente que estas magnitudes h_r dadas por (2.49) satisfacen varias relaciones de recurrencia si tenemos en cuenta su relación con los polinomios de Lucas generalizados de primera clase U_r (RAG72) y con los polinomios de Bell Y_r (LAV75), a saber

$$(2.51) \quad h_r = U_{r+N-1}^{(N)}(a_1, a_2, \dots, a_N)$$

y

$$(2.52) \quad h_r = \frac{1}{r!} Y_r(f_1g_1, f_2g_2, \dots, f_rg_r)$$

con $f_i = (-1)^i i!$ y $g_i = f_i a_i$ para $i \leq N$ y $g_i = 0$ para $i > N$

Este método ha sido descrito y aplicado por nosotros a varios sistemas de polinomios ortogonales no-usuales de interés en la resolución de la ecuación de ondas en coordenadas esféricas así como en la síntesis y diseño de redes eléctricas y para ciertos problemas relacionados con el modelo de Ising (GAL84 y 85a). Algunas de estas aplicaciones se muestran en el apartado II.4.2. Mencionemos finalmente que este método se acaba de utilizar con éxito en el estudio de la distribución de los nodos de autofunciones de ecuaciones de onda relativistas de sistemas cuánticos sencillos (DOM85).

METODO IV.

Como en los tres casos anteriores, primeramente describiremos el método. Después lo comentaremos y procederemos a su demostración. Consideremos un polinomio $P_N(x)$ del cual sólo sabemos que tiene ceros simples y que satisface una ecuación diferencial ordinaria de orden arbitrario

$$(2.53) \quad \sum_{i=0}^n g_i(x) P_N^{(i)}(x) = 0$$

(donde $P_N^{(i)}$ denota la derivada i -ésima de P_N) con coeficientes $g_i(x)$ polinomios de grado c_i

$$(2.54) \quad g_i(x) = \sum_{j=0}^{c_i} a_j^{(i)} x^j$$

Entonces los momentos respecto al origen $\mu_r^{(N)} \equiv y_r/N$ de la densidad de ceros $\rho_N(x)$ del polinomio definida por (2.7), satisfacen la siguiente relación de recurrencia

$$(2.55) \quad \sum_{i=2}^n i \sum_{j=0}^{c_i} a_j^{(i)} J_{r+j}^{(i)} = - \sum_{j=0}^{c_1} a_j^{(1)} y_{r+j}$$

para $r = 0, 1, 2, \dots$, donde los símbolos- J denotan otras reglas de suma de ceros definidas por

$$(2.56) \quad J_s^{(i)} = \sum_{\neq} \frac{x_{1_1}^s}{(x_{1_1} - x_{1_2})(x_{1_1} - x_{1_3}) \dots (x_{1_1} - x_{1_i})}$$

donde los x_{1_i} denotan las posiciones de los ceros y el símbolo \sum_{\neq} significa una suma sobre todas las i es de forma que todas sean diferentes. Puesto que $J_s^{(i)} = 0$ para $s \leq i-1$, la relación (2.25) puede reescribirse, con la

convención $a_j^{(i)} = 0$ para $j < 0$, como:

$$(2.57) \quad \sum_{i=2}^n i \sum_{m=-1}^{r+c_1-i-1} a_{i+m+1-r}^{(i)} J_{i+m}^{(i)} = - \sum_{j=0}^{c_1} a_j^{(1)} y_{r+j-1}$$

para $r = 1, 2, \dots$. Las magnitudes $J_r^{(i)}$ pueden expresarse en términos de los "momentos" y_t con $t \leq r-i+1$. Véase Apéndice A para más detalles sobre estas reglas de suma J . Mencionemos aquí solamente que se conocen las expresiones explícitas de las $J_r^{(i)}$ en función de las y_t para los valores de $i=2, 3, 4, 5$ y de las $J_{i+m}^{(i)}$ asimismo en términos de las y_t para $m=-1, 0, 1, 2, 3$. Entonces puede observarse que el lado izquierdo de las relaciones (2.55) ó (2.57) involucra "momentos" y_s con $0 \leq s \leq r+q$, siendo

$$(2.58) \quad q = \max \left\{ c_i - i; i = 0, 1, \dots, n \right\}$$

y el lado derecho tiene "momentos" y_s con $r-1 \leq s \leq r+c_1-1$. Por lo tanto, las relaciones básicas (2.55) ó (2.57) permiten el cálculo sucesivo, recurrente de los "momentos" y_t , $q+1 \leq t \leq r+q$, siempre que los q "momentos" de órdenes más bajos $y_0 \equiv N, y_1, y_2, \dots, y_q$ sean conocidos previamente. Brevemente, las relaciones (2.55) ó (2.57) permiten la evaluación de los "momentos" y_s con $s \geq q+1$ recurrentemente en términos de y_0, y_1, \dots, y_q . Entonces, se necesita una manera alternativa de cálculo de estos q primeros "momentos". Esta consiste en que los coeficientes α_k del desarrollo en potencias de x del polinomio, i.e.

$$(2.59) \quad P_N(x) = (\text{const.}) \sum_{k=0}^N (-1)^k \alpha_k x^{N-k}$$

por una parte pueden calcularse recurrentemente en términos de los coeficientes $a_r^{(i)}$ de la ecuación diferencial (2.53) via la relación

$$(2.60) \quad \alpha_s = - \frac{\sum_{m=1}^s (-1)^m \alpha_{s-m} \sum_{i=0}^n \frac{(N-s+m)!}{(N-s+m-i)!} a_{i+q-m}^{(i)}}{\sum_{i=0}^n \frac{(N-s)!}{(N-s-i)!} a_{i+q}^{(i)}}$$

y por otra están relacionados con los "momentos" y_r por medio de la expresión

$$(2.61) \quad \alpha_k = \frac{1}{k!} \sum_{\mathcal{F}} x_{1_1} x_{1_2} \dots x_{1_k} = \frac{(-1)^k}{k!} Y_k(-y_1, -y_2, -2y_3, \dots, -(n-1)y_n)$$

donde los símbolos Y denotan los conocidos polinomios de Bell de teoría de números (R1058 y 68). Puede observarse que los primeros alfas son

$$\alpha_1 = y_1$$

$$\alpha_2 = (y_1^2 - y_2)/2$$

$$(2.62) \quad \alpha_3 = (y_1^3 - 3y_1y_2 + 2y_3)/6$$

$$\alpha_4 = (y_1^4 - 6y_1^2y_2 + 8y_1y_3 + 3y_2^2 - 6y_4)/24$$

$$\alpha_5 = (y_1^5 - 10y_1^3y_2 + 20y_1^2y_3 + 15y_1y_2^2 - 30y_1y_4 - 20y_2y_3 + 24y_5)/120$$

Las expresiones (2.60) y (2.61) ó (2.62) también permiten el cálculo de los "momentos" y_r en términos de los coeficientes $a_j^{(i)}$ de la ecuación diferencial (2.53). Ocurre que tales expresiones son altamente no-lineales y de difícil manejo en general. Sin embargo nuestro propósito es usarlas sólo para el cálculo de los q primeros momentos. Usualmente, en la mayoría de los casos física y matemáticamente interesantes, q es menor o igual que dos. De aquí que, a pesar de su alta no-linealidad, dichas expresiones (2.60)-(2.62) son un medio útil y eficaz de obtener los momentos de más bajo orden, solamente.

En definitiva, el método que aquí se propone para estudiar la densidad de ceros $\rho_N(x)$ (via sus momentos $\mu_r^{(N)}$) de las soluciones polinómicas de una ecuación diferencial ordinaria de orden arbitrario (2.53)-(2.54) consta de dos partes:

- (i) Evaluación de los q primeros momentos por medio de las expresiones (2.60)-(2.62), y
- (ii) Cálculo de los $N-q$ momentos restantes por medio de la relación de recurrencia (2.55) ó (2.57)

Este método ha sido descrito y aplicado por nosotros a varias ecuaciones diferenciales ordinarias cuyas soluciones son polinomios ortogonales no-convencionales (e.g. los de Heine, Hermite generalizados y del tipo Bessel) en (BUE85b). Algunas de estas aplicaciones son detalladas en el apartado II.4.2.

Este método generaliza ampliamente el descrito por Case (CAS80a), usado y extendido en (DEH85a, BUE85a). En efecto, cuando $q=0$ la primera parte de nuestro método no juega ningún papel ya que y_0 es conocido ($y_0=N$), y la relación de recurrencia básica (2.55) ó (2.57) se simplifica drásticamente, reduciéndose a las de (CAS80a, DEH85a y BUE85a). En estas tres últimas referencias se ilustra la aplicabilidad del método (con $q=0$) en el cálculo de la densidad de ceros de los polinomios ortogonales clásicos (Jacobi, Hermite y Laguerre) que satisfacen una ecuación diferencial ordinaria de segundo grado con coeficientes constantes (SZE75, CHI77) y de todos los sistemas de polinomios ortogonales que verifican una ecuación diferencial ordinaria de cuarto grado con coeficientes constantes (i.e. los Krall-Legendre, Krall-Laguerre y Krall-Jacobi) (KRA78, 80 y 81) así como de otros polinomios ortogonales que cumplen una ecuación diferencial de sexto orden (KRA83). Además, la aplicación del método que aquí se presenta a la ecuación diferencial que verifican los polinomios de Lamé permite obtener fácilmente los resultados de (CAS80b), lo cual constituye una comprobación adicional del método.

La demostración del método requiere esencialmente mostrar la obtención de las relaciones (2.55) y (2.60). Empecemos por la primera. Llevando la expresión explícita (2.54) de $g_i(x)$ a la ecuación (2.53) se tiene

$$(2.63) \quad \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{c_i} a_j^{(i)} x^j P_N^{(i)}(x) = 0$$

y como por hipótesis $P_N(x)$ solamente tiene raíces simples, tendremos también que

$$(2.64) \quad P_N(x) = (\text{const.}) \prod_{l=1}^N (x - x_l)$$

Ahora, sustituyendo esto en (2.63), dividiendo por $P_N^{(1)}(x)$ y evaluando la

expresión resultante en $x = x_{1_1}$, llegamos a que

$$\sum_{i=2}^n \sum_{j=0}^{c_i} a_j^{(i)} \sum_{\mathcal{F}} \frac{1}{(x_{1_1} - x_{1_2})(x_{1_1} - x_{1_3}) \dots (x_{1_1} - x_{1_i})} = - \sum_{j=0}^{c_1} a_j^{(1)} x^j$$

donde $\sum_{\mathcal{F}}$ indica una suma sobre todos los l_j distintos de l_1 y sujetos a la condición de que todos los l_j sean diferentes. Multiplicando esta expresión por x_{1_1} y sumando sobre todos los l_j , llegamos al resultado (2.55) que queríamos probar.

Para probar la relación (2.60), partimos de la ecuación (2.59). Tras derivar i veces esta última ecuación, se obtiene

$$D_N^{(i)}(x) = (\text{const}) \sum_{k=0}^{N-i} (-1)^k \alpha_k \frac{(N-k)!}{(N-k-i)!} x^{N-i-k}$$

llevando esta derivada a la ecuación diferencial (2.53) y teniendo en cuenta (2.54) se llega a la identidad siguiente

$$\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{c_i} \sum_{k=0}^{N-i} (-1)^k a_j^{(i)} \alpha_k \frac{(N-k)!}{(N-k-i)!} x^{N+j-k-i} = 0$$

Teniendo en cuenta la independencia lineal de las funciones x^n , $n=0,1,2,\dots$, podemos igualar a cero los coeficientes de las diversas potencias de x . Así se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$(2.65a) \quad \sum_{i=0}^n \frac{N!}{(N-i)!} a_{i+q}^{(i)} = 0$$

$$(2.65b) \quad \sum_{m=0}^s (-1)^{s-m} \alpha_{s-m} \sum_{i=0}^n \frac{(N-s+m)!}{(N-s+m-i)!} a_{i+q-m}^{(i)} = 0 ; s > 1$$

Despejando α_s en la relación (2.65b) se obtiene inmediatamente la relación (2.60) que tratábamos de demostrar. Nótese que, de paso, se ha obtenido la

ecuación (2.65a) la cual (al involucrar sólo coeficientes de la ecuación diferencial) nos da una condición necesaria para que la ecuación diferencial (2.53)-(2.54) tenga una solución polinómica con ceros simples.

II.4.- APLICACIONES.

II.4.1.- Densidad de Niveles de los Sistemas Cuánticos.

En este apartado consideraremos el problema de identificar y caracterizar los (operadores Hamiltonianos de los) sistemas cuánticos con una misma densidad de niveles $\rho(E)$ definida por la relación (2.9). Los primeros trabajos en este campo se deben a Wigner (WIG55 y 65) que probó que la distribución de niveles de una matriz aleatoria sigue una ley semicircular; en este caso se dice que la matriz tiene un comportamiento espectral semicircular. Este comportamiento fue observado en modelos de Hamiltonianos aleatorios usados para describir un gran número de sistemas físicos (BR064, BOH69, MAC79, CAS80c, BER81, CAR83, ULL83, BOH84). Recientemente se ha mostrado que el comportamiento semicircular de Wigner tiene un origen determinista (ARN76, MAT80, DEH84b). Existe una clase numerosa de Hamiltonianos no-aleatorios con la ley semicircular como densidad asintótica de autovalores $\rho(E)$, como veremos más adelante.

Aquí se encuentra una solución al problema enunciado anteriormente, por medio del Hamiltoniano de Lanczos del sistema en cuestión. Específicamente nuestro problema es el siguiente:

"Calcular explícitamente la densidad asintótica ($N \rightarrow \infty$) de niveles (2.9) de un sistema cuántico en términos de los parámetros que gobiernan el comportamiento asintótico de los elementos de matriz $H_{n,n} = a_n$, $H_{n,n+1} = H_{n+1,n} = b_n$ de su Hamiltoniano de Lanczos"

Primeramente se describen los resultados principales obtenidos sobre este problema en la forma de un Teorema, después se listan y comentan una serie de consecuencias físicas interesantes y finalmente se demuestra el Teorema (GAL85c).

TEOREMA.

Consideremos los sistemas cuánticos cuyo Hamiltoniano de Lanczos N-dimensional tiene unos elementos de matriz a_n y b_n con el siguiente comportamiento asintótico

$$(2.66) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n^\alpha} = a, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_n}{n^\alpha} = b/2 \geq 0$$

donde $\alpha \geq 0$ y a es un número real. Entonces, la densidad de niveles asintótica definida por

$$(2.67) \quad \rho^*(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \rho_N(E/N^\alpha)$$

viene dada por

$$(2.68) \quad \rho^*(E) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha|a|} (E/a)^{1/\alpha - 1}, & |1 - 2E/a| < 1 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

si $b=0$ y $\alpha > 0$, y por

$$(2.69) \quad \rho^*(E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi b} |\epsilon|^\nu - 1 (1 - \epsilon^2)^{1/2} {}_2F_1\left(\frac{1-\nu}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; 1 - \frac{1}{\epsilon^2}\right), & |\epsilon| < 1 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

si $b > 0$. Aquí

$$(2.70) \quad \epsilon^2 = \left(\frac{E-a}{b}\right)^2, \quad \nu = 1/\alpha - 1$$

y el símbolo F denota la función hipergeométrica

$$(2.71) \quad {}_2F_1(a, b; c; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k!} \frac{(a)_k (b)_k}{(c)_k}$$

donde $(x)_k$ es el símbolo de Pochhammer, o sea $(x)_0 = 1$ y $(x)_k = x(x+1)\dots(x+k-1)$. Nótese que para $\alpha = 0$, la función $\rho^*(E)$ se reduce a la densidad de niveles asintótica usual dada por (2.9), i.e. $\rho(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \rho_N(E)$.

Consecuencias.

A.- Sistemas cuánticos con una densidad de niveles $\rho^*(E)$ uniforme.
 Con $b = 0$ y $\alpha = 1$, la ecuación (2.68) se reduce a

$$(2.72) \quad \rho^*(E) = \begin{cases} \frac{1}{|a|} & , \quad |1 - 2E/a| < 1 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

que define una función uniforme o rectangular

B.- Sistemas cuánticos con una densidad de niveles $\rho(E)$ regular
 Para $b > 0$ y $\alpha = 0$, la ecuación (2.69) se reduce (véase Apéndice B) a

$$(2.73) \quad \rho(E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} [b^2 - (E-a)^2]^{-1/2} & , \quad a-b < E < a+b \\ 0 & , \quad \text{en caso contrario} \end{cases}$$

que define una función semicircular invertida, llamada también función regular. No debe confundirse esto con los términos "regular" e "irregular" usados para adjetivar los espectros de sistemas cuánticos cuasiclásicos cuyo movimiento clásico es cuasiperiódico y ergódico respectivamente (PEG83)

C.- Sistemas cuánticos con una densidad de niveles que engloba a la ley del semicírculo de Wigner.

Para $b > 0$ y $\alpha = 1/(2m+2)$, con $m=0,1,2,\dots$, la ecuación (2.69) muestra que la densidad de niveles tiene la forma

$$(2.74) \quad \rho^*(E) = \begin{cases} \frac{2m+2}{\pi b} |\xi|^{2m} (1-\xi^2)^{1/2} \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k}{2k+1} \binom{m}{k} \left(1 - \frac{1}{\xi^2}\right)^k, & |\xi| < 1 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

con $\xi^2 = ((E-a)/b)^2$. Nótese que para $m = 0$, esta expresión se reduce a la famosa ley del semicírculo de Wigner (WIG55 y 65, BOH69, BER81, BOH84). Por su singular importancia en el estudio de los espectros de los sistemas cuánticos complejos detallaremos este último resultado: Todos los sistemas cuánticos cuyo Hamiltoniano de Lanczos tenga un comportamiento asintótico definido por

$$(2.75) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{1/2} = a \quad \text{y} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_n}{1/2} = b/2 > 0$$

presenta una densidad de niveles $\rho^*(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \rho_N(E/N^{1/2})$ de naturaleza semicircular, o sea

$$(2.76) \quad \rho^*(E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi b} \left[1 - \frac{(E-a)^2}{b^2} \right]^{1/2} & |E - a| < b \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

Este resultado generaliza ampliamente otros muchos obtenidos en diferentes contextos (BRO64, MAT80, MAN83, ULL83, DEH84b) y acentúa el carácter determinista de la ley de Wigner como ya apuntaron otros autores (ARN76, DEH84b).

D.- Sistemas Cuánticos con una densidad de niveles logarítmica.

Para $b > 0$ y $\alpha = 1$, la densidad de niveles dada por la expresión (2.69) se simplifica como sigue:

$$(2.77) \quad \rho^*(E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi b} \ln \left[\frac{1}{|\xi|} (1 + \sqrt{1 - \xi^2}) \right] & , \quad |\xi| < 1 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

En las figuras 1 y 2 se muestra la representación gráfica de algunos

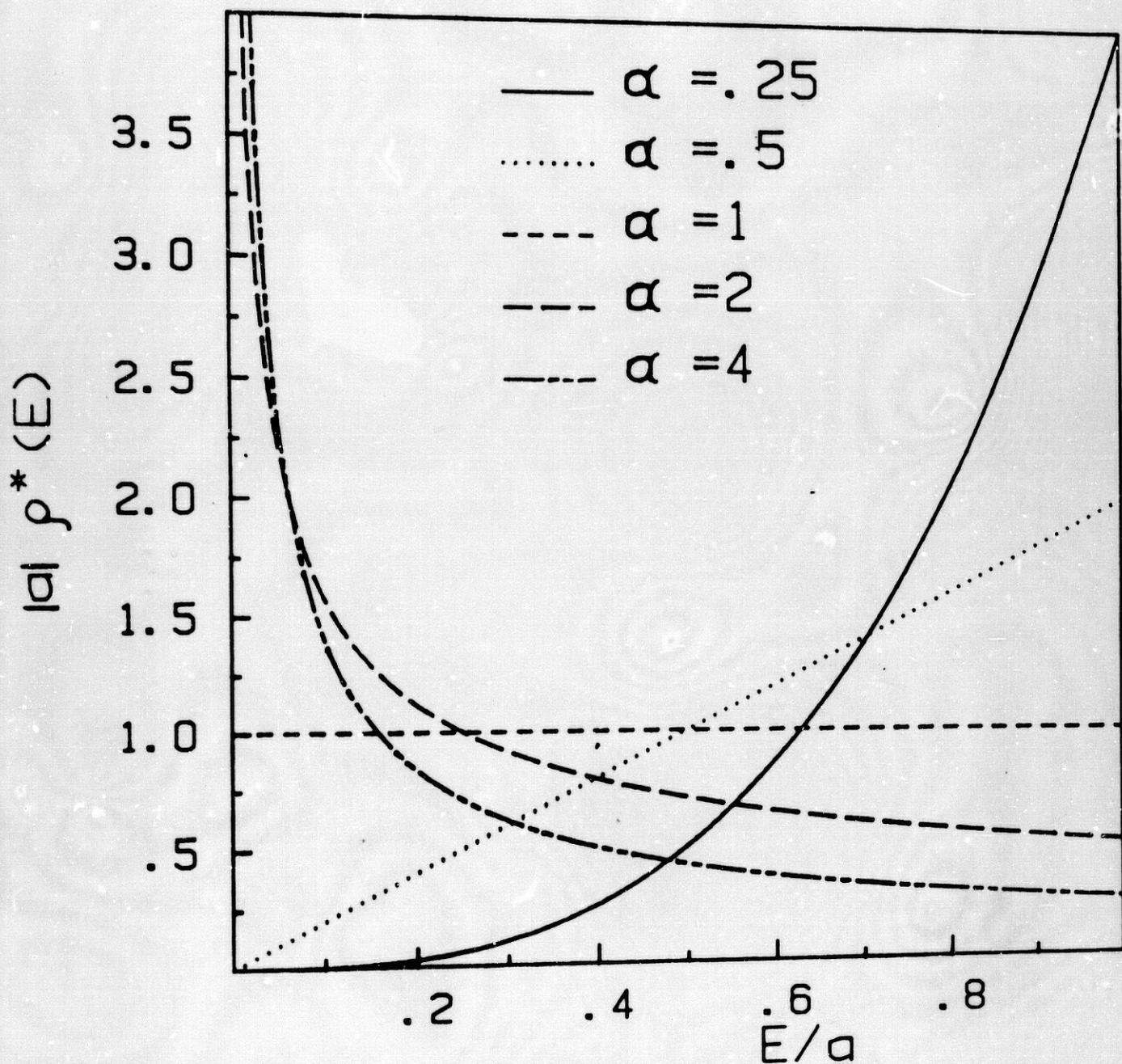


FIGURA 1: Densidad asintótica de niveles (dada por la ecuación (2.68)) de un sistema cuántico tal que su Hamiltoniano de Lanczos tiene elementos de matriz de la forma $a_n = an^\alpha + o(n^{\alpha-1})$ y $b_n = o(n^{\alpha-1})$, donde a es un parámetro real y $\alpha \geq 0$.

Figura 2.- Densidad asintótica de niveles (dada por la ecuación (2.69)) de un sistema cuántico con un Hamiltoniano de Lanczos que satisface $a_n = an^\alpha + O(n^{\alpha-1})$ y $b_n = bn^\alpha/2 + O(n^{\alpha-1})$, donde a es un parámetro real, $b > 0$ y $\alpha \geq 0$. Notemos que (a) desde $\alpha = 0$ hasta 0.5 tenemos la transición desde la distribución regular a la semicircular, y la densidad semicircular se deforma a una distribución (b) picada en $E = a$ para $\alpha = 0.5$ hasta 0.9 y (c) divergente en $E = a$ para $\alpha \geq 1$.

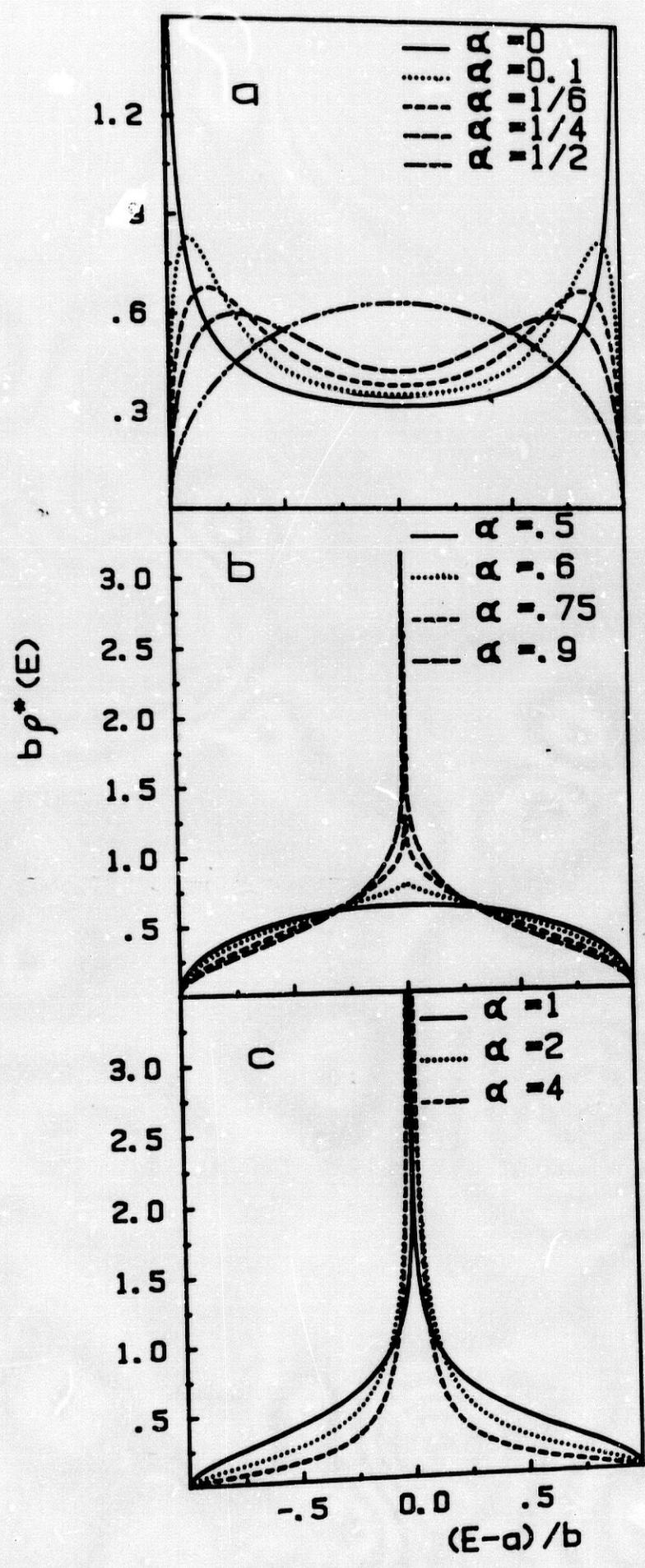


FIGURA 2

casos particulares de las funciones densidad dadas por las expresiones (2.68) y (2.69). La Figura 1 contiene la función densidad (2.68) para varios valores de α . En particular, para $\alpha = 1$ tenemos la densidad uniforme. En la Figura 2 tenemos varios casos particulares de la clase de funciones densidad definida por la ecuación (2.69) La transición de la densidad regular (o semicircular invertida que se obtiene con $\alpha = 0$ ó $m = \infty$) a la ley del semicírculo de Wigner ($\alpha = 1/2$ ó $m = 0$) puede observarse en la Figura 2a. En la Figura 2b puede verse cómo la densidad semicircular va deformándose al pasar de $\alpha = 0.5$ hasta $\alpha = 0.9$. Para valores de α mayores o iguales que la unidad, la estructura continua de la función densidad en todo su dominio de definición se pierde ya que aparece una asíntota en $E = a$, como se ilustra en la figura 2c.

El teorema que aquí se presenta permite obtener todas las funciones densidad de niveles de los sistemas cuánticos que tienen un Hamiltoniano de Lanczos N-dimensional con un comportamiento asintótico gobernado por las condiciones (2.66). Nótese que pueden eventualmente existir otros sistemas físicos cuyo Hamiltoniano de Lanczos tenga un comportamiento asintótico diferente y sin embargo, una vez llevado a cabo el cambio de escala adecuado, posean una densidad de niveles del tipo (2.68) ó (2.69) o de alguno de sus casos particulares. Así, por ejemplo, si los elementos de matriz del Hamiltoniano de Lanczos satisfacen las condiciones asintóticas siguientes

$$(2.78) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{\ln(1+n)} = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_n}{\ln(1+n)} = b/2 > 0$$

entonces la función densidad asintótica ($N \rightarrow \infty$) de autovalores $\rho^{**}(E)$ definida como

$$(2.79) \quad \rho^{**}(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \rho_N(E/\ln N)$$

es una función regular o semicircular invertida. Esto es una muestra de que distintos comportamientos asintóticos del Hamiltoniano de Lanczos de un sistema pueden dar lugar, una vez hecho el cambio de escala apropiado, a la misma función densidad de niveles asintótica.

Las diversas densidades de niveles contenidas en los resultados de este apartado han sido observadas (algunas veces de manera aproximada) en un gran número de sistemas cuánticos. Este es por ejemplo el caso de la densidad uniforme que se verifica en el oscilador armónico simple y se usa como una aproximación muy buena en muchos sistemas complejos, e.g. algunas configuraciones atómicas (COW81). Particularmente llamativo es el haber ampliado considerablemente la clase de Hamiltonianos con una densidad de niveles semicircular. Esta densidad juega un papel importante en la teoría estadística de los espectros de los núcleos pesados (POR65, GAR72, BRO81, BOH84) así como en el estudio de los sólidos amorfos (MAT80, BUL80, PET85) y otros sistemas físicos (MAC79, CAS80c, BER81, PEC83). La ley del semicírculo fué derivada por primera vez por Wigner (WIG55 y 65) aunque no para un Hamiltoniano específico sino para la media tomada sobre un conjunto ortogonal gaussiano de Hamiltonianos. Más tarde se mostró el origen determinista de esta ley (ARN76, DEH84b). En este sentido, nuestros resultados acentúan este origen y amplían considerablemente la familia de Hamiltonianos no-aleatorios con la densidad de Wigner.

Demostración.

Partiendo de las hipótesis (2.66), hemos de probar las expresiones (2.68) y (2.69). Demostremos en primer lugar la expresión (2.68). Para ello, sea $b=0$ $a \in \mathbb{R}$ y $\alpha \geq 0$ en (2.66). Entonces, tomando $\phi(t) = t^\alpha$ la expresión (2.37) da para los momentos μ'_r de la densidad asintótica $\rho^*(E)$ los valores siguientes

$$(2.80) \quad \mu'_r = \frac{a^r}{\alpha r + 1}$$

La función característica $\psi(s)$ asociada a estos momentos es según (2.13) de la forma

$$(2.81) \quad \psi(s) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(is)^r}{r!} \mu'_r = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(is)^r}{r!} \frac{a^r}{\alpha r + 1} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{z^r}{(\alpha r + 1) r!}$$

con $z=ias$. Teniendo en cuenta (ERD53) el desarrollo en serie de potencias de la función Gamma incompleta, i.e.

$$\gamma(a, z) = z^a \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-z)^n}{(a+n)n!}$$

puede obtenerse

$$(2.82) \quad \psi(s) = \frac{1}{\alpha} (ias)^{-1/\alpha} \gamma\left(\frac{1}{\alpha}, -ias\right)$$

Haciendo uso de la relación entre la función Gamma incompleta y la función hipergeométrica confluyente (GRA80), i.e.

$$\gamma(a, z) = \frac{z^a}{a} e^{-z} \phi(1, 1+a; z)$$

se llega finalmente a la siguiente expresión para la función característica $\psi(s)$

$$(2.83) \quad \psi(s) = e^{ias} \phi(1, 1+1/\alpha; -ias)$$

Por lo tanto la función densidad $\mathcal{P}^*(E)$ vendrá dada por

$$(2.84) \quad \begin{aligned} \mathcal{P}^*(E) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iEs} \psi(s) ds = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iEs} e^{ias} \phi(1, 1+1/\alpha; -ias) \end{aligned}$$

que conduce (ERD53) a la expresión deseada (2.68)

Para demostrar la expresión (2.69) trabajaremos en una forma parecida. Suponiendo en primer lugar que $a=0$ y $b>0$ en (2.66) y utilizando la expresión

(2.37) con $\phi(t) = t^\alpha$ podemos obtener que los momentos μ'_r de la densidad asintótica $\varrho^*(E)$ vienen dados por

$$(2.85) \quad \mu'_{2n} = \frac{1}{2\alpha n+1} \frac{(2n)!}{(n!)^2} (b/2)^{2n}$$

$$\mu'_{2n+1} = 0$$

Por lo tanto, la función característica $\psi(s)$ asociada a estos momentos viene dada por

$$(2.86) \quad \begin{aligned} \psi(s) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(is)^{2n}}{(2n)!} \frac{1}{2\alpha n+1} \frac{(2n)!}{(n!)^2} (b/2)^{2n} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \frac{1}{2\alpha n+1} \left(\frac{bs}{2}\right)^{2n} \end{aligned}$$

Esta serie puede expresarse en la forma (HAN75, ec. 6.10.5) siguiente

$$(2.87) \quad \begin{aligned} \psi(s) &= \frac{1}{\alpha} (bs)^{-1/\alpha} \int_0^{bs} t^{1/\alpha-1} J_0(t) dt \\ &= \frac{1}{\alpha} \int_0^1 x^{1/\alpha-1} J_0(bsx) dx \end{aligned}$$

donde el símbolo J denota a la función de Bessel.

Por lo tanto, la función densidad $\varrho^*(E)$, transformada inversa de Fourier de $\psi(s)$, toma la forma

$$(2.88) \quad \varrho^*(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iEs} \frac{1}{\alpha} \left[\int_0^1 x^{1/\alpha-1} J_0(bsx) dx \right] ds$$

que nos conduce, después de llevar a cabo la integral sobre s y hacer algunos cambios, a

$$(2.89) \quad \rho^*(E) = \frac{1}{\pi \alpha b} \int_0^{\sqrt{1-c^2}} (t^2+c^2)^{(\nu-1)/2} dt$$

donde $c=|E|/a$ y $\nu = 1/\alpha - 1$. Usando (ERD53, Vol. II, pg.186) se llega a

$$(2.90) \quad \rho^*(E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi \alpha b} |c|^{\nu-1} \sqrt{1-c^2} {}_2F_1\left(\frac{1-\nu}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; 1 - \frac{1}{c^2}\right), & |c| < 1 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

La expresión (2.90) puede generalizarse al caso en el que $a \neq 0$. Para ello nos podemos fijar o bien en el Hamiltoniano de Lanczos, o bien en la relación de recurrencia que satisfacen los polinomios característicos de las submatrices principales $n \times n$ del Hamiltoniano H de Lanczos. Si los coeficientes a_n y b_n satisfacen las condiciones límite (2.66) con a y b distintos de cero, podemos hacer el cambio de variable $E = E' + a$, obteniendo un nuevo sistema de polinomios que denotaremos por $\hat{P}_n(E')$ y que satisfacen la relación de recurrencia

$$\hat{P}_n(E') = (E' - (a_n - a)) \hat{P}_{n-1}(E') - b_{n-1}^2 \hat{P}_{n-2}(E')$$

$$\hat{P}_0(E') = 1, \quad \hat{P}_{-1}(E') = 0$$

Los coeficientes de esta relación de recurrencia satisfacen las condiciones límite (2.66) con $a=0$ y $b > 0$, por lo que la densidad asintótica de autovalores de $\hat{P}_n(E')$ vendrá dada por (2.90), siendo E' la variable. Deshaciendo el cambio anteriormente realizado, se obtiene para la densidad asintótica $\rho^*(E)$ la expresión buscada (2.69).

II.4.2.- Densidad de ceros de varios sistemas de polinomios ortogonales

A.- Polinomios de Bessel Generalizados

Estos polinomios aparecieron en los años treinta (BOC29, BUR31) como el cuarto tipo de polinomios ortogonales satisfaciendo una ecuación diferencial de segundo orden, siendo los otros los sistemas clásicos de polinomios de Jacobi, Laguerre y Hermite. Sin embargo, el primer estudio sistemático de sus propiedades no fue llevado a cabo hasta veinte años después (KRA49) en conexión con la solución de la ecuación de ondas en coordenadas esféricas. Poco después se observó (THO49 y 52) el importante papel que estos polinomios juegan en la teoría de redes, de forma que actualmente se pueden encontrar no solo en artículos avanzados (MAR74, JOH76), sino también en libros de texto de diseño y síntesis de redes (GUI58, HAZ63, WEI75). Para más información y detalles acerca de los polinomios de Bessel y sus aplicaciones puede verse la monografía de Grosswald (GRO78).

Aquí vamos a mostrar la solución de algunos de los problemas abiertos acerca de los Polinomios de Bessel Generalizados $y_n(x;a,b)$, como son los siguientes

- (i) Encontrar fórmulas explícitas para los "momentos" y_r , $r=1,2,\dots$ de $y_n(x;a,b)$.
- (ii) Encontrar relaciones de recurrencia para los "momentos" y_r .
- (iii) Obtener expresiones explícitas para las llamadas funciones simétricas homogéneas de suma-producto h_r , $r=1,2,\dots$ de los ceros de los polinomios $y_n(x;a,b)$.

Los dos primeros problemas han sido explícitamente señalados por Grosswald (GRO78), e involucran a las cantidades y_r que, convenientemente normalizadas, representan a los momentos alrededor del origen de la densidad de ceros de los polinomios. Así, primeramente daremos un repaso de las características conocidas de estos polinomios y que nos interesan para resolver los problemas aquí expuestos, expondremos a continuación los resultados encontrados y pasaremos después a su demostración.

Los polinomios de Bessel Generalizados $y_n(x;a,b)$ fueron definidos (KRA49) como la solución polinómica de la ecuación diferencial

$$(2.91) \quad x^2 y'' + (ax+b)y' - n(n+a-1)y = 0$$

Puede verse que el polinomio $y_n(bx;a,b)$ es independiente de b , por lo que este parámetro es sólo un factor de escala para la variable independiente y no un parámetro esencial. Esta es la razón por la que algunos autores prefieren los polinomios $y_n(x;a) = y_n(x;a,2)$ o igual $Y_n^{(\alpha)}(x) \equiv y_n(x;\alpha+2,2)$ así que $y_n(x;2) = Y_n^{(0)}(x) = y_n(x)$ es llamado el polinomio de Bessel ordinario (GRO78, CHI77).

La expresión explícita de estos polinomios viene dada por (GRO78)

$$(2.92) \quad y_n(x;a,b) = \sum_{i=0}^n \frac{b^i}{i!} \frac{n^{(i)}}{(2n+a-2)^{(i)}} x^{n-i}$$

donde hemos usado la notación

$$u^{(i)} = u(u-1)(u-2)\dots(u-i+1), \quad i \geq 1, \quad u^{(0)} = 1$$

Resultados principales:

1.- La expresión explícita de los "momentos" y_r en función de a , b y n es la siguiente

$$(2.93) \quad y_r = \sum_{(\lambda)} (-1)^{r-\sum \lambda} \frac{(-1 + \sum \lambda)! r}{\lambda_1! \dots \lambda_n!} \prod_{i=1}^n \left[\frac{(-b)^i n^{(i)}}{i! (2n+a-2)^{(i)}} \right]^{\lambda_i}$$

donde $\sum_{(\lambda)}$ y $\sum \lambda$ tienen el significado ya conocido expuesto en el apartado II.3

2.- Las cantidades y_r satisfacen la siguiente relación de recurrencia

$$(2.94) \quad \left\{ 2 \left[n - \frac{1}{2}(r+2) \right] + a \right\} y_{r+1} = -(by_r + \sum_{t=1}^r y_{r+1-t} y_t)$$

con la condición inicial $y_1 = -bn/(2n+a-2)$.

A partir de las ecuaciones (2.93) ó (2.94) se pueden hallar un conjunto de resultados ya encontrados por otros autores (GR078). En particular, los primeros "momentos" valen

$$y_2 = b^2 \frac{n(n+a-2)}{(2n+a-3)(2n+a-2)^2}$$

$$y_3 = -b^3 \frac{n(a-2)(n+a-2)}{(2n+a-2)^3(2n+a-3)(2n+a-4)}$$

$$y_4 = \frac{b^3 n(n+a-2) (a^3-7a^2+16a-12) + (a^2-2a)n + (8-3a)n^2 - 2n^3}{(2n+a-2)^4(2n+a-3)^2(2n+a-4)(2n+a-5)}$$

A partir de la ecuación (2.93) puede verse que, para los polinomios de Bessel ordinarios, los "momentos" y_{2k+1} valen cero como ya fue apuntado por Ismail y Kelker (ISM76). También puede verse que las cantidades $\mu_r^{(n)} = y_r/n$ se anulan cuando $n \rightarrow \infty$, y $r = 1, 2, \dots$ como también es conocido (DEH78d)

3.- La expresión explícita de las funciones simétricas homogéneas de suma producto h_r en función de a , b y n viene dada por

$$(2.95) \quad h_r = \sum_{(\lambda)} (-1)^{r-\sum \lambda} \frac{(\sum \lambda)!}{\lambda_1! \dots \lambda_n!} \prod_{i=1}^n \left[\frac{(-b)^i n^{(i)}}{i! (2n+a-2)^{(i)}} \right]^{\lambda_i}$$

Las primeras funciones h_r vienen dadas por

$$h_1 = \frac{-bn}{(2n+a-2)}$$

$$h_2 = \frac{b^2 n n(2n+a-2) + a-2}{2(2n+a-2)^2(2n+a-3)}$$

$$h_3 = - \frac{b^3 n 4n^4 + 4(a-2)n^3 + (a^2+2a-12)n^2 + (3a^2-16a+20)n + 2(a-2)^2}{6(2n+a-2)^3(2n+a-3)(2n+a-4)}$$

Para demostrar las ecuaciones (2.93) y (2.95) basta con darse cuenta de que la expresión explícita (2.92) de los Polinomios de Bessel Generalizados es de la forma (2.38)-(2.39) con

$$a_i = \frac{(-b)^i}{i!} \frac{n^{(i)}}{(2n+a-2)^{(i)}}$$

La mera sustitución de este valor en las ecuaciones (2.40) y (2.49) produce las ecuaciones buscadas (2.93) y (2.95) respectivamente, una vez tenido en cuenta el factor de escala que diferencia a los "momentos" y_r de los momentos alrededor del origen $\mu_r^{(n)}$.

De igual forma, la ecuación diferencial (2.91) que satisfacen estos polinomios es de la forma (2.53)-(2.54) con $q = 0$. Por lo tanto la ecuación (2.55) deriva en

$$(2.96) \quad 2 \left[a_0^{(2)} J_r + a_1^{(2)} J_{r+1} + a_2^{(2)} J_{r+2} \right] = -a_0^{(1)} y_r - a_1^{(1)} y_{r+1}, \quad r=0,1,2,\dots$$

donde

$$(2.97) \quad J_k = \sum_{1_1 \neq 1_2} \frac{x_{1_1}^k}{(x_{1_1} - x_{1_2})} = \begin{cases} 0 & k=0 \\ n(n-1)/2 & k=1 \\ (n-1)y_1 & k=2 \\ (n-k/2)y_{k-1} + \frac{1}{2} \sum_{t=1}^{k-2} y_{k-1-t} y_t, & k \geq 3 \end{cases}$$

La comparación de (2.54) y (2.91) da

$$a_2^{(2)} = 1, \quad a_1^{(2)} = 0, \quad a_0^{(2)} = 0$$

$$a_1^{(1)} = a, \quad a_0^{(1)} = b, \quad a_0^{(0)} = -n(n+a-1)$$

Introduciendo estos valores en (2.96) y teniendo en cuenta (2.97) se obtiene la expresión (2.94) que buscábamos.

B.- Polinomios de Fibonacci y Lucas

Recientemente Doman y Williams (DOM81) han introducido dos nuevos conjuntos de polinomios que son los llamados polinomios de Fibonacci $F_{n+1}(z)$ y los de Lucas $L_n(z)$. Estos polinomios juegan un papel peculiar en la teoría de cadenas de Ising monodimensionales (WIL81), y vienen definidos por

$$F_{n+1}(z) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \binom{n-m}{m} z^m \quad (2.98)$$

$$L_n(z) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{n}{n-m} \binom{n-m}{m} z^m$$

para $n = 1, 2, \dots$ y con $F_0(z) = 1$, $F_1(z) = 1$, $L_0(z) = 2$. Aquí, $\lfloor n/2 \rfloor$ indica la parte entera de $n/2$.

Acerca de estos polinomios pretendemos estudiar propiedades espectrales medias o globales mediante los "momentos" y_r , encontrando su expresión explícita y una relación de recurrencia que los ligue. También daremos una expresión explícita para las funciones h_r de los ceros de los polinomios. Para ello exponemos a continuación las propiedades conocidas de estos polinomios que sirvan para nuestros propósitos.

Por conveniencia, los polinomios de índice par serán separados de los de índice impar y además los normalizaremos de tal forma que el coeficiente de z^n sea la unidad. Así obtenemos

$$(2.99a) \quad F_n^{(i)}(z) \equiv F_{2n+1}(z) = \sum_{i=0}^n \binom{n+i}{n-i} z^{n-i}$$

$$(2.99b) \quad F_n^{(p)}(z) \equiv F_{2n+2}(z) = \sum_{i=0}^n \frac{1}{n+1} \binom{n+i+1}{n-i} z^{n-i}$$

y

$$(2.99c) \quad L_n^{(i)}(z) \equiv L_{2n+1}(z) = \sum_{i=0}^n \frac{1}{n+i+1} \binom{n+i+1}{n-i} z^{n-i}$$

$$(2.99d) \quad L_n^{(p)}(z) \equiv L_{2n}(z) = \sum_{i=0}^n \frac{n}{n+i} \binom{n+i}{n-i} z^{n-i}$$

Los polinomios $F_n^{(k)}$ y $L_n^{(k)}$ con $k = i, p$ son polinomios de grado n . Los superíndices p e i denotan par e impar respectivamente. Doman y Williams han demostrado que estos polinomios están relacionados con la función hipergeométrica ${}_2F_1(a, b; c; z)$ por las siguientes expresiones

$$F_{n+1}(z) = {}_2F_1(-n/2, -n/2+1/2; -n; -4z)$$

$$L_n(z) = {}_2F_1(-n/2, -n/2+1/2; 1-n; -4z)$$

Estas expresiones conducen a las siguientes ecuaciones diferenciales satisfechas por estos dos conjuntos de polinomios

$$z(1+4z) \frac{d^2 F_{n+1}(z)}{dz^2} - [n + 2(2n-3)z] \frac{dF_{n+1}}{dz} + n(n-1)F_{n+1} = 0$$

(2.100)

$$z(1+4z) \frac{d^2 L_n}{dz^2} - [(n-1) + 2(2n-3)z] \frac{dL_n}{dz} + n(n-1)L_n = 0$$

Los principales resultados obtenidos son los siguientes:

1.- La expresión explícita de los "momentos" y_r para los diversos polinomios son las siguientes

$$(2.101a) \quad y_r^{(i)}(F) = \sum_{(\lambda)} a(\lambda)_r \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i!} \left[\binom{n+i}{n-i} \right]^{\lambda_i}$$

$$(2.101b) \quad y_r^{(p)}(F) = \sum_{(\lambda)} a(\lambda)_r \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i!} \left[\frac{1}{n+1} \binom{n+i+1}{n-i} \right]^{\lambda_i}$$

para los polinomios de Fibonacci, y

$$(2.101c) \quad y_r^{(i)}(L) = \sum_{(\lambda)} a(\lambda)_r \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i!} \frac{1}{n+i+1} \left[\binom{n+i+1}{n-i} \right]^{\lambda_i}$$

$$(2.101d) \quad y_r^{(p)}(L) = \sum_{(\lambda)} a(\lambda)_r \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i!} \left[\frac{n}{n+i} \binom{n+i}{n-i} \right]^{\lambda_i}$$

para los polinomios de Lucas. Aquí $a(\lambda) \equiv (-1)^{\sum \lambda} (-1 + \sum \lambda)!$, y los demás símbolos son ya conocidos.

2.- Los "momentos" y_r de estos polinomios satisfacen las siguientes relaciones de recurrencia

$$(2.102) \quad \begin{aligned} y_1^{(i)}(F) &= -\frac{1}{2} n(n+1) \\ y_2^{(i)}(F) &= \frac{1}{3} y_1^{(i)}(F) [2y_1^{(i)}(F) - 1] \\ (4r+2)y_{r+1}^{(i)}(F) &= y_r^{(i)}(F) [4y_1^{(i)}(F) - (r+1)] + \\ &+ \sum_{t=1}^{r-1} y_t^{(i)}(F) [y_{r-t}^{(i)}(F) + 4y_{r+1-t}^{(i)}(F)] \quad , r \geq 2 \end{aligned}$$

para los polinomios de Fibonacci de índice impar,

$$(2.103) \quad \begin{aligned} y_1^{(p)}(F) &= -\frac{1}{6} n(n+2) \\ y_2^{(p)}(F) &= \frac{1}{10} y_1^{(p)}(F) [4y_1^{(p)}(F) - 3] \\ (4r+6)y_{r+1}^{(p)}(F) &= y_r^{(p)}(F) [4y_1^{(p)}(F) - (r+2)] + \\ &+ \sum_{t=1}^{r-1} y_t^{(p)}(F) [y_{r-t}^{(p)}(F) + 4y_{r+1-t}^{(p)}(F)] \quad , r \geq 2 \end{aligned}$$

para los polinomios de Fibonacci de índice par,

$$\begin{aligned}
 y_1^{(i)}(L) &= -\frac{1}{6} n(n+1) \\
 y_2^{(i)}(L) &= \frac{1}{5} y_1^{(i)}(L) [2y_1^{(i)}(L) - 1] \\
 (2.104) \quad & \\
 (4r+6)y_{r+1}^{(i)}(L) &= y_r^{(i)}(L) [4y_1^{(i)}(L) - (r+1)] + \\
 &+ \sum_{t=1}^{r-1} y_t^{(i)}(L) [y_{r-t}^{(i)}(L) + 4y_{r+1-t}^{(i)}(L)]
 \end{aligned}$$

para los polinomios de Lucas de índice impar y

$$\begin{aligned}
 y_1^{(p)}(L) &= -\frac{1}{2} n^2 \\
 y_2^{(p)}(L) &= \frac{1}{6} y_1^{(p)}(L) [4y_1^{(p)}(L) - 1] \\
 (2.105) \quad & \\
 (4r+2)y_{r+1}^{(p)}(L) &= y_r^{(p)}(L) [4y_1^{(p)}(L) - r] + \\
 &+ \sum_{t=1}^{r-1} y_t^{(p)}(L) [y_{r-t}^{(p)}(L) + 4y_{r+1-t}^{(p)}(L)]
 \end{aligned}$$

para los polinomios de Lucas de índice par.

A partir de la expresión explícita para y_r ó de la relación de recurrencia que satisface se obtiene que los primeros "momentos" para los diversos polinomios valen

$$\begin{aligned}
 y_2^{(i)}(F) &= \frac{1}{6} n(n+1)(n^2+n+1) \\
 y_3^{(i)}(F) &= -\frac{1}{120} n(n+1)(8n^4+16n^3+19n^2+11n+6) \\
 y_2^{(p)}(F) &= \frac{1}{180} n(n+2)(2n^2+4n+9) \\
 y_3^{(p)}(F) &= -\frac{1}{7560} n(n+2)(8n^4+32n^3+77n^2+90n+108)
 \end{aligned}$$

para los polinomios de Fibonacci, y

$$y_2^{(i)}(L) = \frac{1}{90} n(n^3 + 2n^2 + 4n + 3)$$

$$y_3^{(i)}(L) = -\frac{1}{7560} n(8n^5 + 24n^4 + 51n^3 + 62n^2 + 81n + 54)$$

$$y_2^{(p)}(L) = \frac{1}{12} n^2(2n^2 + 1)$$

$$y_3^{(p)}(L) = -\frac{1}{120} n^2(8n^4 + 5n^2 + 2)$$

para los polinomios de Lucas.

3.- Las funciones h_r de los ceros de los polinomios son de la forma

$$(2.106a) \quad h_r^{(i)}(F) = \sum_{(\lambda)} b(\lambda) \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i!} \left[\binom{n+i}{n-i} \right]^{\lambda_i}$$

$$(2.106b) \quad h_r^{(p)}(F) = \sum_{(\lambda)} b(\lambda) \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i!} \left[\frac{1}{n+1} \binom{n+i+1}{n-i} \right]^{\lambda_i}$$

para los polinomios de Fibonacci, y

$$(2.106c) \quad h_r^{(i)}(L) = \sum_{(\lambda)} b(\lambda) \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i!} \left[\frac{1}{n+i+1} \binom{n+i+1}{n-i} \right]^{\lambda_i}$$

$$(2.106d) \quad h_r^{(p)}(L) = \sum_{(\lambda)} b(\lambda) \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i!} \left[\frac{n}{n+i} \binom{n+i}{n-i} \right]^{\lambda_i}$$

para los polinomios de Lucas. Aquí $b(\lambda) \equiv (-1)^{\sum \lambda} (\sum \lambda)!$ y los demás símbolos son ya conocidos.

Para demostrar las expresiones (2.101a) y (2.106a) tengamos en cuenta que la expresión explícita (2.99a) de los polinomios de Fibonacci de orden impar es de la forma (2.38) con

$$a_i = (-1)^i \binom{n+i}{n-i}$$

es suficiente sustituir este valor en las expresiones (2.40) y (2.49) para obtener las ecuaciones (2.101a) y (2.106a) respectivamente. De forma análoga se demuestran las expresiones (2.101b-d) y (2.106b-d).

Para demostrar la relación de recurrencia (2.102) tengamos presente que la ecuación diferencial satisfecha por los polinomios de Fibonacci de orden impar viene dada por

$$(2.107) \quad z(1+4z) \frac{d^2 F_n^{(i)}}{dz^2} - 2(n+(4n-3)z) \frac{dF_n^{(i)}}{dz} + 2n(2n-1)F_n^{(i)} = 0$$

que es de la forma (2.53)-(2.54) con $q = 0$. Para una ecuación diferencial de este tipo se satisface la relación de recurrencia

$$2 \left[a_0^{(2)} J_r + a_1^{(2)} J_{r+1} + a_2^{(2)} J_{r+2} \right] = -a_0^{(1)} y_r - a_1^{(1)} y_{r+1}$$

donde los símbolos J_k vienen dados por (2.97). Teniendo en cuenta que los valores de los coeficientes $a^{(i)}$ de los polinomios de Fibonacci de índice impar vienen dados por

$$a_0^{(2)} = 0, a_1^{(2)} = 1, a_2^{(2)} = 4, a_0^{(1)} = -2n \text{ y } a_1^{(1)} = 6-8n$$

se obtiene la siguiente expresión

$$4J_{r+2} + J_{r+1} = ny_r + (4n-3)y_{r+1}$$

Con la ayuda de (2.97) se obtiene la ecuación buscada (2.102). De igual forma pueden demostrarse las ecuaciones (2.103)-(2.105).

Por completitud, digamos que existen otros polinomios en la literatura matemática con los mismos nombres que los aquí descritos. De hecho, Lucas (LUC91) en su trabajo sobre teoría de números estudió una clase de polinomios de dos variables denotados por $U_n(x,y)$ y definidos por la relación de recurrencia

$$U_{n+2}(x,y) = x U_{n+1}(x,y) - y U_n(x,y)$$

con las condiciones iniciales $U_0 = 0, U_1 = 1$. Con $y = -1$ estos polinomios de Lucas han sido llamados polinomios de Fibonacci. Sin embargo existen fuertes diferencias entre estos polinomios y los aquí estudiados.

A continuación vamos a estudiar relaciones de recurrencia entre los "momentos" y_r de los ceros de los polinomios de Heine, Hermite Generalizados y los de tipo Bessel partiendo de la ecuación diferencial que satisfacen.

C.- Polinomios de Heine

Estos polinomios fueron introducidos por Heine (HEI78) en su tratado sobre armónicos esféricos y son considerados en una forma más precisa por Chihara (CHI77). Recientemente (AOM84) han sido usados en conexión con la teoría de fenómenos no-lineales. Estos polinomios forman un sistema ortogonal en el sentido

$$\int_0^\alpha P_m(x) P_n(x) w(x) dx = 0, m \neq n$$

donde $w(x) = [x(\alpha-x)(\beta-x)]^{-1/2}$, $0 < \alpha < \beta$. También satisfacen la ecuación diferencial

$$(2.108) \quad 2w^2(x)(x-\gamma)f''(x) + \{(x-\gamma)[w^2(x)]' - 2w^2(x)\}f'(x) + [a+bx-n(2n-1)x^2]f(x) = 0$$

Como podemos observar la ecuación diferencial (2.108) que satisfacen es de la forma (2.53)-(2.54) con los coeficientes

$$a_4^{(2)} = 2, a_3^{(2)} = -2(\alpha + \beta + \gamma), a_2^{(2)} = 2(\alpha\beta + \alpha\gamma + \beta\gamma), a_1^{(2)} = -2\alpha\beta\gamma, a_0^{(2)} = 0$$

$$a_3^{(1)} = 1, a_2^{(1)} = -3\gamma, a_1^{(1)} = 2(\alpha\gamma + \beta\gamma) - \alpha\beta, a_0^{(1)} = -\alpha\beta\gamma$$

$$a_2^{(0)} = -n(2n-1), a_1^{(0)} = b, a_0^{(0)} = a$$

De acuerdo con la ecuación (2.58), tenemos que $q = 2$ en este caso. Entonces tenemos que calcular y_1 e y_2 por medio de las relaciones (2.60)-(2.62). Estas ecuaciones dan

$$\alpha_1 = \frac{1}{4n-3} [2(\alpha + \beta + \gamma)n^2 - (2\alpha + 2\beta - \gamma)n - b]$$

$$\alpha_2 = -\frac{1}{8n-10} \left[\left\{ -2(\alpha + \beta + \gamma)n^2 + 3(2\alpha + 2\beta + \gamma)n + (b - 4\alpha - 4\beta - \gamma) \right\} \alpha_1 - \left\{ 2(\alpha\beta + \alpha\gamma + \beta\gamma)n^2 - 3\alpha\beta n + a \right\} \right]$$

Esto, junto a las dos primeras expresiones de (2.62), conduce a

$$y_1 = \frac{1}{4n-3} [2(\alpha + \beta + \gamma)n^2 - (2\alpha + 2\beta - \gamma)n - b]$$

(2.109)

$$y_2 = y_1^2 - \frac{1}{4n-5} [2(\alpha + \beta + \gamma)n^2 - 3(2\alpha + 2\beta + \gamma)n + 4\alpha + 4\beta + \gamma - b] y_1 - \frac{1}{4n-5} [2(\alpha\beta + \beta\gamma + \alpha\gamma)n^2 - 3\alpha\beta n + a]$$

Por otra parte, la relación básica (2.55) da

$$4 \left[J_{r+4}^{(2)} - (\alpha + \beta + \gamma) J_{r+3}^{(2)} + (\alpha\beta + \alpha\gamma + \beta\gamma) J_{r+2}^{(2)} - \alpha\beta\gamma J_{r+1}^{(2)} \right] = \alpha\beta\gamma y_r - (2\alpha\beta + 2\beta\gamma - \alpha\beta) y_{r+1} + 3\gamma y_{r+2} - y_{r+3}$$

para $r = 0, 1, 2, \dots$. Como $J_0^{(2)} = 0$, $J_1^{(2)} = n(n-1)/2$, $J_2^{(2)} = (n-1)y_1$, y

Handwritten signature

$$(2.110) \quad J_r^{(2)} = \frac{1}{2} \left[(2n-r)y_{r-1} + \sum_{j=1}^{r-2} y_{r-1-j} y_j \right], \quad r \geq 3$$

esta relación conduce directamente a las siguientes expresiones

$$(2.111a) \quad y_3 = \frac{1}{4n-7} \left\{ \left[4(\alpha + \beta + \gamma)n - 3(2\alpha + 2\beta + \gamma) \right] y_2 - 4y_1 y_2 + 2(\alpha + \beta + \gamma)y_1^2 + \right. \\ \left. + \left[5\alpha\beta + 2\alpha\gamma + 2\beta\gamma - 4(\alpha\beta + \alpha\gamma + \beta\gamma)n \right] y_1 + 2\alpha\beta\gamma n^2 - \alpha\beta\gamma n \right\}$$

$$(2.111b) \quad y_4 = \frac{1}{4n-9} \left\{ -4y_3 y_1 - 2y_2^2 + \left[4(\alpha + \beta + \gamma)n - 8\alpha - 8\beta - 5\gamma \right] y_3 + 4(\alpha + \beta + \gamma)y_2 y_1 + \right. \\ \left. + \left[7\alpha\beta + 4\alpha\gamma + 4\beta\gamma - 4(\alpha\beta + \alpha\gamma + \beta\gamma)n \right] y_2 - 2(\alpha\beta + \alpha\gamma + \beta\gamma)y_1^2 + \right. \\ \left. + (4\alpha\beta\gamma n - 3\alpha\beta\gamma) y_1 \right\}$$

$$(2.111c) \quad y_{r+3} = \frac{1}{4n-7-2r} \left\{ \alpha\beta\gamma y_r - (2\alpha\gamma + 2\beta\gamma - \alpha\beta)y_{r+1} + 3\gamma y_{r+2} - \right. \\ \left. - 2 \left[\sum_{i=1}^{r+2} y_{r+3-i} y_i - (\alpha + \beta + \gamma) (2n-3-r)y_{r+2} + \sum_{i=1}^{r+1} y_{r+2-i} y_i + \right. \right. \\ \left. \left. + (\alpha\beta + \alpha\gamma + \beta\gamma) \left[(2n-2-r)y_{r+1} + \sum_{i=1}^r y_{r+1-i} y_i \right] - \right. \right. \\ \left. \left. - \alpha\beta\gamma \left[(2n-1-r)y_r + \sum_{i=1}^{r-1} y_{r-i} y_i \right] \right\}$$

válida para $r \geq 2$. Por medio de estas tres expresiones podemos evaluar fácilmente todos los "momentos" y_r , $r > 2$ en términos de los valores conocidos (2.109) de y_1 y y_2 . A partir de las ecuaciones (2.109) y (2.111) se puede evaluar de una forma trivial los momentos alrededor del origen $\mu'_r = s_r/n$ de la densidad de ceros de los polinomios de Heine de orden n que determinan unívocamente el espectro.

D.- Polinomios de Hermite Generalizados

Estos polinomios fueron introducidos por Szego (SZE18) y estudiados extensamente por Chihara (CHI77). Se denotan por $H_n^{(\mu)}(x)$, donde $\mu \neq 0$ es un parámetro real. Para $\mu = 0$ son los conocidos polinomios ortogonales de Hermite.

Estos polinomios constituyen un sistema ortogonal y satisfacen la ecuación diferencial

$$xf''(x) + 2(\mu - x^2)f'(x) + (2nx - \theta_n x^{-1})f(x) = 0$$

donde $\theta_{2n} = 0$ y $\theta_{2n+1} = 2\mu$. La distribución de ceros de estos polinomios es la misma que la de la solución polinómica de la ecuación

$$x^2 f''(x) + 2(\mu x - x^3)f'(x) + (2nx^2 - \theta_n)f(x) = 0$$

Esta expresión es de la forma (2.53)-(2.54) con los coeficientes

$$a_2^{(2)} = 1, \quad a_1^{(2)} = 0, \quad a_0^{(2)} = 0$$

$$a_3^{(1)} = -2, \quad a_2^{(1)} = 0, \quad a_1^{(1)} = 2\mu, \quad a_0^{(1)} = 0$$

$$a_2^{(0)} = 2n, \quad a_1^{(0)} = 0, \quad a_0^{(0)} = -\theta_n$$

De acuerdo con la ecuación (2.58) tenemos que $q = 2$. Por lo tanto tenemos que calcular y_1 e y_2 antes de usar la relación recursiva (2.55) ó (2.57). Las ecuaciones (2.60)-(2.62) dan $y_1 = 0$ y

$$(2.112a) \quad y_2 = \frac{1}{2} [n(n-1) + 2\mu n - \theta_n]$$

Las otras cantidades y_r , $r \geq 3$ se pueden calcular por medio de la relación básica (2.55), la cual da $y_3 = 0$ y

$$y_{r+3} = J_{r+2}^{(2)} + \mu y_{r+1}, \quad r \geq 1$$

Teniendo en cuenta la ecuación (2.110) se obtiene

$$y_{2s+1} = 0, \quad s \geq 1$$

(2.112b)

$$y_{2s+2} = (n + \mu - s - 1/2)y_{2s} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{s-1} y_{2(s-i)} y_{2i}, \quad s \geq 1$$

Es de notar que los "momentos"-y de $H_n^{(\mu)}(x)$ dados por la ecuaciones (2.112a,b) se reducen a las correspondientes reglas de suma de los polinomios de Hermite clásicos (CAS80a) cuando $\mu = 0$.

E.- Polinomios de tipo Bessel

Consideremos los polinomios $R_n(a; z)$ definidos por

$$R_n(a; z) = \frac{(-1)^n}{(a+n)_n} y_n(-2z; a+1); \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

donde $a \neq -1, -2, \dots$ e $y_n(x; b)$ denotan a los polinomios de Bessel Generalizados anteriormente estudiados, es decir

$$y_n(x; b) = \sum_{k=0}^n 2^{-k} \binom{n}{k} (n+b-1)_k x^k$$

donde hemos utilizado el símbolo de Pochhammer. Entonces

$$R_n(a, z) = \frac{(-1)^n}{(a+n)_n} \sum_{k=0}^n (-n)_k (a+n)_k \frac{z^k}{k!}$$

Recientemente Hendriksen (HEN85) ha introducido un nuevo conjunto de polinomios $Q_n(z; a, \rho)$, $\rho \in \mathbb{C}$, definido por

$$Q_n(z; a, \rho) = R_n(a-1; z) + (-1)^{n-1} \rho \frac{(a)_{n-1}}{(n-1)!} z R_{n-1}(a+1; z)$$

con $n = 1, 2, \dots$. Es llamado sistema ortogonal de polinomios de tipo Bessel debido a que se pueden obtener del sistema clásico de polinomios ortogonales (KRA80) añadiendo una combinación lineal de como mucho dos funciones delta de Dirac a la función peso real del correspondiente sistema clásico. De hecho, los polinomios $Q_n(z; a, \rho)$ son ortogonales con respecto a la función peso $w(z) + \delta(z)$ donde $\delta(z)$ es la función delta de Dirac y $w(z)$ es la función peso real para los polinomios de Bessel generalizados $R_n(a-1; z)$.

Estos polinomios satisfacen la siguiente ecuación diferencial

$$\begin{aligned} (t_n z^3 + r_n z^2) Q_n''(z) + [at_n z^2 + (r_n(a+1) - t_n)z - r_n] Q_n'(z) - \\ - [n(a+n-1)t_n z + n(a+n-1)(r_n+1)] Q_n(z) = 0 \end{aligned}$$

donde

$$r_n = (-1)^{n-1} \frac{n!}{\rho (a)_{n-1}}$$

$$t_n = - [r_n(a-r_n-1) + n(a+n-1)]$$

Esta ecuación diferencial es de la forma (2.53)-(2.54) con los coeficientes

$$a_3^{(2)} = t_n, \quad a_2^{(2)} = r_n, \quad a_1^{(2)} = 0, \quad a_0^{(2)} = 0$$

$$a_2^{(1)} = at_n, \quad a_1^{(1)} = r_n(a+1) - t_n, \quad a_0^{(1)} = -r_n$$

$$a_1^{(0)} = -n(a+n-1)t_n, \quad a_0^{(0)} = -n(a+n-1)(r_n+1)$$

Puede verse que $q = 1$. Como $y_0 = n$ para cualquier polinomio $Q_n(x)$, solo queda

calcular y_1 por medio de las ecuaciones (2.60)-(2.62) y aplicar después la relación (2.55). De las ecuaciones (2.60)-(2.62) se obtiene

$$y_1 = \frac{n(t_n - r_n)}{(2n+a-2)t_n} + \frac{n(a+n-1)}{(2n+a-2)t_n}$$

El resto de los "momentos" vienen dados por la ecuación (2.55) que en este caso se simplifica a

$$y_2 = \frac{1}{(2n+a-3)} \left[y_1 - y_1^2 - r_n(n+a-1)/t_n \right]$$

y

$$y_{r+2} = \frac{1}{(2n-3-r+a)t_n} \left\{ -t_n \sum_{i=1}^{r+1} y_{r+2-i} y_i - r_n \sum_{i=1}^r y_{r+1-i} y_i + r_n y_r + (t_n - r_n (2n+a-r-1)) y_{r+1} \right\}$$

válida para $r = 1, 2, \dots$. Es importante notar que para $\xi = 0$, estas reglas de suma se reducen a las correspondientes cantidades de los polinomios de Bessel clásicos (GAL84) $y_n(-2z; a)$ como era de esperar.

APENDICE A.- Reglas de Suma de ceros $J_r^{(i)}$

En el método de determinación de la densidad de ceros de polinomios en función de los coeficientes de la ecuación diferencial ordinaria que satisfacen (también llamado Método IV), las reglas de suma $J_r^{(i)}$ y su relación con los "momentos" y_r juegan un papel central. Hasta hoy no se han obtenido las fórmulas de conexión generales (i.e. para todo r e i) entre estos dos tipos de reglas de suma de ceros. Sin embargo se conocen un gran número de resultados parciales, como son los siguientes (CAS80a, DEH85a, BUE85b)

$$J_r^{(i)} = 0, \quad 0 \leq r \leq i-2$$

$$J_r^{(2)} = (N-r/2)y_{r-1} + \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{r-2} y_{r-1-s} y_s$$

$$J_r^{(3)} = (N^2 - rN + \frac{r(r-1)}{3}) y_{r-2} + \sum_{t=2}^{r-2} (N-t) y_{t-1} y_{r-1-t} (1-\delta_{r,3})$$

$$+ \frac{1}{3} \sum_{s=3}^{r-2} \sum_{t=1}^{s-2} y_{r-1-s} y_{s-1-t} y_t (1-\delta_{r,3})(1-\delta_{r,4})$$

$$J_r^{(4)} = \frac{1}{4} \left\{ \left[(4N^3 - 6rN^2 + \langle 4[(r-1)(r-2)+2] + 6(r-2) \rangle N - r(r-1)(r-2)) \right] y_{r-3} \right.$$

$$+ \sum_{t=3}^{r-2} \left[6N^2 - 6(2t-1)N + \langle 4t(t-1) + 3(t-1)(r-t) \rangle \right] y_{r-1-t} y_{t-2} (1-\delta_{r,4})$$

$$+ \sum_{t=4}^{r-2} \sum_{s=2}^{t-2} (4N - 6s) y_{r-1-t} y_{t-1-s} y_{s-1} (1-\delta_{r,4})(1-\delta_{r,5})$$

$$+ \left. \sum_{t=5}^{r-2} \sum_{s=3}^{t-2} \sum_{u=1}^{s-2} y_{r-1-t} y_{t-1-s} y_{s-1-u} y_u (1-\delta_{r,4})(1-\delta_{r,5})(1-\delta_{r,6}) \right\} \quad (9)$$

$$\begin{aligned}
 J_r^{(5)} = \frac{1}{5} & \left\{ \left\langle 5N^4 - 10rN^3 + [10\{(r-2)(r-3)+4\} + 15(2r-5)] N^2 \right. \right. \\
 & \left. \left. - [5\{(r-1)(r-2)(r-3)+6\} + 10r(r-3)] N + r(r-1)(r-2)(r-3) \right\rangle y_{r-4} \right. \\
 & + \sum_{s=4}^{r-2} \left\langle 10N^3 - 30(s-1)N^2 + [15s(r-s) + 20\{(s-1)(s-2)+1\}] N \right. \\
 & \left. - [10r(s-2)(r-2s+1) + 15s(s-1)(s-2)] \right\rangle y_{r-1-s} y_{s-3} (1 - \delta_{r,5}) \\
 & + \sum_{s=5}^{r-2} \sum_{t=3}^{s-2} \left\langle 10N^2 - 10(t-2)N + [10t(t-1) \right. \\
 & \left. + 15(r-s)(s-t)] \right\rangle y_{r-1-s} y_{s-1-t} y_{t-2} \prod_{i=5}^6 (1 - \delta_{r,i}) \\
 & + \sum_{s=6}^{r-2} \sum_{t=4}^{s-2} \sum_{u=2}^{t-2} \langle 5N - 10u \rangle y_{r-1-s} y_{s-1-t} y_{t-1-u} y_{u-1} \prod_{i=5}^7 (1 - \delta_{r,i}) \\
 & \left. + \sum_{s=7}^{r-2} \sum_{t=5}^{s-2} \sum_{u=3}^{t-2} \sum_{v=1}^{u-2} y_{r-1-s} y_{s-1-t} y_{t-1-u} y_{u-1-v} y_v \prod_{i=5}^8 (1 - \delta_{r,i}) \right\}
 \end{aligned}$$

Además, también se sabe que (CAS80a, BUE85b)

$${}_i J_{i-1}^{(i)} = b_0^{(i)}$$

$${}_i J_i^{(i)} = b_1^{(i)} y_1$$

$${}_i J_{i+1}^{(i)} = [b_1^{(i)} - b_2^{(i)}] y_2 + b_2^{(i)} y_1^2$$

$${}_i J_{i+2}^{(i)} = (b_1^{(i)} - 2b_2^{(i)} + 2b_3^{(i)}) y_3 + (2b_2^{(i)} - 3b_3^{(i)}) y_1 y_2 + b_3^{(i)} y_1^3$$

$$\begin{aligned}
 {}_i J_{i+3}^{(i)} = & (b_1^{(i)} - 3b_2^{(i)} + 6b_3^{(i)} - 6b_4^{(i)}) y_4 + (2b_2^{(i)} - 6b_3^{(i)} + 8b_4^{(i)}) y_1 y_3 \\
 & + (b_2^{(i)} - 3b_3^{(i)} + 3b_4^{(i)}) y_2^2 + (3b_3^{(i)} - 6b_4^{(i)}) y_2 y_1^2 + b_4^{(i)} y_1^4
 \end{aligned}$$

donde hemos hecho uso de la notación

$$b_j^{(i)} = b_j^{(i)(N)} = \begin{cases} 0 & ; i < j \\ 1 & ; i = j \\ \binom{i}{j} \prod_{t=j}^{i-1} (N-t) & ; i > j \end{cases}$$

APENDICE B.- Derivación de la densidad de niveles regular

Aquí se detallará la obtención de la densidad de niveles regular (2.73) de los sistemas cuánticos a partir de la expresión general (2.69) cuando $b > 0$ y $\alpha = 0$, como se hace notar en la consecuencia B del teorema descrito en el apartado II.4.1. Reescribamos la ecuación (2.69) en la forma

$$(B.1) \quad \rho^*(E) = \frac{1}{\pi \alpha b} \epsilon^{\nu-1} (1 - \epsilon^2)^{1/2} {}_2F_1\left(\frac{1-\nu}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; 1 - \frac{1}{\epsilon^2}\right), \quad |\epsilon| < 1$$

Queremos calcular esta función en el límite $\alpha \rightarrow 0$. Para ello habremos de analizar en dicho límite la función hipergeométrica ${}_2F_1(c, 1/2; 3/2; z)$ con

$$(B.2) \quad c = \frac{1-\nu}{2} = 1 - \frac{1}{2\alpha} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} -\infty, \quad \text{y } |z| = \left|1 - 1/\epsilon^2\right| > 1$$

Obsérvese que el argumento z de esta función hipergeométrica es una cantidad negativa con módulo mayor que la unidad. Usando las relaciones de Kummer (ERD53, pag 63, fórmula 17), expresamos esta función hipergeométrica en términos de otra función hipergeométrica de argumento z^{-1} con módulo menor que la unidad. Se obtiene:

$$(B.3) \quad {}_2F_1\left(c, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; z\right) = \frac{1}{1-2c} (-z)^{-c} {}_2F_1\left(c, c - \frac{1}{2}; c + \frac{1}{2}; 1/z\right) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(c-1/2)}{\Gamma(c)} (-z)^{1/2}$$

Teniendo en cuenta (ABR64, pag 559, fórmula 15.3.3), esta expresión toma la forma

$${}_2F_1\left(c, c - \frac{1}{2}; c + \frac{1}{2}; 1/z\right) = \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{1-c} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, 1; c + \frac{1}{2}; 1/z\right)$$

Llevando esta expresión a (B.3), introduciendo este resultado en (B.1) y

teniendo en cuenta que la función ${}_2F_1\{1/2, 1; c+1/2; 1/z\}$ tiende a la unidad cuando $c \rightarrow -\infty$ (ABR64, pag 565, fórmula 15.7.1), resulta que

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^*(E; \alpha = 0) &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\pi b} \frac{(1 - \xi^2)^{-1/2}}{1 - \alpha} + \frac{\xi^{1/\alpha - 1}}{\alpha} \frac{\Gamma\{1/2 - 1/2\alpha\}}{\Gamma\{1 - 1/2\alpha\}} \\ &= \frac{1}{\pi b} (1 - \xi^2)^{-1/2} \end{aligned}$$

(ya que, al ser $|\xi| < 1$, el segundo sumando tiende claramente a cero) que es la función semicircular invertida o función regular que estábamos buscando.

BIBLIOGRAFIA

- (ABR64) M. Abramowitz y I.A. Stegun (editores). Handbook of Mathematical Functions (U.S. Government Printing Office, Washington D.C., 1964)
- (AKH76) N.I. Akhiezer, The Classical Moment Problem (Oliver and Boyd, Edimburgh, 1976)
- (AOM84) K. Aomoto, "Lax equations and the spectral density of Jacobi matrices for ortogonal polinomials". Nagoya Preprint 1984.
- (ARN76) L. Arnold, Linear Alg. Appl. 13(1976)185
- (BAN85) E. Bank y M.E.H. Ismail, Constr. Approx. 1(1985)103
- (BER80) G.F. Bertsch, L. Zamick y A. Mekjian, in Nuclear Structure, editado por G.F. Bertsch y D. Kurath (Springer, New York, 1980)
- (BER81) M.V. Berry, Annals of Phys. 131(1981)163
- (BES75) D. Bessis y M. Villani, J. Math. Phys. 16(1975)462
- (BOC29) S. Bochner, Math. Zeit. 29(1929)730
- (BOH69) A. Bohr y B. Mottelson, Nuclear Structure (Benjamin, New York, 1969) Apéndice 2C
- (BOH84) O. Bohigas. Ver su contribución a (DEH84a) donde se hace una puesta al día del método de matrices aleatorias y de sus logros.
- (BOS84) M.C. Boscá y J.S. Dehesa, J. Phys. A17(1984)3487
- (BRO64) B.V. Bronk, J. Math. Phys. 5(1964)215 y 164
- (BRO78) J.T. Broad, Phys. Rev A18(1978)1012
- (BRO81) T.A. Brody et al., Review of Modern Physics 53(1981)385
- (BRU77) P.J. Brussaard y P.W.M. Glaudemans, Shell Model Applications in Nuclear Spectroscopy (North Holland, Amsterdam, 1977)
- (BUE85a) E. Buendía, J.S. Dehesa y M.A. Sánchez-Buendía, J. Math. Phys. (1985). En prensa
- (BUE85b) E. Buendía, J.S. Dehesa, F.J. Gálvez y M.A. Sánchez-Buendía, J. Math. Phys. (enviado a publicación)
- (BUL80) D.W. Bullet, R. Haydock, V. Heine y M.J. Kelly, in Solid State Physics: Advances in Research and Applications, editado por F. Seitz et al. (Academic, New York, 1980)
- (BUR31) J. Burchnall y T.W. Chaundy, Proc. Roy. Soc. A134(1931)471
- (CAR83) M. Carmeli, Statistical Theory of Nuclear Levels and Random Matrices (Marcel Dekker, New York, 1983)
- (CAS80a) K.M. Case, J. Math. Phys. 21(1980)702
- (CAS80b) K.M. Case, J. Math. Phys. 21(1980)709

- (CAS80c) G. Casati, F. Valz-Gris y I. Guarneri, Lett. Nuovo Cimento 28(1980)279
- (CHI77) T.S. Chihara, An Introduction to Orthogonal Polynomials (Gordon and Breach, New York, 1977)
- (COS80) F. Costabile y W. Gautschi, Bol. Un. Mat. Ital.(5)17A(1980)516
- (CRA46) H. Cramer, Mathematical Methods of Statistics (Princeton Univ. Press: Princeton, 1946)
- (COW81) R.D. Cowan, The Theory of Atomic Structure and Spectra (Univ. of California Press, Berkeley, 1981)
- (CUL84) J. Cullum y R.A. Willoughby, Lanczos Algorithms for Large Symmetric Matrices (Birkhauser, Boston, 1984)
- (DAL80) B.J. Dalton et al (editores), Theory and Application of Moment Methods in Many-Fermion Systems. (Plenum, New York, 1980)
- (DAV75a) E.R. Davidson, J. Comp. Phys. 17(1975)87
- (DAV75b) P.J. Davis y P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration (Academic Press, New York, 1987)
- (DEH76) J.S. Dehesa, J. Comput. Appl. Math. 2(1976)249
- (DEH77a) J.S. Dehesa, Tesis Doctoral en Matemáticas (Univ. de Zaragoza, 1977)
- (DEH77b) J.S. Dehesa, J. Comput. Appl. Math. 3(1977)167
- (DEH78a) J.S. Dehesa, J. Comput. Appl. Math. 4(1978)275
- (DEH78b) J.S. Dehesa, J. Phys. A11(1978)L223
- (DEH78c) J.S. Dehesa, Lett. Nuovo Cimento 23(1978)301
- (DEH78d) J.S. Dehesa, Z. Angew. Math. Mech. 58(1978)T397
- (DEH80a) J.S. Dehesa, Linear Algebra Appl. 33(1980)41
- (DEH80b) J.S. Dehesa y A.M. Lallena, J. Phys. A13(1980)L265
- (DEH81a) J.S. Dehesa, J. Comput. Appl. Math. 7(1981)249
- (DEH81b) J.S. Dehesa, J. Phys. A14(1981)297
- (DEH82a) J.S. Dehesa, Lett. Nuovo Cimento 35(1982)25
- (DEH82b) J.S. Dehesa, J. Phys. A15(1982)327
- (DEH84a) J.S. Dehesa, J.M.G. Gómez y A. Polls (editores), Mathematical and Computational Methods in Nuclear Physics (Springer, Heidelberg, 1984)
- (DEH84b) J.S. Dehesa, Phys. Lett. 102A(1984)283
- (DEH85a) J.S. Dehesa, E. Buendía y M.A. Sánchez Buendía, J. Math. Phys. 26(1985)1547
- (DEH85b) J.S. Dehesa y F.J. Gálvez, Phys. Rev A32(1985)625
- (DOM81) B.G.S. Doman y J.K. Williams, Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. 90(1981)385
- (DOM85) F. Dominguez Adame, Tesina (Universidad de Granada) 1985

- (ERD53) A. Erdelyi et al., Tables of Integrals Transforms (McGraw-Hill, New York, 1953)
- (FRE84) J.B. French. Ver su contribución a (DEH84a) donde hace una revisión del método y de sus aplicaciones.
- (GAL84) F.J. Gálvez y J.S. Dehesa, J. Phys. A17(1984)2759
- (GAL85a) F.J. Gálvez y J.S. Dehesa, Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. 97(1985)159
- (GAL85b) F.J. Gálvez y J.S. Dehesa, J. Phys. A18(1985)2399
- (GAL85c) F.J. Gálvez y J.S. Dehesa, Phys. Lett. A (1985)
- (GAR72) J.B. Garg, Statistical Properties of Nuclei (Plenum, New York, 1980)
- (GAS70) J.P. Gaspard y F. Cyrot-Lackman, J. Phys. C6(1973)3077
- (GRA80) I.S. Gradshteyn y I.M. Ryzhik, Table of Integrals, Series and Products (Academic, New York, 1980)
- (GRO78) E. Grosswald, Bessel Polynomials (Springer, Berlin, 1978)
- (GUI58) E.A. Guillemin, Synthesis of Passive Networks (Wiley, New York, 1958)
- (HAN75) E.R. Hansen, A Table of Series and Products, (Prentice-Hall, Inc., Cliffs, N.J., 1975)
- (HAZ63) D. Hazony, Elements of Networks Synthesis, (Rheinhold, New York, 1963)
- (HEI78) N.E. Heine, Handbuch der Kugelfunctionen, I (Reiman, Berlin, 1878)
Veanse pag.294 y siguientes
- (HEN85) E. Hendriksen, Indagationes Math. (1985)
- (HOU64) A.S. Householder, The Theory of Matrices in Numerical Analysis (Blaisdell, New York, 1964)
- (ISM76) M.E.H. Ismail y D.H. Kelker, SIAM J. Math. Anal. 7(1976)82
- (JOH76) D.E. Johnson et al, IEEE Tans. Circ. Syst. CAS23(No.2)(1976)96
- (KEN69) M.G. Kendall y A. Stuart, The Advanced Theory of Statistics (Hafner, New York, 1969)
- (KRA40) H.L. Krall, On Orthogonal Polynomials satisfying fourth-order differential equations, Pennsylvania State College Studies No. 6 (Pennsylvania State College, State College, PA, 1940)
- (KRA49) H.L. Krall y O. Frink, Trans. Am. Math. Soc. 65(1949)100
- (KRA78) A.M. Krall y R.D. Morton, SIAM J. Math. Anal. 4(1978)604
- (KRA80) A.M. Krall, SIAM Rev. 22(1980)436
- (KRA81) A.M. Krall, Proc. Roy. Soc. Edimburg A87(1981)271
- (KRA83) A.M. Krall y L.L. Littlejohn, Lecture Notes in Math. 964(1983)435
- (LAN50) C. Lanczos, J. Res. Nat. Bur. Stand. 45(1950)255
- (LAV75) J.L. Lavoie, SIAM J. Appl. Math. 29(1975)511
- (LUC91) E. Lucas, Theorie des nombres (Gauthier-Villars, Paris, 1891)

- (MAC79) S.W. MacDonald y A.N. Kaufman, Phys. Rev. Lett. 42(1979)1189
- (MAK76) D.P. Maki, SIAM J. Math. Anal. 7(1976)29
- (MAN83) J.D. Mancini y D.C. Mattis, Phys. Rev. B28(1983)6061
- (MAR74) A.H. Marshak et al, IEEE Trans. Circ. Syst. CAS21(1974)797
- (MAT80) D.C. Mattis y R. Raghavan, Phys. Lett. 75A(1980)313
- (MAT81) D.C. Mattis, en Physics in One Dimension, editado por J. Bernasconi y T. Schneider (Springer, New York, 1981)
- (MEH67) M.L. Mehta, Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels (Academic, New York, 1967)
- (NEV79) P. Nevai y J.S. Dehesa, SIAM J. Math. Anal. 10(1979)1184
- (NIS73) H. Nissimov, Phys. Lett. 46B(1973)1
- (PAI72) C.C. Paige, J. Inst. Math. Appl. 10(1972)373
- (PAL79) J. Paldus, Lecture Notes in Physics 94(1979)51
- (PAR80) B.N. Parlett, The Symmetric Eigenvalue Problem (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1980)
- (PEC83) P. Pechukas, Phys. Rev. Lett. 51(1983)943
- (PET85) D.G. Pettifor y D.L. Weaire (editores), The Recursion Method, (Springer, Heidelberg, 1985)
- (POR65) C.E. Porter (editor), Statistical Theories of Spectra: Fluctuations (Academic, New York, 1965)
- (RAG72) I.V.V. Raghavacharyulu y A.R. Tekumalla, J. Math. Phys. 13(1972)321
- (REI79) W.P. Reinhardt, Comp. Phys. Comm. 17(1979)1
- (RIO58) J. Riordan, An Introduction to Combinatorial Analysis (Wiley, New York, 1958)
- (RIO68) J. Riordan, Combinatorial Identities (Wiley, New York, 1968)
- (SCH77) H.F. Schaeffer III (editor). Methods of Electronic Structure Theory (Plenum, New York, 1977). Ver especialmente las contribuciones de B.O. Roos, P.E.M. Seighbahn, R.H. Haussman y C.F. Bander
- (SEB69) T. Sebe y J. Nachamkin, Ann. Phys. 51(1969)100
- (SHO50) J.A. Shohat y J.D. Tamarkin, The Problem of Moments (AMS, Providence R.I., 1950). Segunda edición
- (SZE18) G. Szego, Math. Zeit. 1(1918)341
- (SZE75) G. Szego, Orthogonal Polynomials, Colloquium Publ. vol. XXIII, 4th. edition (American Math. Soc., Providence, R.I., 1975)
- (THO49) W.E. Thomson, Proc. Inst. Electron. Engrs. 96(1949)487
- (THO52) W.E. Thomson, Wireless Engrs. 29(1952)256
- (TOD75) M. Toda, Phys. Reports 18(1975)1
- (ULL83) N. Ullah, J. Phys. A16(1983)L767

- (WEI75) L. Weinberg, Network Analysis and Synthesis (McGraw-Hill, N.Y., 1975)
- (WIG55) E.P. Wigner, Ann. Math. 62(1955)548
- (WIG65) E.P. Wigner. Vease contribución a {POR65}
- (WIL62) H.S. Wilf, Mathematics for the Physical Sciences (Wiley, London, 1962)
- (WIL65) J.H. Wilkinson, The Algebraic Eigenvalue Problem (Oxford, Univ. Press, Oxford, 1965)
- (WIL81) J.K. Williams, J. Phys. C14(1981)4095
- (WHI77) R.R. Whitehead et al., Advances in Nucl. Phys. 9(1977)123
- (YAM75) H.A. Yamani y W.P. Reinhardt, Phys. Rev. A11(1975)1144
- (ZNO76) M. Znojil, J. Phys. A9(1976)1

III.- DETERMINACION DEL POTENCIAL Y ENERGIA ELECTROSTATICOS DEBIDOS A UNA DENSIDAD DE CARGA DE FERMI PARABOLICA.

La determinación de formas y tamaños nucleares es uno de los problemas tradicionales de la física nuclear (BAR79). Este problema conlleva el estudio de la distribución de carga nuclear por medio de procesos dominados por interacciones electromagnéticas y el estudio de la distribución de materia nuclear por medio de procesos de interacción fuerte. Combinando la información obtenida de esta forma puede llevarse a cabo la comparación de las distribuciones de protones y de neutrones.

La densidad de protones "puntuales" en un núcleo de Z protones viene dada por

$$\rho_p(\vec{r}) = \frac{1}{Z} \langle 0 | \sum_{i=1}^Z \delta(\vec{r}-\vec{r}_i) | 0 \rangle$$

donde $|0\rangle$ denota el estado fundamental nuclear. Puesto que el protón no es una carga puntual sino que tiene un tamaño finito en el sentido electromagnético, la densidad de carga nuclear puede obtenerse a partir de $\rho_p(\vec{r})$ "foldeando" con la densidad de carga del protón, o sea

$$\rho(\vec{r}) = \int \rho_p(\vec{r}') \rho_d(|\vec{r}-\vec{r}'|) d\vec{r}'$$

donde ρ_d representa la densidad de carga del proton también normalizada a la unidad.

La función densidad $\rho(\vec{r})$ puede parametrizarse de diversas formas (HAH56, DEJ74, BAR79). La parametrización involucra la elección de una forma funcional apropiada con parámetros que pueden variarse a fin de ajustar ciertos datos experimentales, e.g. los valores de la sección eficaz diferencial de difusión de electrones. La forma funcional más usada es seguramente (al menos para $A > 20$) la distribución de Fermi parabólica

$$(3.1) \quad \rho(\vec{r}) = \rho_0 \frac{1+wr^2/R^2}{1+e^{(r-R)/a}}$$

donde R es el radio nuclear definido como la distancia a la cual la densidad es igual a $\rho_0/2$, obteniéndose la constante ρ_0 por la condición de normalización

$$(3.2) \quad \int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = Z$$

Unidades atómicas, $\hbar = e = m = 1$, se usarán en todo el capítulo. Con el valor $R \approx (1.18A^{1/3} - 0.48)\text{fm}$ se obtiene aparentemente el mejor ajuste de los datos experimentales de dispersión de electrones. El parámetro de difusividad "a" está relacionado con el parámetro de anchura t de la superficie nuclear en la forma $t \approx 4.40a$, que corresponde a la distancia en la que la densidad cambia del 10% al 90% de su valor central. Este parámetro t crece desde $t \approx 2.0\text{fm}$ para núcleos con $A \sim 10$ hasta $t \approx 2.5\text{fm}$ para $A \sim 200$ (SCH67), (HOR75), distancia que es comparable al radio nuclear para núcleos ligeros y es el 30% del radio nuclear para núcleos muy pesados. De aquí que, especialmente en núcleos ligeros, cabe esperar que ciertas magnitudes nucleares de interés físico (y en particular el potencial y energía coulombianos) tengan una dependencia sustancial del parámetro de difusividad.

El parámetro "parabólico" w es una constante positiva o negativa que puede dar lugar a una elevación o una depresión central de la densidad. Sus valores varían entre -0.3 y 0.6 (SCH67), (DEJ74). Mencionemos en particular que en (HEI69) se pone en evidencia la necesidad de una depresión central en la densidad de alrededor del 7% de la densidad máxima, o sea $1 - \rho_0/\rho_{\text{max}} \approx 0.07$, para poder explicar los datos de dispersión de electrones de 248 y 502 MeV por ^{208}Pb . Tal depresión ha sido obtenida con el modelo hidrodinámico de tres fluidos (MOH69). Sin embargo existe un fuerte desacuerdo con cálculos del modelo de capas en lo que al valor relativo de la densidad en la región central se refiere (FRI75). Ello puede quizás deberse a la no consideración en tales cálculos teóricos de posibles efectos no-locales en los potenciales de modelo de capas, ya que es sabido que tales efectos hacen disminuir la densidad central y aumentar la densidad en la superficie.

Por otra parte, existe una familia de núcleos llamados núcleos burbuja (buble nuclei), tales como e.g. Ar-36, Se-68, Se-84, Sn-100, Ca-116, Ce-138 y Hg-200, que pudieran tener una densidad de carga con una fuerte depresión central. Entre los distintos cálculos microscópicos existentes sobre estos núcleos (BEI73, CAM73, KRI73, DAV73), mencionemos que en algunos casos (e.g.

Ar-36, Ce-138 y Hg-200) se obtiene un valor Hartree-Fock de la densidad central de aproximadamente la mitad de la densidad máxima (DAV73). Todo ello hace pensar de que, al menos para ciertos núcleos, debe existir una contribución apreciable de la corrección parabólica o corrección-w en ciertas magnitudes de interés físico. Señalemos finalmente que la temperatura aumenta la depresión central de la densidad nuclear (y por tanto su parámetro w) así como su difusividad (MAR83).

En este capítulo se determinan analíticamente el potencial (ver Sección III.1) y la energía electrostática (ver Sección III.2) de un sistema físico (e.g. un núcleo) cuya densidad de carga puede parametrizarse mediante una función de distribución de Fermi parabólica (3.1). La conveniencia de disponer de una fórmula analítica exacta para las energías coulombianas nucleares asociadas con densidades de carga del tipo (3.1) y su importancia práctica en el tratamiento macroscópico de propiedades nucleares y particularmente en el desarrollo de fórmulas semiempíricas de masa ha sido señalado por varios autores (HAH56, HOF63, MYE66, MYE69, HOR75, DAV76, MYE77) y enfatizado por Myers y Swiatecki (MYE69). De hecho, estos dos autores encuentran expresiones aproximadas a la energía electrostática nuclear hasta tercer orden en el parámetro a/R , ajustando de forma empírica algunos de los coeficientes del correspondiente desarrollo. En este capítulo se encuentra de forma cerrada y exacta para todos los órdenes de los parámetros de difusividad a y parabólico w una expresión analítica de la energía coulombiana nuclear. A continuación se estudia la dependencia del potencial y energía coulombianos de los dos parámetros citados, ilustrándose tal dependencia en varios núcleos concretos.

El potencial y energía electrostáticos debidos a una densidad de carga $\rho(r)$ vienen dados por (REI79)

$$(3.3) \quad \phi(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}') d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$(3.4) \quad E_c = \frac{1}{2} \int \rho(\vec{r}) \phi(\vec{r}) d\vec{r}$$

respectivamente. Para una distribución $\rho(\vec{r})$ esféricamente simétrica y

teniendo en cuenta el desarrollo de $|\vec{r}-\vec{r}'|^{-1}$ en armónicos esféricos, o sea

$$(3.5) \quad \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{1}{2l+1} Y_{lm}(\hat{r}) Y_{lm}^*(\hat{r}') \frac{r_{<}}{r_{>}^{l+1}}$$

($r_{>}$ y $r_{<}$ son el máximo y el mínimo de los valores de r y r' , respectivamente) se obtiene la expresión

$$(3.6) \quad \phi(\vec{r}) = \phi(r) = 4\pi \int_0^{\infty} \frac{r'^2 \rho(r') dr'}{r_{>}}$$

Por conveniencia escribiremos la densidad (3.1) en la forma

$$(3.7) \quad \rho(r) = \rho_1(r) + \rho_2(r)$$

con

$$(3.8) \quad \rho_1(r) = \frac{\rho_0}{1+e^{(r-R)/a}}$$

$$(3.9) \quad \rho_2(r) = \frac{\rho_0 q r^2}{1+e^{(r-R)/a}} \quad \text{donde } q = w/R^2$$

Entonces el potencial coulombiano nuclear (3.6) es

$$(3.10) \quad \phi(r) = \phi_1(r) + \phi_2(r)$$

con

$$(3.11) \quad \phi_1(r) = 4\pi \int_0^{\infty} \frac{r'^2 \rho_1(r')}{r_{>}} dr'$$

$$(3.12) \quad \phi_2(r) = 4\pi \int_0^{\infty} \frac{r'^2 \rho_2(r')}{r_{>}} dr'$$

Estas funciones son calculadas explícitamente en la Sección III.1, y con ello se encuentra de forma cerrada y exacta el potencial coulombiano de un núcleo

finito arbitrario. Además se ilustra tal expresión en varios núcleos esféricos específicos. En esta sección se obtienen asimismo los valores de ρ_0 y del radio cuadrático medio de la densidad de Fermi parabólica (3.1).

La energía coulombiana nuclear (3.4) puede entonces representarse en la forma

$$(3.13) \quad E_c = E_1 + E_{1,2} + E_2$$

donde

$$(3.14) \quad E_i = 2\pi \int_0^\infty r^2 \rho_i(r) \psi_i(r) dr \quad \text{para } i = 1 \text{ y } 2$$

$$(3.15) \quad E_{1,2} = 2\pi \int_0^\infty r^2 \left[\rho_1(r) \phi_2(r) + \rho_2(r) \phi_1(r) \right] dr$$

Los valores exactos de estas integrales son obtenidos analíticamente de forma cerrada en la sección III.2. La correspondiente expresión analítica de E_c es discutida detallada y físicamente e ilustrada en varios núcleos concretos.

III.1.- POTENCIAL ELECTROSTATICO NUCLEAR

Aquí calcularemos explícitamente las componentes $\phi_1(r)$ y $\phi_2(r)$ del potencial coulombiano nuclear (3.10). Trabajemos primeramente con $\phi_1(r)$. Según (3.11) podemos escribir

$$(3.16) \quad \begin{aligned} \phi_1(r) &= 4\pi\rho_0 \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r \frac{r'^2}{1+e^{(r'-R)/a}} dr' + \int_r^\infty \frac{r'}{1+e^{(r'-R)/a}} dr' \right\} \\ &= 4\pi\rho_0 \left\{ \frac{1}{r} \int_0^\infty \frac{r'^2}{1+e^{(r'-R)/a}} dr' + \int_r^\infty \left(r' - \frac{r'^2}{r} \right) \frac{dr'}{1+e^{(r'-R)/a}} \right\} \\ &= 4\pi\rho_0 \left[\frac{1}{r} G_1 + G_2 \right] \end{aligned}$$

La integral G_1 es igual a la integral denotada como $I_{1,2}$ en el Apéndice A, siendo su valor

$$(3.17) \quad G_1 = I_{1,2} = \frac{1}{3} R^3 + \frac{1}{3} r^2 a^2 R - 2a^3 \beta_3(R/a)$$

donde hemos usado la notación (ver Apéndice C) $\beta_k(x)$ que denotan el polilogaritmo de orden k o k -logaritmo de x . Estas funciones polilogarítmicas son perfectamente conocidas (LEW81).

Para el cálculo de G_2 hemos de tener en cuenta si r es mayor o menor que R para poder desarrollar la función $[1 + \exp((r-R)/a)]^{-1}$ en potencias de $e^{-r'}$ haciendo los cambios pertinentes. Haciendo el cambio $r'-r = t$ se tiene que

$$G_2 = - \int_0^\infty (t + t^2/r) \frac{dt}{1 + e^{(r-R)/a} e^{t/a}}$$

Cuando $r \gg R$,

$$(3.18) \quad \frac{1}{1 + e^{(r-R)/a} e^{t/a}} = \frac{e^{-t/a}}{e^{(r-R)/a} (1 + e^{(R-r)/a} e^{-t/a})} =$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{e^{-(k+1)t/a}}{e^{(k+1)(r-R)/a}}$$

donde hemos desarrollado en serie de potencias de $e^{-t/a}$. Utilizando este artificio ya es directo el cálculo de G_2 para $r \gg R$. Y procediendo de forma análoga se obtiene el correspondiente valor para $r \leq R$. Se obtiene entonces para la integral G_2 el valor

$$(3.19) \quad G_2 = \begin{cases} a^2 \left[\beta_2((r-R)/a) + \frac{2a}{r} \beta_3((r-R)/a) \right], & \text{si } r \gg R \\ R^2/2 - r^2/6 - R^3/3r + r^2 a^2 (1-2R/r)/6 + \\ + \frac{2a^3}{r} \beta_3((R-r)/a) - a^2 \beta_2((R-r)/a), & \text{si } r \leq R \end{cases}$$

donde usamos abundantemente los di- y trilogaritmos definidos en el Apéndice C.

Combinando las expresiones (3.16), (3.17) y (3.19) obtenemos la primera componente $\phi_1(r)$ del potencial coulombiano nuclear:

$$(3.20) \quad \frac{\phi_1(r)}{4\pi g_0} = \frac{1}{r} G_1 + G_2 = \frac{1}{r} \left[\frac{R^3}{3} + \frac{1}{3} \pi^2 a^2 R - e a^3 \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) \right] +$$

$$+ \begin{cases} \frac{R^2}{2} - \frac{r^2}{6} - \frac{R^3}{3r} + \frac{\pi^2 a^2}{6} \left(1 - \frac{eR}{r} \right) + \\ + \frac{e a^3}{r} \beta_3 \left(\frac{R-r}{a} \right) - a^2 \beta_2 \left(\frac{R-r}{a} \right) & ; \quad \text{si } r \leq R \\ - a^2 \beta_2 \left(\frac{r-R}{a} \right) + \frac{e a^3}{r} \beta_3 \left(\frac{r-R}{a} \right) & ; \quad \text{si } r \geq R \end{cases}$$

Hallemos a continuación la segunda componente $\phi_2(r)$. De las ecuaciones (3.9) y (3.12) se tiene que $\phi_2(r)$ puede escribirse en la forma

$$\phi_2(r) = 4\pi g_0 q \int_0^\infty \frac{r'^4 dr'}{r^2 (1 + e^{\frac{r'-R}{a}})}$$

$$= 4\pi g_0 q \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r \frac{r'^4 dr'}{1 + e^{\frac{r'-R}{a}}} + \int_r^\infty \frac{r'^3 dr'}{1 + e^{\frac{r'-R}{a}}} \right\}$$

$$= 4\pi g_0 q \left\{ \frac{1}{r} \int_0^\infty \frac{r'^4 dr'}{1 + e^{\frac{r'-R}{a}}} + \int_r^\infty \left(r'^3 - \frac{r'^4}{r} \right) \frac{dr'}{1 + e^{\frac{r'-R}{a}}} \right\}$$

$$(3.21) \quad = 4\pi g_0 q \left\{ \frac{1}{r} G_3 + G_4 \right\}$$

La función integral G_3 es la integral $I_{1,4}$ considerada en el Apéndice A, cuyo valor es

$$(3.22) \quad G_3 = \frac{R^5}{5} + \frac{2}{3} \pi^2 a^2 R^3 + \frac{7}{15} \pi^4 a^4 - 24a^5 \beta_5(R/a)$$

Para calcular G_4 hemos de distinguir, como en el caso de G_2 , los dos casos $r \gg R$ y $r \leq R$ a fin de poder usar un artificio similar al (3.18) y encontrar así integrales conocidas. Se obtiene que

$$(3.23) \quad G_4 = \begin{cases} a^2 r^2 \beta_2(z) + 6a^3 r \beta_3(z) + 18a^4 \beta_4(z) + \frac{24a^5}{r} \beta_5(z), & r \gg R \\ \frac{R^4}{4} - \frac{R^5}{5r} - \frac{r^4}{20} + \frac{\pi^2 a^2 R^2}{2} + \frac{7\pi^4 a^4}{60} - \frac{1}{r} \left[\frac{2\pi^2 a^2 R^3}{3} + \frac{7\pi^4 a^4 R}{15} \right] \\ - a^2 r^2 \beta_2(z) + 6a^3 r \beta_3(z) - 18a^4 \beta_4(z) + \frac{24a^5}{r} \beta_5(z), & r \leq R \end{cases}$$

donde $z = |(r-R)/a|$.

La combinación de (3.21)-(3.23) produce directamente la segunda componente ϕ_2 del potencial coulombiano:

$$\frac{\phi_2(r)}{4\pi\epsilon_0 q} = \frac{1}{r} \left[\frac{R^5}{5} + \frac{2}{3} \pi^2 a^2 R^3 + \frac{7}{15} \pi^4 a^4 - 24a^5 \beta_5\left(\frac{R}{a}\right) \right] +$$

$$+ \begin{cases} \frac{R^4}{4} - \frac{R^5}{5r} - \frac{r^4}{20} + \frac{\pi^2 a^2 R^2}{2} + \frac{7\pi^4 a^4}{60} - \frac{1}{r} \left[\frac{2\pi^2 a^2 R^3}{3} + \frac{7\pi^4 a^4 R}{15} \right] \\ - a^2 r^2 \beta_2(z) + 6a^3 r \beta_3(z) - 18a^4 \beta_4(z) + \frac{24a^5}{r} \beta_5(z), & r \leq R \\ a^2 r^2 \beta_2(z) + 6a^3 r \beta_3(z) + 18a^4 \beta_4(z) + \frac{24a^5}{r} \beta_5(z), & r \gg R \end{cases}$$

Finalmente, la suma aritmética de los valores (3.20) y (3.24) de ϕ_1 y ϕ_2 respectivamente, y la ec. (3.29a) conduce, según (3.10) a la siguiente

expresión

$$(3.25) \quad \phi(r) = \frac{Z}{r} +$$

$$+ \left\{ \begin{aligned} & 4\pi\rho_0 \left\{ \frac{R^2}{2} - \frac{r^2}{6} - \frac{R^3}{3r} + \frac{\pi^2 a^2}{6} \left(1 - \frac{2R}{r} \right) + w \left[\frac{R^2}{4} - \frac{R^3}{5r} - \frac{r^4}{20R^2} + \frac{\pi^2 a^2}{2} + \right. \right. \\ & \quad + \frac{7\pi^4 a^4}{60R^2} - \frac{1}{r} \left[\frac{2\pi^2 a^2 R}{3} + \frac{7\pi^4 a^4}{15R} \right] \left. \right\} + \frac{2a^3}{r} \beta_3 \left(\frac{R-r}{a} \right) - \\ & \quad - a^2 \beta_2 \left(\frac{R-r}{a} \right) + w \left[-a^2 \frac{r^2}{R^2} \beta_2 \left(\frac{R-r}{a} \right) + 6a^3 \frac{r}{R^2} \beta_3 \left(\frac{R-r}{a} \right) - \right. \\ & \quad \left. - \frac{18a^4}{R^2} \beta_4 \left(\frac{R-r}{a} \right) + \frac{24a^5}{rR^2} \beta_5 \left(\frac{R-r}{a} \right) \right\} \quad , \quad \text{si } r \in R \\ \\ & 4\pi\rho_0 \left\{ a^2 \beta_2 \left(\frac{r-R}{a} \right) + \frac{2a^3}{r} \beta_3 \left(\frac{r-R}{a} \right) + \right. \\ & \quad + w \left[a^2 \frac{r^2}{R^2} \beta_2 \left(\frac{r-R}{a} \right) + 6a^3 \frac{r}{R^2} \beta_3 \left(\frac{r-R}{a} \right) + \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{18a^4}{R^2} \beta_4 \left(\frac{r-R}{a} \right) + \frac{24a^5}{rR^2} \beta_5 \left(\frac{r-R}{a} \right) \right] \right\} \quad , \quad \text{si } r \geq R \end{aligned} \right.$$

que nos da el valor exacto del potencial coulombiano de un núcleo finito en términos del radio nuclear R y de los parámetros de difusividad a y parabólico w de su densidad de carga. Obsérvese que el potencial coulombiano tiene términos debidos a la contribución de la superficie nuclear difusa que son proporcionales al cuadrado del parámetro de difusividad. Además, el potencial tiene, como debe ser, un valor finito en el origen y se anula para valores infinitamente lejanos. En efecto haciendo $r \rightarrow 0$ en (3.25) se obtiene

$$(3.26) \quad \phi(0) = 4\pi\rho_0 \left[\frac{R^2}{2} + \frac{2a^2}{6} + a^2 \beta_2(R/a) + \right. \\ \left. w \left[\frac{R^2}{4} + \frac{\pi^2 a^2}{2} + \frac{7\pi^4 a^4}{60R^2} + 6a^4 \beta_4(R/a)/R^2 \right] \right]$$

y para grandes valores de r , el potencial $\phi(r)$ se comporta como

$$(3.27) \quad \phi(r) \sim \frac{Z}{r} + e^{-r/a} \sum_{i=-1}^2 A_i r^i$$

donde los coeficientes A_i son constantes que dependen de Z , a y R . Nótese que además del término dominante, que es un potencial culombiano puro, aparecen términos de la forma $r^k e^{-r/a}$ con $k=-1, 0, 1$ y 2 . La suma de estos últimos términos da lugar a un potencial que tiene una forma muy similar al usado en el estudio de masas nucleares y alturas de barreras de fisión (KRA79)

Por otra parte, en el punto $r = R$ el potencial culombiano (3.25) toma el valor

$$(3.28) \quad \phi(R) = 4\pi\rho_0 \left\{ \frac{R^2}{3} + \frac{\pi^2 a^2}{4} + \frac{2a^3}{R} (\gamma_3 - \beta_3(R/a)) \right. \\ \left. + w \left[\frac{R^2}{5} + \frac{7\pi^2 a^2}{12} + \frac{7\pi^4 a^4}{24R^2} + \frac{6a^3}{R} \gamma_3 + \frac{24a^5}{R^3} (\gamma_5 - \beta_5(R/a)) \right] \right\}$$

donde el símbolo γ_i define unas sumas infinitas perfectamente conocidas que son iguales a la función zeta de Riemann $\zeta(i)$ salvo un factor numérico (véase a este respecto el Apéndice C).

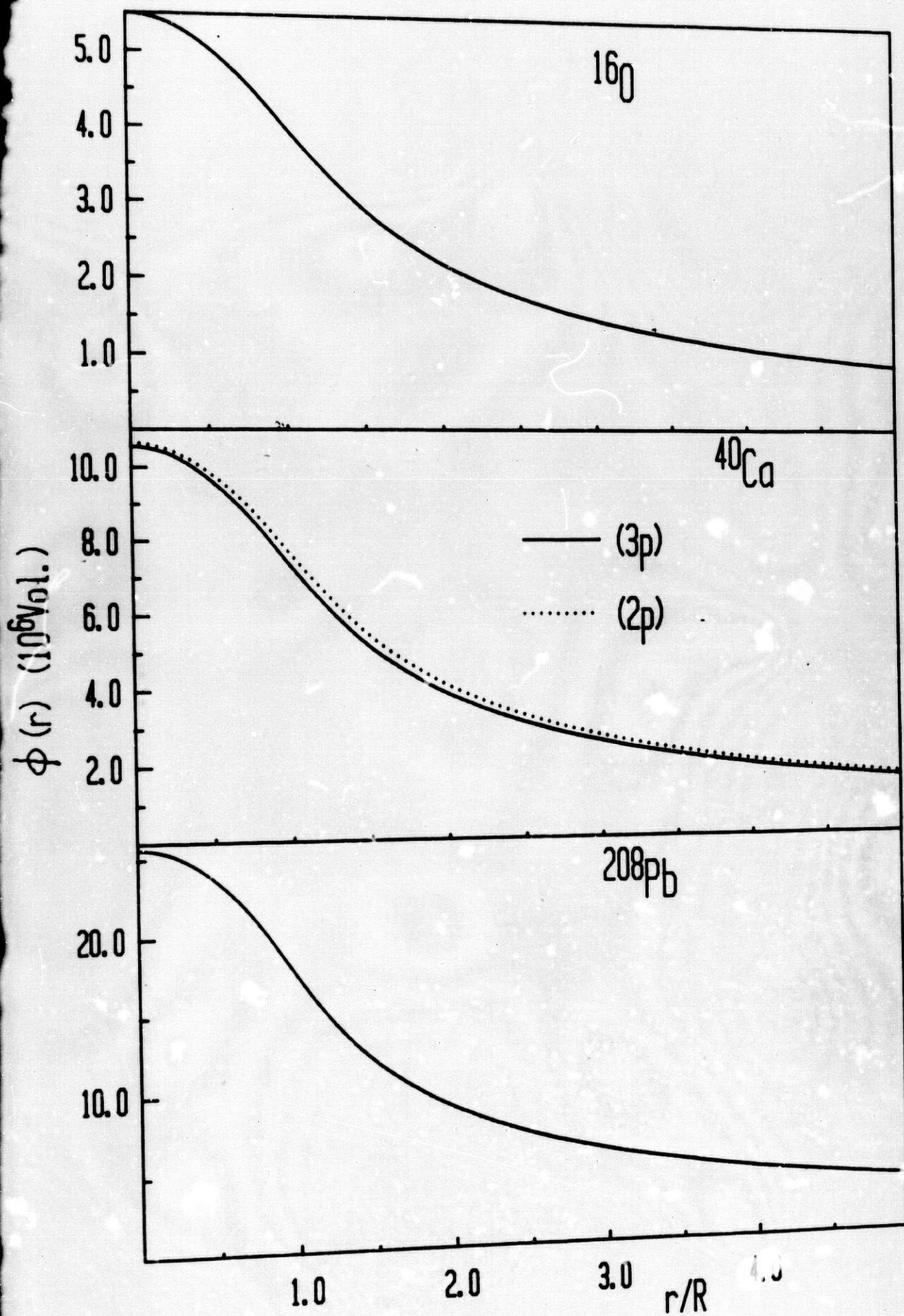
De igual forma puede comprobarse que haciendo $a = 0$ y $w = 0$ la expresión (3.25) se reduce a

$$\phi(r) = \begin{cases} Z/r & \text{si } r \geq R \\ \frac{3Z}{2R} \left(1 - \frac{r^2}{3R^2} \right) & \text{si } r \leq R \end{cases}$$

que corresponde al potencial culombiano de una distribución de carga uniforme de radio R (REI79).

En la figura (3.1) se representa gráficamente el potencial culombiano de varios núcleos esféricos. El potencial se expresa en unidades de 10^6 Voltios

Figura III.1.- Potencial coulombiano $\phi(r)$ para los núcleos ^{16}O , ^{40}Ca y ^{208}Pb . Se ha usado una densidad de carga de Fermi biparamétrica (2p) en ^{40}Ca y ^{208}Pb y triparamétrica (3p) en ^{16}O y ^{40}Ca . Los correspondientes parámetros a , R y w de la densidad han sido tomados de (DEJ74) y se muestran en la tabla III.1.



y la distancia radial r en unidades de R . Los parámetros a , w y R de la densidad de carga usados están en la Tabla III.1 y han sido tomados de (DEJ74). En particular, nótese en el caso del ^{40}Ca la diferencia del potencial según que la densidad de carga venga dada por una densidad bi- ó triparamétrica.

Por completitud, calculamos a continuación el valor ρ_0 y el radio cuadrático medio $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ de la densidad de carga de Fermi parabólica (3.1). La condición de normalización (3.2) nos dice que

$$(3.29a) \quad Z = 4\pi\rho_0 \int_0^\infty \frac{r^2(1+wr^2/R^2)}{1+e^{(r-R)/a}} dr = 4\pi\rho_0 \left(I_{1,2} + \frac{w}{R^2} I_{1,4} \right)$$

donde $I_{1,i}$, $i=2,4$ son integrales del tipo Krivine-Treiner discutidas y tabuladas en el Apéndice A. Teniendo en cuenta los valores de esta integrales se obtiene

$$(3.29b) \quad \rho_0 = \frac{3Z}{4\pi R^3} \left\{ 1 + \frac{\pi^2 a^2}{R^2} - 6 \frac{a^3}{R^3} \beta_3(R/a) + \right. \\ \left. + w \left[\frac{3}{5} + 2 \frac{\pi^2 a^2}{R^2} + \frac{7\pi^4 a^4}{5R^4} - \frac{72a^5}{R^5} \beta_5(R/a) \right] \right\}^{-1}$$

De igual forma puede verse que el radio cuadrático medio $\langle r^2 \rangle$ de la función densidad (3.1) es igual a

$$(3.30) \quad \langle r^2 \rangle = \frac{\int r^2 \rho(\vec{r}) d\vec{r}}{\int \rho(\vec{r}) d\vec{r}} = \frac{I_{1,4} + w/R^2 I_{1,6}}{I_{1,2} + w/R^2 I_{1,4}}$$

Nuevamente, tomando del Apéndice A los valores de las integrales $I_{1,i}$, $i=2,4,6$, se obtiene

$$(3.31a) \quad \langle r^2 \rangle = \frac{C_1(a,R)}{C_2(a,R)}$$

donde

$$C_1(a,R) = \frac{R^5}{5} + \frac{2\pi^2 a^2 R^3}{3} + \frac{7}{15} \pi^4 a^4 R - 24 a^5 \beta_5 \left(\frac{R}{a}\right) +$$

$$+ w \left[\frac{R^5}{7} + \pi^2 a^2 R^3 + \frac{7}{3} \pi^4 a^4 R + \frac{93}{56} \frac{\pi^6 a^6}{R} - \frac{720 a^7}{R^2} \beta_7 \left(\frac{R}{a}\right) \right]$$

(3.31b)

$$C_2(a,R) = \frac{R^3}{3} + \frac{\pi^2 a^2 R}{3} - 2 a^3 \beta_3 \left(\frac{R}{a}\right) +$$

$$+ w \left[\frac{R^3}{5} + \frac{2\pi^2 a^2 R}{3} + \frac{7}{15} \frac{\pi^4 a^4}{R} - \frac{24 a^5}{R^2} \beta_5 \left(\frac{R}{a}\right) \right]$$

Nótese que cuando $a=w=0$, o sea para una densidad uniforme, las expresiones (3.29) y (3.31) nos suministran los valores conocidos

$$(3.32) \quad \rho_0 = \frac{3Z}{4\pi} R^3 \quad \text{y} \quad \langle r^2 \rangle = \frac{3}{5} R^2$$

como cabría esperar. De otra parte, cuando $w=0$ la expresión (3.31) nos suministra el valor conocido (BOH69, JAN72)

$$(3.33) \quad \langle r^2 \rangle = \frac{3}{5} R^2 \left[1 + \frac{7\pi^2}{3} \left(\frac{a}{R}\right)^2 + O\left(\frac{a}{R}\right)^4 \right]$$

del radio cuadrático medio de una densidad de Fermi biparamétrica convencional. Señalemos finalmente que la expresión (3.31) puede escribirse en la forma de un desarrollo de potencias de a/R

$$(3.34) \quad \langle r^2 \rangle = \frac{3}{5} R^2 \left\{ \frac{1 + \frac{5}{7} w}{1 + \frac{3}{5} w} + \frac{\pi^2}{\left(1 + \frac{3}{5} w\right)^2} \left[\frac{7}{3} + \frac{30w}{7} + \frac{11}{7} w^2 \right] \left(\frac{a}{R}\right)^2 \right.$$

$$+ \frac{6 \beta_3 (R/a)}{\left(1 + \frac{3}{5} w\right)^2} \left(1 + \frac{5}{7} w\right) \left(\frac{a}{R}\right)^3 +$$

$$+ \frac{17}{5} \frac{w \pi^4}{\left(1 + \frac{3}{5} w\right)^3} \left(1 + \frac{5}{17} w - \frac{9}{17} w^2\right) \left(\frac{a}{R}\right)^4 +$$

$$\left. + O\left(\left(\frac{a}{R}\right)^5\right) \right\}$$

III.2.- ENERGIA ELECTROSTATICA NUCLEAR

Aquí calcularemos explícitamente las componentes E_1 , E_2 y $E_{1,2}$ definidas por (3.14) y (3.15) respectivamente de la energía electrostática de un núcleo finito dada por (3.4) y (3.13) en términos de los parámetros R , a y w de su densidad de carga parametrizada en su forma funcional (3.1). Trabajemos en primer lugar con la componente E_1 definida por (3.14):

$$(3.35) \quad E_1 = 2\pi \int_0^\infty r^2 \rho_1(r) \phi_1(r) dr$$

donde $\rho_1(r)$ y $\phi_1(r)$ vienen dados por las expresiones (3.8) y (3.20) respectivamente. Llevando estas expresiones a (3.35), se obtiene que

$$(3.36) \quad \frac{E_1}{8\pi^2 \rho_0^2} = \int_0^R \frac{r^2}{1+e^{(r-R)/a}} \left\{ \frac{I_{1,2}}{r} + \frac{R^2}{2} + \frac{\pi^2 a^2}{6} - \frac{1}{r} \left[\frac{R^3}{3} + \frac{\pi^2 a^2 R}{3} \right] - r^2/6 - a^2 \sum_{k=1}^\infty (-1)^k e^{k(r-R)/a} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{2a}{rk^3} \right) \right\} + \int_R^\infty \frac{r^2}{1+e^{(r-R)/a}} \left\{ \frac{I_{1,2}}{r} + a^2 \sum_{k=1}^\infty (-1)^k e^{k(R-r)/a} \left(\frac{1}{k^2} + \frac{2a}{rk^3} \right) \right\}$$

donde los símbolos $I_{1,2}$ y $\beta_k(x)$ son ya conocidos y están detallados y tabulados en el Apéndice A y C respectivamente. Operando adecuadamente se obtiene

$$(3.37) \quad \frac{E_1}{8\pi^2 \rho_0^2} = I_{1,1} I_{1,2} + (R^2/2 + \pi^2 a^2/6) J_{3,2} - (R^3/3 + \pi^2 a^2 R/3) J_{3,1} - J_{3,4}/6 - a^2 \sum_{k=1}^\infty (-1)^k e^{-kR/a} \left[\frac{J_{2,2}}{k^2} - 2a \frac{J_{2,1}}{k^3} \right] + a^2 \sum_{k=1}^\infty (-1)^k e^{kR/a} \left[\frac{J_{1,2}}{k^2} + \frac{2a}{k^3} J_{1,1} \right]$$

donde las $J_{i,n}$ con $i=1,2,3$ y $n=1,2,3,4,5,6,8$ están estudiadas y tabuladas en

el Apéndice B. Sustituyendo sus valores aquí resulta que

$$(3.38) \quad E_1 = 8\pi^2 g_0^4 \left\{ \frac{e R^5}{15} + \frac{\pi^2 a^2 R^3}{9} + a^3 R^2 \left[\frac{\pi^2 \ell u^2}{6} - e f_3 + 2\delta_{2,3} - \right. \right. \\ \left. \left. - e \beta_3(R/a) \right] - \frac{\pi^4}{45} a^4 R + a^5 \left[\frac{\pi^2}{3} f_3 - 8 \gamma_5 + 4\delta_{2,3} + \right. \right. \\ \left. \left. + 4\delta_{3,2} - e \left(\frac{\pi^2}{3} + \beta_2(R/a) \right) \beta_3(R/a) + e \gamma_{2,3}(R/a) + e \gamma_{3,2}(R/a) \right] \right\}$$

donde los nuevos símbolos $\delta_{i,j}$ y $\gamma_{i,j}$ denotan las series doble definidas en el Apéndice C junto con las conocidas notaciones $\beta_k(x)$ y γ_i .

A continuación calcularemos la segunda componente E_2 definida en (3.14)

$$(3.39) \quad E_2 = 2\pi \int_0^\infty r^2 g_2(r) \phi_2(r) dr$$

donde $g_2(r)$ y $\phi_2(r)$ vienen dadas por las expresiones (3.9) y (3.24) respectivamente. Llevando estos dos valores a (3.39) se tiene

$$\frac{E_2}{8\pi^2 g_0^2 q^2} = \int_0^R \frac{r^4}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} \left[\frac{J_{3,4}}{r} + \frac{R^4}{4} + \frac{\pi^2 a^2}{2} + \frac{7\pi^4 a^4}{60} - \frac{r^4}{20} - \right. \\ \left. - \frac{1}{r} \left(\frac{R^5}{5} + \frac{e\pi^2 a^2 R^3}{3} + \frac{7\pi^4 a^4 R}{15} \right) + \sum_{h=1}^{\infty} (-1)^h e^{-h \frac{R-r}{a}} \left[\frac{24a^5}{r h^5} - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{18a^4}{h^4} + \frac{6ra^3}{h^3} - \frac{r^2 a^2}{h^2} \right] \right] + \\ + \int_R^\infty \frac{r^4}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} \left[\frac{J_{3,4}}{r} + \sum_{h=1}^{\infty} (-1)^h e^{h \frac{R-r}{a}} \left[\frac{24a^5}{r h^5} + \frac{18a^4}{h^4} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{6ra^3}{h^3} + \frac{a^2 r^2}{h^2} \right] \right]$$

Manipulando algebraicamente esta expresión se obtiene que

$$\begin{aligned}
 (3.40) \quad E_2 = 8\pi^2 g_0^2 q^2 &= \bar{J}_{1,4} \cdot \bar{J}_{1,3} + \left(\frac{R^4}{4} + \frac{\pi^2 a^4 R^2}{2} + \frac{7\pi^4 a^4}{60} \right) \bar{J}_{3,4} - \\
 &- \left(\frac{R^5}{5} + \frac{2\pi^2 a^4 R^3}{3} + \frac{7\pi^4 a^4 R}{15} \right) \bar{J}_{3,3} - \frac{1}{20} \bar{J}_{3,5} + \\
 &+ \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k e^{-\frac{kR}{a}} \left[\frac{24a^5}{k^5} \bar{J}_{2,3} - \frac{18a^4}{k^4} \bar{J}_{2,4} + \frac{6a^3}{k^3} \bar{J}_{2,5} - \frac{a^2}{k^2} \bar{J}_{2,6} \right] + \\
 &+ \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k e^{kR/a} \left[\frac{24a^5}{k^5} \bar{J}_{2,3} + \frac{18a^4}{k^4} \bar{J}_{2,4} + \frac{6a^3}{k^3} \bar{J}_{2,5} + \frac{a^2}{k^2} \bar{J}_{2,6} \right]
 \end{aligned}$$

Usando exhaustivamente los Apéndices A y B para el cálculo de las I- y J-integrales respectivamente, puede obtenerse que

$$\begin{aligned}
 (3.41) \quad E_2 = 8\pi^2 g_0^2 w^2 &\left\{ \frac{2R^5}{45} + \frac{\pi^2 a^2 R^3}{5} + a^3 R^2 \left(2\delta_{2,3} - 2\gamma_3 + \frac{\pi^2}{6} \ln 2 \right) + \frac{11}{75} \pi^4 a^4 R \right. \\
 &+ a^5 \left[2\pi^2 \gamma_3 - \frac{7\pi^4}{20} \gamma_1 - 156 \gamma_5 - 12 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) + 36 \delta_{4,1} + 60 (\delta_{2,3} + \delta_{3,2}) \right] + \\
 &+ \frac{a^6}{R} \left(\frac{14\pi^6}{45} + 672 \gamma_6 \right) + \frac{a^7}{R^2} \left[12\pi^2 \gamma_5 - \frac{7}{5} \pi^4 \gamma_1 - 2016 \gamma_7 - 24\pi^2 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) \right. \\
 &+ 144 \delta_{5,2} + 432 \delta_{4,3} + 720 (\delta_{2,5} + \delta_{3,4}) \left. \right] + \frac{a^8}{R^3} \left[\frac{49\pi^8}{900} + 4032 \gamma_8 \right] + \\
 &+ \frac{a^9}{R^4} \left[\frac{14\pi^4}{5} \gamma_5 - 4032 \gamma_9 - \frac{28}{5} \pi^4 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) + 2016 \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) - 144 \beta_4 \left(\frac{R}{a} \right) \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (3.43) \quad E_{1,2} = 8\pi^2 g_0^2 w \left\{ \frac{16}{105} R^5 + \frac{5}{12} \pi^2 a^4 R^3 + a^2 R^2 \left[4\delta_{2,3} + \frac{\pi^2 \ln 2}{4} - 4\gamma_2 - \right. \right. \\
 \left. \left. - \beta_2 \left(\frac{R}{a} \right) \right] + \frac{13}{180} \pi^4 a^4 R + a^5 \left[\frac{\pi^2}{20} - \pi^2 \gamma_3 - 13e \gamma_5 + \frac{7\pi^4 \ln 2}{20} - \right. \right. \\
 \left. \left. - 2\pi^2 \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) - 24 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) + 36 \delta_{4,1} + 48 (\delta_{2,3} + \delta_{3,2}) \right] - \frac{463\pi^6}{2520} \frac{a^6}{R} \right. \\
 \left. + \frac{a^7}{R^2} \left[\frac{7\pi^4}{30} \gamma_3 + 6\pi^2 \gamma_5 - 31e \gamma_7 + 7e \delta_{4,3} + 96 (\delta_{3,4} + \delta_{2,5}) + 48 \delta_{5,2} \right. \right. \\
 \left. \left. + 48 \left(\gamma_{2,5} \left(\frac{R}{a} \right) + \gamma_{3,4} \left(\frac{R}{a} \right) \right) + 36 \gamma_{4,3} \left(\frac{R}{a} \right) + 24 \gamma_{5,2} \left(\frac{R}{a} \right) + 156 \beta_7 \left(\frac{R}{a} \right) \right. \right. \\
 \left. \left. - 10\pi^2 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) - \frac{7\pi^4}{15} \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) - 12 \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) \beta_4 \left(\frac{R}{a} \right) - 24 \beta_2 \left(\frac{R}{a} \right) \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

Según (3.13), sumando los valores (3.37) de E_1 , (3.41) de E_2 y (3.42) de $E_{1,2}$ tenemos en forma cerrada la expresión analítica exacta de la energía coulombiana de un núcleo finito en términos de los parámetros R , a y w que caracterizan su densidad de carga (3.1):

$$\begin{aligned}
 (3.44) \quad E_c = & 8\pi^2 \rho_0^2 \left\{ R^5 \left[\frac{2}{15} + \frac{16}{105} \omega + \frac{2}{45} \omega^2 \right] + \right. \\
 & + \pi^2 a^2 R^3 \left[\frac{1}{9} + \frac{5}{12} \omega + \frac{1}{5} \omega^2 \right] + a^2 R^2 \left[2.4041 - \epsilon \beta_2 \left(\frac{R}{a} \right) + \right. \\
 & + \omega \left(4.2381 - \beta_2 \left(\frac{R}{a} \right) \right) + \left. \left. 2.4041 \omega^2 \right] + \right. \\
 & + \pi^4 a^4 R \left[-\frac{1}{45} + \frac{13}{80} \omega + \frac{11}{75} \omega^2 \right] + a^5 \left[3.7615 - \frac{\epsilon \pi^2}{3} \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) - \right. \\
 & - \epsilon \beta_2 \left(\frac{R}{a} \right) \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) + \epsilon \left(\gamma_{2,3} \left(\frac{R}{a} \right) + \gamma_{3,2} \left(\frac{R}{a} \right) \right) + \omega \left(138.0857 - \right. \\
 & - \left. \left. 24 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) - \epsilon \pi^2 \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) \right) + \omega^2 \left(131.0809 - 12 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) \right) \right] - \\
 & - \pi^6 \frac{a^6}{R} \omega \left[0.1837 + 0.3778 \omega \right] + \frac{a^7}{R^2} \omega \left[208.6610 + \right. \\
 & + 156 \beta_2 \left(\frac{R}{a} \right) - 10 \pi^2 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) - \frac{7 \pi^4}{15} \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) - 12 \beta_2 \left(\frac{R}{a} \right) \beta_4 \left(\frac{R}{a} \right) - 24 \beta_2 \left(\frac{R}{a} \right) \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) \\
 & + \omega \left(1896.0457 - 24 \pi^2 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) \right) \left. \right] - 0.3689 \pi^8 \frac{a^8}{R^3} \omega^2 \\
 & + \frac{a^9}{R^4} \omega^2 \left[3689.1655 - \frac{\epsilon 8}{5} \pi^4 \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) + 2016 \beta_3 \left(\frac{R}{a} \right) - \right. \\
 & \left. - 144 \beta_4 \left(\frac{R}{a} \right) \beta_5 \left(\frac{R}{a} \right) + 144 \gamma_{2,4} \left(\frac{R}{a} \right) + 720 \left(\gamma_{2,3} \left(\frac{R}{a} \right) + \gamma_{3,2} \left(\frac{R}{a} \right) \right) + 432 \gamma_{2,5} \left(\frac{R}{a} \right) \right] \left. \right\}
 \end{aligned}$$

donde ya hemos tenido en cuenta los valores numéricos de los diversos símbolos γ y δ ; (ver a este respecto el Apéndice C).

Ciertamente en esta expresión hay muchos términos que son despreciables absolutamente. Así por ejemplo la omisión de los términos que involucran β - y η -símbolos supone un error de solamente el 4% en el caso del ^4He , del 1.5% en el caso del ^{15}N , disminuyendo rápidamente cuando aumenta el número atómico Z. Además puede verse que

$$\begin{aligned}
 (3.45) \quad E_c = & \frac{3}{5} \frac{Z^2}{R} \frac{1 + \frac{8}{7}\omega + \frac{1}{3}\omega^2}{\left(1 + \frac{3}{5}\omega\right)^2} - \\
 & - \frac{7\pi^2}{10} \frac{Z^2}{R} \left(\frac{a}{R}\right)^2 \frac{1 + 1.519\omega - 1.26\omega^2 - \omega^3}{\left(1 + \frac{3}{5}\omega\right)^3} \\
 & + \frac{9}{2} \frac{Z^2}{R} \left(\frac{a}{R}\right)^3 \left[\frac{2.4041 + 4.23814\omega + 2.4041\omega^2}{\left(1 + \frac{3}{5}\omega\right)^2} + O(e^{-R/a}) \right] \\
 & + O\left(\left(\frac{a}{R}\right)^4\right)
 \end{aligned}$$

Nótese que el primer término de esta expresión coincide con el encontrado por Myers y Swiatecki (MYE69) pero no los demás, al haber sido ajustados por estos autores. Resulta sencillo comprobar que al hacer $a=w=0$ en la expresión exacta (3.44) o en la aproximada (3.45) se obtiene

$$E_c = \frac{16}{15} \pi^2 g_0^2 R^5 = \frac{3}{5} \frac{Z^2}{R}$$

que corresponde efectivamente a la energía coulombiana de una distribución de carga uniforme de radio R (REI79). Para los casos en que $w=0$ (densidad de Fermi biparamétrica), las expresiones (3.44) y (3.45) dan

$$(3.46) \quad E_c = 8\pi^2 \rho_0^2 \left\{ \frac{eR^5}{15} + \frac{11^2}{4} a^2 R^3 + \right. \\ \left. + \left[2.4041 - e\beta_2(R/a) \right] a^3 R^2 - \frac{11^4}{45} a^4 R \right. \\ \left. + a^5 \left[3.7615 - \frac{e\pi^2}{3} \beta_3\left(\frac{R}{a}\right) - e\beta_1\left(\frac{R}{a}\right) \beta_3\left(\frac{R}{a}\right) + 2 \left(\gamma_{2,2}\left(\frac{R}{a}\right) + \gamma_{3,2}\left(\frac{R}{a}\right) \right) \right] \right\}$$

$$(3.47) \quad E_c = \frac{3}{5} \frac{Z^2}{R} \left[1 - \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{a}{R}\right)^2 + \right. \\ \left. + \frac{3}{10} \left(\frac{a}{R}\right)^3 \left[2.4041 + O(e^{-R/a}) \right] + O\left(\left(\frac{a}{R}\right)^4\right) \right]$$

En la tabla III.1 se muestran para un gran número de núcleos los valores numéricos de la energía coulombiana obtenidos a partir de la fórmula general exacta (3.44). Asimismo se dan los valores del radio cuadrático medio $\langle r^2 \rangle^{1/2}$, de la densidad de carga en el origen ρ_0 , y del potencial coulombiano en el origen $\phi(0)$ y en $r=R$, $\phi(R)$, obtenidos por medio de las expresiones exactas (3.31), (3.29), (3.26) y (3.28) respectivamente. Los parámetros R, a y w de la densidad nuclear correspondiente han sido tomados de (DEJ74), salvo en el caso triparamétrico del ^{208}Pb que proceden de (BEL67).

Una primera observación de esta Tabla nos dice que, como se esperaba, la energía coulombiana aumenta para los núcleos más pesados. Señalemos que en la Tabla puede notarse que las distintas parametrizaciones utilizadas para un mismo núcleo alteran poco el valor de E_c . De la misma forma, la energía coulombiana de un mismo elemento (ver por ejemplo Mg, Ca, Ni, Pb) disminuye ligeramente al aumentar el número másico, como era de esperar.

Resulta interesante analizar los valores numéricos de E_c mostrados en esta Tabla teniendo presente la expresión analítica de sus componentes E_1 , E_2 y $E_{1,2}$. Obsérvese que cuando $w=0$, los términos E_2 y $E_{1,2}$ no contribuyen, siendo $E_c = E_1$ dada por la ecuación (3.38). En este caso puede observarse que para núcleos con $Z \geq 28$, la principal contribución a E_1 proviene de la suma de los dos primeros sumandos dados en (3.38), resultando que todos los demás dan una contribución menor del $\sim 1.6\%$ del total. Sin embargo, en la región de núcleos con $Z \leq 28$, la contribución de todos los sumandos distintos de los dos primeros (y principalmente el tercero) va aumentando progresivamente al disminuir Z , pasando de un 3.4% en el ^{58}Ni , 5% en el ^{40}Ca , 6% en el ^{31}P , 7.7% en el ^{28}Si y entre el 8% y el 10% para núcleos aún más ligeros. Por tanto puede decirse que una expresión prácticamente exacta de la energía coulombiana de un núcleo cuya densidad de carga es de tipo Fermi con $w=0$ viene dada por los tres primeros sumandos de la ec. (3.38). Además, teniendo en cuenta que los polilogaritmos $\beta_k(R/a)$ son despreciables (ver Apéndice C) en valor absoluto y, más aún, con respecto a los otros sumandos, puede decirse que

$$(3.48) \quad E_c = 8\pi^2 \rho_0^2 \left\{ \frac{2R^5}{15} + \frac{\pi^2}{9} a^2 R^3 + 2.4041a^3 R^2 \right\}$$

nos da el valor prácticamente exacto de la energía coulombiana de un núcleo con una densidad de carga tipo Fermi con $w=0$. Nótese que en (3.48) ya se han tenido en cuenta los valores numéricos de las cantidades γ_3 y $\delta_{2,1}$ involucradas en (3.38).

Para los núcleos con una densidad de carga de Fermi parabólica o triparamétrica (i.e., $w = 0$), puede observarse que E_1 da la contribución dominante a la energía coulombiana, seguida de las componentes $E_{1,2}$ y, a un nivel más inferior, de E_2 . Aquí, la componente $E_{1,2}$ no es despreciable, y aunque puede ser positiva o negativa dependiendo del signo de w , su valor

absoluto oscila entre un 5% de E_1 para el ^{48}Ca hasta un 59% de E_1 en el ^{142}Nd , siendo su comportamiento bastante irregular en el conjunto de núcleos considerados en la Tabla III.1. Algo que ocurre frecuentemente es que el módulo de $E_{1,2}$ es $\sim 30\%$ del valor de E_1 . Digamos también que en la expresión exacta (3.43) de $E_{1,2}$ se observa que la contribución de todos los sumandos (salvo los dos primeros) al valor total de $E_{1,2}$ oscila entre el $\sim 20\%$ para núcleos ligeros (e.g. el ^{12}C) hasta el 3% para el ^{142}Nd . Por otra parte, como hemos señalado anteriormente, la contribución del término E_2 a E_c es muy pequeña; en general su valor es menor que el 6% de la suma de las componentes E_1 y $E_{1,2}$. Digamos finalmente que puede verse como en la expresión exacta (3.38) de E_1 , la contribución de todos los sumandos salvo los dos primeros disminuye rápidamente desde el 10% para núcleos ligeros al 1.5% en el ^{142}Nd .

En la Tabla III.2 se muestran los valores de $\langle r^2 \rangle^{1/2}$, ρ_0 , $\phi(0)$, $\phi(R)$ y la energía E_c para varios valores del parámetro de difusividad superficial a y fijados los parámetros w y R en un núcleo específico, el ^{142}Nd para el que $w=0$. Aunque los valores con $a \leq 0.5\text{fm}$ no dan lugar a resultados realistas de las magnitudes físicas consideradas, se han incluido aquí para ilustrar que la energía coulombiana toma efectivamente el valor más alto cuando $a=0$ (superficie estrictamente esférica) y que disminuye paulatinamente al entrar la difusividad en juego. Esta disminución se debe al hecho de que cuando la superficie se hace difusa el radio cuadrático medio aumenta y la carga se distribuye sobre un volumen efectivo mayor. En nuestro caso, ^{142}Nd , la reducción de la energía es $\sim 10\%$, que es un cambio apreciable. Una reducción relativa de similar valor se obtiene para ρ_0 . Es también de interés la realización de un análisis de las variaciones con respecto al parámetro parabólico w del $\langle r^2 \rangle^{1/2}$, ρ_0 , $\phi(0)$, $\phi(R)$ y la energía coulombiana E_c cuando los parámetros radial R y de difusividad a están fijados. Este análisis se lleva a cabo numéricamente en un núcleo específico (escogido arbitrariamente), el ^{28}Si , y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla III.3. Este núcleo presenta unos valores de $R=2.93\text{fm}$ y $a=0.569\text{fm}$. Se observa que al aumentar w , aumenta el radio cuadrático medio y disminuyen todas las demás magnitudes físicas consideradas. Una diferencia de 0.2 en el parámetro w implica una variación del $\sim 8\%$ en la energía coulombiana, lo cual es asimismo apreciable.

Finalmente, en la Tabla III.4 se estudian numéricamente las relaciones

$$E_c = k \frac{Z^2}{A^{1/3}}$$

y

$$E_c = k'Z^{5/3}$$

usándose la expresión general exacta (3.44) de la energía culombiana nuclear. Se observa que la constante k es igual a ~ 0.64 para núcleos con $Z \leq 12$, ~ 0.67 para núcleos dentro de la región $12 \leq Z \leq 20$, ~ 0.7 para $28 \leq Z \leq 48$ y ~ 0.72 para núcleos pesados con $Z \geq 60$. De otra parte los valores de la constante k' oscilan entre 0.49 y 0.51 para núcleos ligeros, tomando el valor ~ 0.53 para los núcleos medios y pesados.

APENDICE A. Cálculo de las integrales $I_{1,n}$.

Puede mostrarse que (KH181):

$$(A.1) \quad I_{1,n} = \int_0^{\infty} \frac{r^n dr}{1+e^{(r-R)/a}} = \frac{R^{n+1}}{n+1} \left[1 + xP_{1,n}(x) + w_{1,n}(x) \right]$$

donde $x=a/R$, y $P_{1,n}$ es un polinomio de grado n en x :

$$(A.2) \quad P_{1,n} = (n+1) \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \eta_1^{(k)} x^k$$

con

$$(A.3) \quad \eta_1^{(k)} = (-1)^k \int_0^{\infty} u^k \left[\frac{1+(-1)^k e^{-u}}{1+e^{-u}} - 1 \right] du$$

Estas funciones $\eta_1^{(k)}$ valen cero para k par y valen (KH181)

$$(A.4) \quad \eta_1^{(2p-1)} = 2(2p-1)! (1 - 2^{1-2p}) \zeta(2p)$$

donde $\zeta(k)$ es la función zeta de Riemann.

Además, las funciones $w_{1,n}$ tienden a cero más rápidamente que cualquier potencia de x . Estas funciones vienen definidas por

$$(A.5) \quad w_{1,n} = -(n+1)xK_{1,n}$$

y

$$K_{1,n} = \int_{1/x}^{\infty} (1-ux)^n \left[\frac{1}{1+e^{-u}} - 1 \right] du$$

Haciendo el cambio $u=t+1/x$ se llega a

$$K_{1,n} = (-1)^{n+1} x^n e^{-1/x} \int_0^{\infty} \frac{t^n e^{-t}}{1+e^{-(t+1/x)}} dt =$$

$$(-1)^{n+1} x^n e^{-1/x} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k e^{-kR/a} \int_0^{\infty} t^n e^{-(k+1)t} dt$$

donde hemos desarrollado $1/(1+e^{-t-1/x})$ en serie de potencias de e^{-t} . A partir

de aquí es fácil obtener

$$(A.6) \quad w_{1,n} = (-1)^{n+1} (n+1)! (a/R)^{n+1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^{n+1}} e^{-kR/a}$$

Por lo tanto las ecuaciones (A.1) junto con (A.2), (A.4) y (A.6) nos permite evaluar en forma analítica cualquier integral del tipo $\int_0^{\infty} r^n dr / (1 + e^{(r-R)/a})$.

Algunas de estas integrales toman los siguientes valores

$$I_{1,1} = R^2/2 + \pi^2 a^2/6 + a^2 \beta_2(R/a)$$

$$I_{1,2} = R^3/3 + \pi^2 a^2 R/3 - 2a^3 \beta_3(R/a)$$

$$I_{1,4} = \frac{R^5}{5} + \frac{2\pi^2 a^2 R^3}{3} + \frac{7\pi^4 a^4 R}{15} - 24a^5 \beta_5(R/a)$$

$$I_{1,6} = \frac{R^7}{7} + \pi^2 a^2 R^5 + \frac{7}{3} \pi^4 a^4 R^3 + \frac{93}{56} \pi^6 a^6 R - 720a^7 \beta_7(R/a)$$

APENDICE B. Cálculo de las integrales $J_{i,n}$ con $i=1,2,3$

Aquí se obtienen las integrales $J_{i,n}$ que aparecen en el cálculo de los diversos términos de la energía electrostática nuclear. Estas integrales se pueden agrupar en las siguientes clases:

R.1.- Integrales del tipo

$$J_{1,n} = \int_R^\infty \frac{e^{-kr/a}}{1+e^{(r-R)/a}} r^n dr, \text{ con } n = 1,2,3,4,5,6$$

Haciendo el cambio $(r-R)/a = t$ queda

$$J_{1,n} = ae^{-kR/a} \int_0^\infty \frac{e^{-kt} (at+R)^n}{e^t (1+e^{-t})} dt = ae^{-kR/a} \sum_{j=0}^\infty (-1)^j \int_0^\infty (at+R)^n e^{-(k+j+1)t} dt$$

donde hemos desarrollado $1/(1+e^{-t})$ en potencias de e^{-t} .

Evidentemente, la integral $J_{1,n}$ se convierte en una suma de integrales, con un número de sumandos que depende de n , fáciles de calcular o ya tabuladas. Los resultados que se obtienen son los siguientes:

$$J_{1,1} = a e^{-kR/a} \sum_{j=0}^\infty (-1)^{j+1} \left[\frac{R}{k+j} + \frac{a}{(k+j)^2} \right]$$

$$J_{1,2} = a e^{-kR/a} \sum_{j=0}^\infty (-1)^{j+1} \left[\frac{k^2}{k+j} + \frac{2aR}{(k+j)^2} + \frac{2a^2}{(k+j)^3} \right]$$

$$J_{1,3} = a e^{-kR/a} \sum_{j=0}^\infty (-1)^{j+1} \left[\frac{R^3}{k+j} + \frac{3aR^2}{(k+j)^2} + \frac{6a^2R}{(k+j)^3} + \frac{6a^3}{(k+j)^4} \right]$$

$$J_{1,4} = a e^{-kR/a} \sum_{j=0}^\infty (-1)^{j+1} \left[\frac{R^4}{k+j} + \frac{4aR^3}{(k+j)^2} + \frac{12a^2R^2}{(k+j)^3} + \frac{24a^3R}{(k+j)^4} + \frac{120a^5}{(k+j)^6} \right]$$

$$J_{1,5} = a e^{-kR/a} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} \left[\frac{R^5}{k+j} + \frac{5aR^4}{(k+j)^2} + \frac{20a^2R^3}{(k+j)^3} + \frac{60a^3R^2}{(k+j)^4} + \frac{120a^4R}{(k+j)^5} + \frac{120a^5}{(k+j)^6} \right]$$

$$J_{1,6} = a e^{-kR/a} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} \left[\frac{R^6}{k+j} + \frac{6aR^5}{(k+j)^2} + \frac{30a^2R^4}{(k+j)^3} + \frac{120a^3R^3}{(k+j)^4} + \frac{360a^4R^2}{(k+j)^5} + \frac{720a^5R}{(k+j)^6} + \frac{720a^6}{(k+j)^7} \right]$$

B.2.- Integrales del tipo

$$J_{2,n} = \int_0^R \frac{e^{kr/a}}{1+e^{(r-R)/a}} r^n dr, \quad n=1,2,3,4,5,6$$

Haciendo el cambio $(R-r)/a = t$ se llega a

$$J_{2,n} = ae^{kR/a} \int_0^{R/a} \frac{(R-at)^n e^{-kt}}{1+e^{-t}} dt =$$

$$= ae^{kR/a} \left[\int_0^{\infty} \frac{(R-at)^n e^{-kt}}{1+e^{-t}} dt - \int_{R/a}^{\infty} \frac{(R-at)^n e^{-kt}}{1+e^{-t}} dt \right]$$

$$= ae^{kR/a} (L_1 - L_2)$$

siendo L_1 la integral entre 0 e infinito y L_2 la otra.

En L_1 podemos desarrollar directamente el denominador en potencias de e^{-t} , y en L_2 se puede hacer el cambio de variable $at-R = u$ obteniendo

$$L_2 = \frac{1}{a} e^{-kR/a} \int_0^{\infty} \frac{(-u)^n e^{-ku/a}}{1+e^{-R/a} e^{-u/a}} du$$

pudiendo de nuevo desarrollar el denominador en potencias de $e^{-(R+u)/a}$

En definitiva, se observa que tanto L_1 como L_2 (o lo que es lo mismo $J_{2,n}$) pueden expresarse en función de integrales conocidas. El resultado que se obtiene es el siguiente:

$$J_{2,1} = a e^{hR/a} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \left[\frac{R}{h+j} - \frac{a}{(h+j)^2} \right] + a^2 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(h+j)^2} e^{-Rj/a}$$

$$J_{2,2} = a e^{hR/a} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \left[\frac{R^2}{h+j} - \frac{2aR}{(h+j)^2} + \frac{2a^2}{(h+j)^3} \right] - 2a^3 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j e^{-Rj/a}}{(h+j)^3}$$

$$J_{2,3} = a e^{hR/a} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \left[\frac{R^3}{h+j} - \frac{3aR^2}{(h+j)^2} + \frac{6a^2R}{(h+j)^3} - \frac{6a^3}{(h+j)^4} \right] + 6a^4 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j e^{-Rj/a}}{(h+j)^4}$$

$$J_{2,4} = a e^{hR/a} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \left[\frac{R^4}{h+j} - \frac{4aR^3}{(h+j)^2} + \frac{12a^2R^2}{(h+j)^3} - \frac{24a^3R}{(h+j)^4} + \frac{24a^4}{(h+j)^5} \right] - 24a^5 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j e^{-Rj/a}}{(h+j)^5}$$

$$J_{2,5} = a e^{hR/a} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \left[\frac{R^5}{h+j} - \frac{5aR^4}{(h+j)^2} + \frac{20a^2R^3}{(h+j)^3} - \frac{60a^3R^2}{(h+j)^4} + \frac{120a^4R}{(h+j)^5} - \frac{120a^5}{(h+j)^6} \right] + 120a^6 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j e^{-Rj/a}}{(h+j)^6}$$

$$J_{2,6} = a e^{hR/a} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \left[\frac{R^6}{h+j} - \frac{6aR^5}{(h+j)^2} + \frac{30a^2R^4}{(h+j)^3} - \frac{120a^3R^3}{(h+j)^4} + \frac{360a^4R^2}{(h+j)^5} - \frac{720a^5R}{(h+j)^6} + \frac{720a^6}{(h+j)^7} \right] - 720a^7 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j e^{-Rj/a}}{(h+j)^7}$$

B.3.- Integrales del tipo

$$J_{3,n} = \int_0^R \frac{r^n dr}{1+e^{(r-R)/a}}, \quad n = 1,2,3,4,5,6,8$$

Lo único que hay que hacer para calcular este tipo de integrales es desarrollar el denominador del integrando en potencias de $e^{(r-R)/a}$. Haciendo esto queda

$$J_{3,n} = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j e^{-Rj/a} \int_0^R r^n e^{rj/a} dr$$

Los resultados que se obtienen para los distintos valores de n son los siguientes:

$$J_{3,1} = \frac{R^2}{2} + a \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \left(R - \frac{a}{k} \right) + a^2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{e^{-Rk/a}}{k^2}$$

$$J_{3,2} = \frac{R^3}{3} + a \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{R^2}{k} - \frac{2aR}{k^2} + \frac{2a^2}{k^3} \right] - 2a^3 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{e^{-Rk/a}}{k^3}$$

$$J_{3,3} = \frac{R^4}{4} + a \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{R^3}{k} - \frac{3aR^2}{k^2} + \frac{6a^2R}{k^3} - \frac{6a^3}{k^4} \right] + 6a^4 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{e^{-Rk/a}}{k^4}$$

$$J_{3,4} = \frac{R^5}{5} + a \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{R^4}{k} - \frac{4aR^3}{k^2} + \frac{12a^2R^2}{k^3} - \frac{24a^3R}{k^4} + \frac{24a^4}{k^5} \right] - 24a^5 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{e^{-Rk/a}}{k^5}$$

$$J_{3,5} = \frac{R^6}{6} + a \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{R^5}{k} - \frac{5aR^4}{k^2} + \frac{20a^2R^3}{k^3} - \frac{60a^3R^2}{k^4} + \frac{120a^4R}{k^5} - \frac{120a^5}{k^6} \right] + 120a^6 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{e^{-Rk/a}}{k^6}$$

$$J_{3,6} = \frac{R^7}{7} + a \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{R^6}{k} - \frac{6aR^5}{k^2} + \frac{30a^2R^4}{k^3} - \frac{120a^3R^3}{k^4} + \frac{360a^4R^2}{k^5} - \frac{720a^5R}{k^6} + \frac{720a^6}{k^7} \right] - 720a^7 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{e^{-kR/a}}{k^7}$$

$$J_{3,8} = \frac{R^9}{9} + a \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{R^8}{k} - \frac{8aR^7}{k^2} + \frac{56a^2R^6}{k^3} - \frac{336a^3R^5}{k^4} + \frac{1680a^4R^4}{k^5} - \frac{6720a^5R^3}{k^6} + \frac{20160a^6R^2}{k^7} - \frac{40320a^7R}{k^8} + \frac{40320a^8}{k^9} \right] - 40320a^9 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{e^{-kR/a}}{k^9}$$

APENDICE C.- Algunas Series Especiales

Aquí se enumeran algunos símbolos especiales utilizados en este capítulo y se tabulan sus valores numéricos

(1) Serie γ_i . Definición

$$\gamma_i = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^i}$$

cuyo valor es (GRA65)

$$\gamma_i = -(1 - 2^{1-i}) \zeta(i)$$

donde $\zeta(i)$ es la función zeta de Riemann. Algunos valores particulares son

$$\gamma_1 = -\ln 2$$

$$\gamma_2 = -\pi^2/12$$

$$\gamma_3 = -0.9015427$$

$$\gamma_4 = -7 \pi^4/720$$

$$\gamma_5 = -0.97211977$$

$$\gamma_6 = -31 \pi^6/30240$$

$$\gamma_7 = -0.99259382$$

$$\gamma_8 = -127 \pi^8/(30(8!))$$

$$\gamma_9 = -0.99809430$$

(2) Serie $\beta_i(x)$. Definición

$$\beta_i(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^i} e^{-kx}$$

Estas series son los conocidos polilogaritmos de orden k o k -logaritmos estudiados detalladamente en (LEW81).

(3) Serie Doble $\delta_{i,j}$. Definición

$$\delta_{i,j} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^i} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{(k+1)^j}$$

Algunos valores particulares son

$$\delta_{2,1} = -0.26958 \quad \delta_{2,3} = -0.09275 \quad \delta_{2,5} = -0.02711$$

$$\delta_{2,7} = -0.00731 \quad \delta_{3,2} = -0.16963 \quad \delta_{3,4} = -0.05178$$

$$\delta_{3,6} = -0.01431 \quad \delta_{4,1} = -0.29619 \quad \delta_{4,3} = -0.09691$$

$$\delta_{4,5} = -0.02768 \quad \delta_{5,1} = -0.30131 \quad \delta_{5,2} = -0.17541$$

$$\delta_{5,4} = -0.05268$$

(4) Serie Doble $\eta_{i,j}(x)$. Definición

$$\eta_{i,j}(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^i} e^{-kx} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(k+1)^j} e^{-lx}$$

Tabla III.1.- Radio cuadrático medio (en fm), ρ_0 (en 10^{-20} Cb fm⁻³), potencial coulombiano (en 10^6 Voltios) en $r=0$, $\phi(0)$, y en $r=R$, $\phi(R)$, y energía coulombiana E_c (en MeV) obtenidos a partir de una densidad bi ó triparamétrica de Fermi en forma exacta, para varios núcleos ligeros, medios y pesados.

Núcleo	R	a	w	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$	ρ_0	$\phi(0)$	$\phi(R)$	E_c
⁴ He	1.008	0.327	0.445	1.7168	1.90698	2.33132	2.00334	1.6196
¹² C	2.355	0.5224	-0.149	2.4475	1.46064	4.60094	3.32735	10.1025
¹⁵ N	2.334	0.498	0.139	2.7055	1.24054	4.91297	3.75527	12.5210
¹⁶ O	2.608	0.513	-0.051	2.7264	1.32471	5.49561	4.00825	16.1701
¹⁹ F	2.59	0.564		2.9014	1.34913	5.90291	4.41476	19.3034
²⁰ Ne	2.805	0.571		3.0372	1.22972	6.20522	4.59489	22.7285

Tabla III.1 (continuación)

Núcleo	R	a	w	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$	g_0	$\phi(0)$	$\phi(R)$	E_c
^{22}Ne	2.782	0.549		2.9677	1.28297	6.32281	4.66138	23.2400
^{24}Mg	3.108	0.607	-0.163	3.0710	1.36038	7.24836	5.14414	32.1055
^{24}Mg	2.942	0.538		3.0318	1.35507	7.34986	5.36298	32.6789
^{25}Mg	2.76	0.608		3.1106	1.47546	7.35356	5.50936	32.0166
^{27}Al	3.07	0.519		3.0621	1.34034	7.80318	5.63787	37.8710
^{28}Si	2.93	0.569		3.1022	1.55113	8.44935	6.21524	43.5549
^{28}Si	3.30	0.545	-0.18	3.0787	1.42445	8.30513	5.77020	43.3935
^{31}P	3.21	0.56		3.2427	1.33382	8.53664	6.19161	47.6639

Tabla III.1 (continuación)

Núcleo	R	a	w	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$	S_0	$\phi(0)$	$\phi(R)$	E_c
^{40}A	3.388	0.612		3.4730	1.33899	9.60861	6.99996	64.1612
^{40}A	3.73	0.62	-0.19	3.4712	1.28140	9.46996	6.56764	63.5906
^{40}Ca	3.725	0.591	-0.169	3.4519	1.41158	10.5495	7.32133	78.9566
^{40}Ca	3.51	0.563		3.4310	1.41074	10.6440	7.64345	79.8521
^{48}Ca	3.7369	0.5245	-0.03	3.4692	1.26029	10.3723	7.30881	78.5807
^{58}Ni	4.084	0.5575		3.7819	1.32801	13.2745	9.37422	141.3821
^{58}Ni	4.3092	0.5169	-0.1308	3.7642	1.30873	13.2119	9.03695	141.0983
^{60}Ni	4.4891	0.5369	-0.2668	3.7961	1.31787	13.1186	8.73675	139.4253

Tabla III.1 (continuación)

Núcleo	R	a	w	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$	ξ_0	$\phi(\omega)$	$\phi(R)$	E_c
^{61}Ni	4.4024	0.5401	-0.1983	3.8066	1.30136	13.1016	8.86271	139.3906
^{62}Ni	4.4421	0.5386	-0.2090	3.8221	1.28234	13.0380	8.7948	138.7531
^{112}Cd	5.38	0.532		4.6127	1.07525	18.1400	12.5032	337.3680
^{142}Nd	5.6135	0.5868	0.096	4.9204	1.09235	21.2757	14.8962	495.0118
^{142}Nd	5.6838	0.5868		4.9134	1.13089	21.3540	14.7570	495.3380
^{152}Sm	5.8044	0.581		4.9879	1.10355	21.6873	14.9590	520.6649
^{18}W	6.51	0.535		5.4206	0.96181	23.5293	16.0664	680.1509
^{206}Pb	6.61	0.545		5.5063	1.01773	25.6717	17.5317	822.2002

Tabla III.2.- Radio cuadrático medio (en fm), ρ_0 (en 10^{-20} Cb fm $^{-3}$), potencial coulombiano (en 10^6 Voltios) en $r=0$, $\phi(0)$, y en $r=R$, $\phi(R)$, y energía coulombiana del ^{142}Nd en función del parámetro de difusividad a , para valores fijados de los parámetros radial $R=5.6838$ fm y parabólico $w=0$.

a	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$	ρ_0	$\phi(0)$	$\phi(R)$	E_c
0.0	4.4027	1.24986	22.8009	15.2006	547.2220
0.1	4.4183	1.24605	22.7546	15.1886	545.3309
0.2	4.4650	1.23477	22.6174	15.512	539.9339
0.3	4.5417	1.2164	22.3942	15.0872	531.5118
0.4	4.6470	1.1916	22.0925	14.9962	520.5948
0.5	4.7789	1.1612	21.7223	14.8790	507.7161
0.6	4.9353	1.1260	21.2948	14.7369	493.3788

Tabla III.3.- Radio cuadrático medio (en fm), ρ_0 (en $10^{-20} \text{Cb fm}^{-3}$), potencial coulombiano (en 10^6 Voltios) en $r=0$, $\phi(0)$, y en $r=R$, $\phi(R)$, y energía coulombiana del ^{28}Si en función del parámetro parabólico w , para valores fijados de los parámetros radial $R=2.93$ fm y de difusividad $a=0.569$ fm.

w	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$	ρ_0	$\phi(0)$	$\phi(R)$	E_c
-0.2	2.8250	1.99939	9.13777	6.41588	47.3271
-0.15	2.9111	1.86467	8.93088	6.35558	46.1430
-0.1	2.9842	1.74697	8.75010	6.30290	45.14382
-0.05	3.0473	1.64324	8.59080	6.25647	44.2908
0.0	3.1022	1.55114	8.44935	6.21524	43.5549
0.05	3.1504	1.46881	8.32292	6.17839	42.9112
0.1	3.1932	1.39478	8.20923	6.14526	42.3520
0.15	3.2314	1.32786	8.10645	6.11530	41.8550
0.2	3.2657	1.26707	8.01308	6.08809	41.4127
0.3	3.3248	1.16078	7.84984	6.04052	40.6608
0.4	3.3739	1.0709	7.7119	6.0003	40.0462

Tabla III.4.- Valores de los parámetros k y k' que relacionan la energía coulombiana E_c con el número atómico Z y el número masico A mediante las relaciones $E_c = kZ^2/A^{1/3}$ y $E_c = k'Z^{5/3}$ usando la expresión general exacta (3.44).

Nucleo	k	k'	Nucleo	k	k'
^4He	0.643	0.510	^{48}Ca	0.714	0.533
^{12}C	0.643	0.510	^{58}Ni	0.697	0.547
^{15}N	0.630	0.489	^{60}Ni	0.696	0.540
^{16}O	0.637	0.505	^{61}Ni	0.700	0.540
^{19}F	0.636	0.496	^{62}Ni	0.701	0.537
^{20}Ne	0.617	0.490	^{112}Cd	0.706	0.532
^{22}Ne	0.651	0.501	^{142}Nd	0.718	0.539
^{24}Mg	0.643	0.510	^{152}Sm	0.723	0.536
^{25}Mg	0.650	0.509	^{184}W	0.706	0.521
^{27}Al	0.672	0.527	^{206}Pb	0.722	0.531
^{28}Si	0.675	0.536	^{207}Pb	0.722	0.530
^{31}P	0.665	0.512	^{208}Pb	0.723	0.530
^{40}Ar	0.677	0.519	^{232}U	0.729	0.531
^{40}Ca	0.675	0.536			

BIBLIOGRAFIA.

- (BAR79) R.C. Barret y D.F. Jacson, Nuclear Sizes and Structure (Clarendon, Oxford, 1979)
- (BEI73) M. Beiner y R.J. Lombard, Phys. Lett. B47(1973)399
- (BEL67) J.B. Bellicard y K.J. Van Oostrum, Phys. Rev. Lett. 19(1967)242
- (BOH69) A. Bohr y B.R. Mottelson, Nuclear Structure, (Benjamin, New York, 1969)
- (CAM73) X. Campi y D.W.L. Sprung, Phys. Lett. B46(1973)291
- (DAV73) K.T.R. Davies et al., Nucl. Phys. A216(1973)250
- (DAV76) K.T.R. Davies y J.R. Nix, Phys. Rev. C14(1976)1977
- (DEJ74) C.W. de Jager, H. de Vries y C. de Vries, Atomic Data and Nuclear Data Tables 14(1974)479
- (FRI75) J.L. Friar y J.W. Negele, Advances in Nucl. Phys. 8(1975)219
- (GRA65) I.S. Gradshteyn y I.M. Ryzhik, Table of Integrals, Series and Products (Academic Press, New York, 1965)
- (HAH56) B. Hahn, D.G. Ravenhall y R. Hofstadter, Phys. Rev. 101(1956)1136
- (HEI69) J. Heissenberg et al, Phys. Rev. Lett. 23(1969)1402
- (HOF63) R. Hofstadter (editor), Nuclear and Nucleon Structure (Benjamin, New York, 1963)
- (HOR75) W.F. Hornyak, Nuclear Structure (Academic, New York, 1975)
- (JAN72) J. Janecke, Nuc. Phys. A181(1972)49
- (KRA79) H.J. Krappe, J.R. Nix y A.J. Sierk, Phys. Rev. C20(1979)992
- (KRI73) R.M. Krishnan y W.W.T. Pu, Phys. Lett. B47(1973)225
- (KRI81) H. Krivine y J. Treiner, J. Math. Phys. 22(1981)2484
- (LEW81) L.Lewin, Polylogarithms and Associated Functions, (North Holland, Amsterdam, 1981)
- (MAR83) S. Marcos y E. Santos, Nuovo Cimento 78A(1983)135
- (MOH69) R. Mohan, M. Danos y L.C. Biedenharn, Phys. Rev. Lett. 23(1969)868
- (MYE66) W.D. Myers y W.J. Swiatecki, Nucl. Phys. 81(1966)1
- (MYE69) W.D. Myers y W.J. Swiatecki, Ann. Phys. 55(1969)395
- (MYE77) W.D. Myers, Droplet Model of Atomic Nuclei (Plenum, New York, 1977)
- (REI79) J.R. Reitz y F.J. Milford, Foundation of Electromagnetic Theory (Addison-Wesley, Reading, 1979)
- (SCH67) H. Schoper (editor), "Nuclear Physics and Technology", Volumen 2, Nuclear Radii (Springer, Berlin, 1967)

CONCLUSIONES

El trabajo que hemos desarrollado a lo largo de esta memoria se enmarca en el estudio de las propiedades macroscópicas, medias o colectivas de sistemas atómicos y nucleares.

En primer lugar, hemos encontrado cotas inferiores a todas aquellas magnitudes físicas que puedan expresarse como momentos de frecuencia de la densidad de carga o de materia de sistemas cuánticos, y en particular de sistemas atómicos y nucleares. Entre estas magnitudes hemos centrado nuestra atención en las energías cinética y de intercambio. Destaquemos a este respecto lo siguiente:

1. Las cotas encontradas presentan un aspecto sencillo y compacto, dependiendo solamente de un momento alrededor del origen de la densidad de carga o de materia del sistema, como por ejemplo el radio cuadrático medio.

2. Las cotas inferiores a la energía cinética atómica obtenidas partiendo del $\langle 1/r \rangle$ es mayor del 70% de los valores obtenidos mediante cálculos del tipo Hartree-Fock-Slater. Se puede observar que la bondad de la cota aumenta al subir en la tabla periódica.

3. El error relativo de la cota a la energía de intercambio atómica oscila entre ~ 0.3 y ~ 0.5 cuando se compara con los valores obtenidos recientemente por Schwinger (SCH81).

4. Las mejores cotas a la energía cinética nuclear son del mismo orden de magnitud que las calculadas con diversos métodos autoconsistentes, coincidiendo prácticamente con éstos algunas veces. En el peor de los casos, dicha cota es del 70% del valor autoconsistente correspondiente.

5. Las cotas a la energía de intercambio nuclear obtenidas partiendo del radio cuadrático medio de la densidad de carga son mayores del 90% de la energía de intercambio obtenida mediante cálculos autoconsistentes de tipo Hartree-Fock.

En segundo lugar, hemos llevado a cabo un estudio de la distribución de niveles de sistemas cuánticos. Para ello hemos tenido en cuenta la estrecha relación existente entre densidad de niveles de dichos sistemas y densidad de ceros de ciertos sistemas de polinomios ortogonales. En este sentido hemos aplicado resultados conocidos acerca de los momentos asintóticos de la densidad de ceros de sistemas de polinomios ortogonales al problema de la

identificación y caracterización de (operadores Hamiltonianos de) sistemas cuánticos, encontrando dos grandes familias de funciones densidad que generalizan resultados hallados por otros autores. En particular generalizan la densidad semicircular de Wigner, la densidad regular y la distribución uniforme. Estas densidades han sido obtenidas teniendo en cuenta el comportamiento asintótico de los elementos de matriz del Hamiltoniano de Lanczos que representa al sistema.

También hemos llevado a cabo un estudio de la densidad de ceros de sistemas de polinomios (ortogonales en algunos casos) en función de sus diversas caracterizaciones (expresión explícita, relación de recurrencia, ecuación diferencial). Hemos aplicado los resultados obtenidos a diversos sistemas de polinomios no-triviales que aparecen en el estudio de varios problemas físicos, encontrando expresiones compactas para los momentos de la densidad de ceros de dichos polinomios, así como relaciones de recurrencia de dichos momentos.

Finalmente hemos calculado analíticamente el potencial y la energía electrostática de los núcleos cuya densidad de carga viene parametrizada mediante una función de Fermi de tipo parabólico. Hemos encontrado expresiones en forma cerrada para estas magnitudes en función de los parámetros parabólico y de difusividad que caracterizan la densidad de carga nuclear. Estas expresiones son exactas (o sea, una vez fijada la densidad de carga no se hace aproximación alguna) contrariamente a las halladas por otros autores, y en particular por Myers y Swiatecki en un contexto de búsqueda de fórmulas semiempíricas de masa nucleares. Por último se detallan y discuten los valores numéricos de la energía electrostática para varios núcleos ligeros, medios y pesados.