

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

ESCUELA DE POSGRADO

**UNIDAD DE POSGRADO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS
ECONÓMICAS**



**“CÁLCULO DE FUNCIONES DE ONDA DE CAMPO CENTRAL
UTILIZANDO EL POTENCIAL DE THOMAS – FERMI MODIFICADO
PARA ÁTOMOS EN DIFERENTES ESTADOS DE IONIZACIÓN
POSITIVA, CALLAO 2023”**

**TESIS PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAESTRO EN
INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA UNIVERSITARIA**

AUTOR:

RAÚL ANGEL CONTRERAS CONTRERAS

ASESOR:

DR. EFRAÍN PABLO DE LA CRUZ GAONA

LÍNEA DE INVESTIGACIÓN:

CIENCIAS NATURALES

Callao, 2023

PERÚ

Document Information

Analyzed document	RAUL CONTRERAS CONTRERAS (URKUNG).docx (D180785740)
Submitted	2023-12-04 15:06:00 UTC+01:00
Submitted by	
Submitter email	fce.posgrado@unac.edu.pe
Similarity	7%
Analysis address	fce.posgrado.unac@analysis.orkund.com

Sources included in the report

SA	Universidad Nacional del Callao / T.F.P tesis 2019.docx Document T.F.P tesis 2019.docx (D57144231) Submitted by: investigacion.fcnm@unac.pe Receiver: investigacion.fcnm.unac@analysis.orkund.com	 6
-----------	---	---

Entire Document

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO ESCUELA DE POSGRADO UNIDAD DE POSGRADO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS ECONÓMICAS

"CÁLCULO DE FUNCIONES DE ONDA DE CAMPO CENTRAL UTILIZANDO EL POTENCIAL DE THOMAS – FERMI MODIFICADO PARA ÁTOMOS EN DIFERENTES ESTADOS DE IONIZACIÓN POSITIVA"

TESIS PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAESTRO

AUTOR: RAÚL ANGEL CONTRERAS CONTRERAS

ASESOR: DR. EFRAÍN PABLO DE LA CRUZ GAONA

LÍNEA DE INVESTIGACIÓN: CIENCIAS NATURALES

CALLAO - 2023 PERÚ

INFORMACIÓN BÁSICA

FACULTAD: CIENCIAS ECONÓMICAS (FCE) DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO (UNAC) UNIDAD DE INVESTIGACIÓN: UNIDAD DE POSGRADO FCE-UNAC TÍTULO: CÁLCULO DE FUNCIONES DE ONDA DE CAMPO CENTRAL UTILIZANDO EL POTENCIAL DE THOMAS-FERMI MODIFICADO PARA ÁTOMOS EN DIFERENTES ESTADOS DE IONIZACIÓN POSITIVA. AUTOR: RAÚL ANGEL CONTRERAS CONTRERAS / ORCID 10000-0002-9204-6334 / DNI: 07741444 ASESOR: MG. EFRAÍN PABLO DE LA CRUZ GAONA / ORCID 0000-0002-4429- 9521 / DNI: 08510971 LUGAR DE EJECUCIÓN: FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA - UNAC UNIDAD DE ANÁLISIS: ESTUDIO DE LA ENERGÍA Y DE LA FUNCIÓN DE ONDA DEL ELECTRÓN TIPO: CUANTITATIVO / EXPERIMENTAL TEMA OCDE: FÍSICA TEÓRICA

INDICE

INTRODUCCIÓN 7 I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA 9 1.1 Descripción de la realidad problemática 9 1.1.1 Problemas Específicos: 11 1.2 Objetivos 11 1.2.1 Generales 11 1.2.2 Específicos 11 1.3 Justificación 12 1.3.1 Teórica 12 1.3.2 Metodológica 12 1.3.3 Científica 12 1.4 Delimitantes de la Investigación 12 1.4.1 Teórica 12 1.4.2 Temporal 12 1.4.3 Espacial 13 II. MARCO TEORICO 13 2.1 Antecedentes 13 2.1.1 Antecedentes Internacional 13 2.1.2 Antecedentes Nacionales 14 2.2 Bases Teóricas 15 2.2.1



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE CIENCIAS ECONOMICAS
Unidad de Posgrado

CONSTANCIA N° 013-2023-UPG-FCE

REPORTE DEL ORIGINAL - URKUND

La Unidad de Asesoría de Tesis de la Unidad de Posgrado de la Facultad de Ciencias Económicas, hace constar el resultado de la Autenticidad de la tesis titulada:

CÁLCULO DE FUNCIONES DE ONDA DE CAMPO CENTRAL UTILIZANDO EL POTENCIAL DE THOMAS-FERMI MODIFICADO PARA ATOMOS EN DIFERENTES ESTADOS DE IONIZACIÓN POSITIVA, CALLAO 2023

Autor: CONTRERAS CONTRERAS RAUL ANGEL

Asesor: Mag. EFRAIN PABLO DE LA CRUZ GAONA.

Para optar el Grado de Académico: MAESTRO EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA UNIVERSITARIA

Al realizar la revisión de la autenticidad mediante el URKUND, se obtuvo un resultado del 07 %, lo cual no supera el máximo establecido en la Directiva N° 013-2019-R "Directiva que Regula y Norma el Uso del Software para la Identificación de la Autenticidad de Documentos Académicos en la Universidad Nacional del Callao", aprobado con Res. N° 704-2019-R del 05 de Julio de 2019.

Se expide la presente constancia a solicitud del interesado, a fin de continuar con el trámite correspondiente.

Bellavista, 04 de diciembre del 2023

Dr. Ramirez Olaya Rigoberto Pelagio
RESPONSABLE DEL USO DEL URKUND

PhD. Torres Quiroz Almintor Giovanni
DIRECTOR DE INVESTIGACIÓN DE LA FACULTAD

INFORMACIÓN BÁSICA

FACULTAD: CIENCIAS ECONÓMICAS (FCE) DE LA UNIVERSIDAD
NACIONAL DEL CALLAO (UNAC)

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN: UNIDAD DE POSGRADO FCE-UNAC

TÍTULO: CÁLCULO DE FUNCIONES DE ONDA DE CAMPO CENTRAL
UTILIZANDO EL POTENCIAL DE THOMAS-FERMI
MODIFICADO PARA ÁTOMOS EN DIFERENTES ESTADOS DE
IONIZACIÓN POSITIVA.

AUTOR: RAÚL ANGEL CONTRERAS CONTRERAS / ORCID 10000-0002-
9204-6334 / DNI: 07741444

ASESOR: MG. EFRAÍN PABLO DE LA CRUZ GAONA / ORCID 0000-0002-
4429- 9521 / DNI: 08510971

LUGAR DE EJECUSIÓN: FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y
MATEMÁTICA - UNAC

UNIDAD DE ANÁLISIS: ESTUDIO DE LA ENERGÍA Y DE LA
FUNCIÓN DE ONDA DEL ELECTRÓN

TIPO: CUANTITATIVO / EXPERIMENTAL

TEMA OCDE: FÍSICA TEÓRICA

ACTA DE SUSTENTACION

ESCUELA DE POSGRADO Facultad de Ciencias Económicas Unidad de Posgrado

LIBRO N°: 02 FOLIO N°: 73 ACTA N°: 06 DE SUSTENTACIÓN DE TESIS CON CICLO

Siendo las 19.40 horas del día 13 del mes de diciembre del año 2023 y de acuerdo a solicitado con OFICIO N°277-2023-UPG-FCE-UNAC y autorizado con OFICIO N°1883-2023-EPG-UNAC-VIRTUAL se reunieron en reunión virtual, los miembros del jurado conformado por:

1. Dr. RIGOBERTO PELAGIO RAMIREZ OLAYA : Presidente
2. Dr. MÁXIMO ESTANISLAO CALERO BRIONES : Secretario
3. Mg. ALEJANDRO OSCAR OLIVARES RAMIREZ : Vocal
4. Dra. MICAELA AYDE SILVIA CHOQUEHUANCA MARTINEZ: Vocal

Para evaluar la sustentación tesis: "CÁLCULO DE FUNCIONES DE ONDA DE CAMPO CENTRAL UTILIZANDO EL POTENCIAL DE THOMAS-FERMI MODIFICADO PARA ATOMOS EN DIFERENTES ESTADOS DE IONIZACIÓN POSITIVA, CALLAO 2023" presentado por el egresado CONTRERAS CONTRERAS RAUL ANGEL para optar al grado académico de Maestro en Investigación y Docencia Universitaria.

Concluida la sustentación y luego que se ha dado respuesta a las preguntas respectivas y según lo establecido en el Reglamento vigente, el Jurado establece la siguiente calificación: cuantitativa de Dieciséis (16) y cualitativa de Muy Bueno.

Según las normas institucionales vigentes y en señal de conformidad con lo acordado se firma la presente acta.

Siendo las 23.26 horas se dio por terminado el acto de sustentación.


Dr. RIGOBERTO PELAGIO RAMIREZ OLAYA
Presidente


Dr. MÁXIMO ESTANISLAO CALERO BRIONES
Secretario


Mg. ALEJANDRO OSCAR OLIVARES RAMIREZ
Vocal


Dra. MICAELA AYDE SILVIA CHOQUEHUANCA MARTINEZ
Vocal

ASESOR: MG. EFRAÍN PABLO DE LA CRUZ GAONA

DEDICATORIA

A Dios, por haber guiado mis pasos por el buen camino.

A mi madre, por su apoyo en mi formación educativa cuando niño.

A mi esposa y a mis hijos a quienes quiero mucho.

A mi profesor, el Dr. Jorge Bravo Cabrejos, quien con su paciencia y orientación me ha esperado para que culmine con éxito esta investigación.

A mis colegas y amigos de la Facultad por ser quienes me orientaron a través de su conducta y comportamiento en el logro de ser mejor persona.

AGRADECIMIENTO

A la Universidad Nacional del Callao por haberme permitido estudiar y concluir los estudios de la primera maestría realizada en la Facultad de Ciencias Económicas en la especialidad de INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA UNIVERSITARIA.

A mi alma mater, la Universidad Nacional Mayor de San Marcos y a la Facultad de Ciencias Físicas por haberme formado académicamente en sus aulas y por tener el privilegio de recibir los conocimientos de una Educación Superior que fue útil y guía en mis esfuerzos por ser cada vez mejor.

Estoy en deuda con los maestros de las diferentes áreas académicas de física pues con el aporte de sus exposiciones y de sus análisis en temas relacionados a esta tesis pude aclarar y superar las dificultades que se presentaron en este trabajo de investigación.

ÍNDICE

RESUMEN	4
ABSTRACT	6
INTRODUCCIÓN.....	8
I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	10
1.1 Descripción de la realidad problemática	10
1.1.2 <i>Problemas Específicos:</i>	12
1.2 Objetivos	12
1.2.1 <i>Generales</i>	12
1.2.2 <i>Específicos</i>	12
1.3 Justificación	13
1.3.1 <i>Teórica</i>	13
1.3.2 <i>Metodológica</i>	13
1.3.3 <i>Científica</i>	13
1.4 Delimitantes de la Investigación	13
1.4.1 <i>Teórica</i>	13
1.4.2 <i>Temporal</i>	14
1.4.3 <i>Espacial</i>	14
II. MARCO TEÓRICO	15
2.1 Antecedentes	15
2.1.1 <i>Antecedentes Internacionales</i>	15
2.1.2 <i>Antecedentes Nacionales</i>	16
2.2 Bases Teóricas	17
2.2.1 <i>Teoría De Campo Central</i>	17
2.2.2 <i>Estadística de Fermi-Dirac</i>	23
2.2.3 <i>Energía de Fermi</i>	25
2.2.5 <i>La Ecuación de Onda de Dirac</i>	33
2.2.6 <i>Interacción de Intercambio: Gas de electrones libres</i>	46
2.2.7 <i>Interpretación del Término de Intercambio</i>	48
2.2.8 <i>Aplicación al Gas de Electrones Libres</i>	54
2.2.9 <i>Cálculo de la Distribución P2 (τ_1, τ_2)</i>	56
2.2.10 <i>Cálculo de la Densidad de Intercambio Promedio</i>	57

2.2.11	<i>Cálculo del Término de Energía Potencial de Intercambio</i>	59
2.2.12	<i>Aplicaciones al Cálculo de Orbitales Electrónicas Atómicos</i>	62
2.3	Marco Conceptual.....	64
2.4	Definición de Términos.....	64
2.4.1	<i>Método teórico de la mecánica cuántica,</i>	64
2.4.2	<i>Niveles de energía</i>	65
2.4.3	<i>Modelo de Thomas-Fermi</i>	65
2.4.4	<i>Función de Onda</i>	65
2.4.5	<i>Campo Central</i>	65
2.4.6	<i>Potencial de Thomas-Fermi</i>	66
2.4.7	<i>Ionización Positiva</i>	66
III.	HIPÓTESIS Y VARIABLES.....	67
3.1	Hipótesis General.....	67
3.2	Hipótesis Específica.....	67
3.3	Operacionalización De Variables.....	68
IV.	METODOLOGÍA DEL PROYECTO.....	69
4.1	Diseño metodológico.....	69
4.2	Método de investigación.....	69
4.3	Población y muestra.....	69
4.4	Lugar de estudio.....	69
4.5	Técnicas e instrumentos para la recolección de la información.....	69
4.6	Análisis Y Procesamiento De Datos.....	69
4.7	Aspectos Éticos en Investigación.....	70
5.1	Resultados Descriptivos.....	71
5.2	Resultados Inferenciales.....	71
5.3	Otro tipo de resultados.....	71
5.3.1	<i>Construcción de la Tabla de Potenciales</i>	71
5.3.2	<i>Método numérico para el cálculo de la ecuación diferencial</i>	80
5.3.3	<i>Proceso de Integración de la Ecuación de Onda</i>	86
VI.	DISCUSIÓN DE RESULTADOS.....	91
6.1	Contrastación y Demostración de las Hipótesis con los Resultados.....	91
6.2	Contrastación de los resultados con otros estudios similares.....	91
6.3	Responsabilidad Ética.....	91
IX.	REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS.....	95

ANEXO 1	97
Matriz de Consistencia	97
ANEXO 2	98
UNIDADES ATÓMICAS	98
ANEXO 3	99
Solución general de la ecuación de Thomas- Fermi.....	99
ANEXO 4	102
PROGRAMA PARA CALCULAR EL POTENCIAL ESTADÍSTICO DE FERMI-THOMAS	102
ANEXO 5	111
CÁLCULO DE LA TABLA DEL POTENCIAL CENTRAL DEL ÁTOMO DE BARIO	111
ANEXO 7	157
TEOREMA DE TAYLOR	157
ANEXO 8	158
MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE ORDEN 4.....	158

RESUMEN

El presente trabajo de investigación tiene como propósito, determinar las funciones de onda de campo central utilizando el potencial de Thomas-Fermi modificado, para los átomos en diferentes estados de ionización positiva, la misma que contiene los procedimientos siguientes:

1. DE LOS CONCEPTOS TEÓRICOS

- 1.1 Teoría del campo central
- 1.2 Estadística de Fermi-Dirac
- 1.3 Energía de Fermi
- 1.4 La teoría de Fermi-Thomas
- 1.5 La ecuación de onda de Dirac
- 1.6 La interacción de intercambio

2. DE LAS APLICACIONES

- 2.1 Interpretación del término de intercambio
- 2.2 Aplicación al gas de electrones libres
- 2.3 Cálculo del término de la energía potencial de intercambio
- 2.4 Aplicaciones al Cálculo de Orbitales Electrónicos Atómicos

3. DE LOS RESULTADOS

- 3.1 Construcción de la Tabla del Potencial
- 3.2 Método numérico para el cálculo de la solución de la ecuación diferencial:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] y(x) = [E] y(x)$$

3.3 Proceso de integración numérica de la componente radial $G(r)$ de la función de onda no relativista.

El análisis permitió demostrar que en el cálculo de las funciones de onda de campo central utilizando el potencial de Thomas-Fermi modificado para átomos en diferentes estados de ionización positiva, los resultados obtenidos se encuentran comprendidos dentro de la aproximación esperada que es del orden de 10^{-6} en comparación con los valores experimentales que son de mayor precisión.

ABSTRACT

The purpose of this research work is to determine the central field wave functions using the modified Thomas-Fermi potential for atoms in different positive ionization states, which contains the following procedures:

1. OF THEORETICAL CONCEPTS

- 1.1. Central field theory
- 1.2. Fermi–Dirac statistics
- 1.3. Fermi energy
- 1.4. The Fermi-Thomas theory
- 1.5. The Dirac wave equation
- 1.6. The exchange interaction

2. OF THE APPLICATIONS

- 2.1. Interpretation of the exchange term
- 2.2. Application to free electron gas
- 2.3. Calculation of the potential energy exchange term
- 2.4. Applications to the Calculation of Atomic Electronic Orbitals

3. FROM THE RESULTS

- 3.1. Construction of the Potential Table
- 3.2. Numerical method for calculating the solution of the differential equation:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] y(x) = [E] y(x)$$

- 3.3. Numerical integration process of the radial component $G(r)$ of the non-relativistic wave function.

The analysis allowed us to demonstrate that in the calculation of the central field wave functions using the modified Thomas-Fermi potential for atoms in different states of positive ionization, the results obtained are within the expected approximation, which is of the order of 10^{-6} compared to the experimental values that are of higher precision.

INTRODUCCIÓN

El presente trabajo tiene como objetivo obtener un modelo sencillo apoyado en el CÁLCULO DEL TÉRMINO DE ENERGÍA POTENCIAL DE INTERCAMBIO que permita determinar funciones de onda de campo central y su energía correspondiente para átomos en diferentes estados de ionización y que serán de utilidad en Espectroscopía.

El potencial utilizado para el cálculo de la distribución espacial de potenciales atómicos es el potencial estadístico de FERMI-THOMAS modificado; en el cual se consideran a los electrones en un átomo como una completa degeneración del gas de electrones bajo la influencia del campo Coulombiano creado por la carga nuclear, donde el efecto de cambio de fuerzas no es tomado en cuenta y la temperatura de los electrones y el núcleo es tomado como en cero absoluto, $T=0$. Con esta simplificación podemos encontrar una función de potencial universal aplicable a todos los números atómicos, Z , con un simple cambio en la escala de dimensión lineal y se considerará una simetría radial, lo que implica tomar al potencial únicamente como una función de r y usando la ecuación de Poisson y la teoría estadística de FERMI-DIRAC se calculará la distribución del potencial para cualquier átomo neutro y en cualquier estado de ionización.

El presente trabajo ha sido dividido en tres partes:

La primera que comprende una introducción teórica y la generalización del método a todo átomo neutro teniendo en cuenta la ECUACIÓN DE ONDA DE DIRAC, además la creación de un algoritmo que permita confeccionar una

tabla de potenciales, la cual sirve como punto de partida para determinar la función de onda y su autovalor.

La segunda parte trata de la explicación del método de integración utilizado para calcular la parte radial de la función de onda, llamado MÉTODO ITERATIVO que sirve para determinar el autovalor de la función de onda; y el grado de precisión con que lo hace está basado en el MÉTODO DE RUNGE KUTTA DE 4TO. ORDEN con CORRECTOR PREDICTOR.

La tercera parte se concreta a presentar los resultados para los siguientes átomos: Hierro, Bario y Uranio que se compararán con los valores experimentales (1) que son de mayor precisión.

- (1) D. Strominger et al (1958) Table of Isotopes, .Reviews of Modern Physics, Vol 30 , N°2 , Parte 2 , Tabla IV Energías de Enlace de electrones atómicos., pp 594 – 596

I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 Descripción de la realidad problemática

El problema que debe resolverse en el presente trabajo de investigación tiene relación con la inclusión del potencial central de Thomas-Fermi modificado en la ecuación de Schrödinger y el grado de complejidad que se presenta con el uso de sistemas físicos complejos, así como la predicción de fenómenos relacionados con la estructura nuclear, la dinámica atómica y molecular, y las interacciones de partículas subatómicas. Al respecto consideramos que una simplificación en los cálculos complejos que se realizan, no significa menoscabar la utilidad de la precisión del cálculo realizado y que va a ser de gran utilidad en la ciencia.

Aun cuando disponemos de métodos diferentes para evaluar la energía de enlace de los electrones en el estado base como el método de Campos Autoconsistentes Separados, el método de perturbación de muchos cuerpos; nos centraremos en los métodos más usados por su optimización en esfuerzos computacionales y su consideración de efectos físicos que hagan más compatibles los modelos físicos con los resultados experimentales: El método de Campo Autoconsistente de Hartree-Fock y la teoría del Funcional de la Densidad. Ambas técnicas comenzaron a desarrollarse poco después de la obtención de la ecuación de Schrödinger en 1926.

En la investigación de la interacción de la radiación electromagnética con la materia es necesario contar con funciones de onda de los átomos para poder explicar en forma cualitativa y cuantitativa los efectos de esta interacción.

Para este fin fue conveniente contar con herramientas matemáticas que permitan calcular estas funciones de onda. El método de Hartree-Fock es una aproximación que realiza algunas simplificaciones para lograr la solución de esta ecuación, introduciendo el potencial autoconsistente el cual considera que cada electrón se mueve en un potencial central creado por el núcleo y el resto de electrones. El determinante de Slater que es la expresión que describe a la función de onda de un sistema multifermiónico idéntico y que satisface los requerimientos de antisimetría subsecuentemente el principio de exclusión de Pauli

El potencial utilizado para el cálculo de la distribución atómica de potenciales es el POTENCIAL ESTADÍSTICO DE THOMAS-FERMI modificado; en el cual se consideran a los electrones en un átomo neutro como una completa degeneración del gas de electrones bajo la influencia del campo coulombiano creada por los núcleos.

Con esta simplificación podemos encontrar una función de potencial universal aplicable a todos los números atómicos, Z , por un simple cambio en la escala de dimensión lineal. Se considera una simetría radial, lo que implica tener al potencial únicamente como una función de r y usando la ecuación de Poisson y la teoría estadística de Fermi-Dirac se calculará la distribución del potencial para cualquier átomo neutro o ionizado.

Formulación del problema

1.1.1 Problema General:

¿Cuáles serán las funciones de onda y los niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante la aplicación del potencial de Thomas-Fermi modificado en la ecuación de Schrödinger

1.1.2 Problemas Específicos:

¿Cuáles serán las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante el método de campo autoconsistente (Método de Hartree-Fock)?

¿Cuáles serán las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante la aplicación del Término de Intercambio?

1.2 Objetivos

1.2.1 Generales

Determinar las funciones de onda y los niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante el Método de Campo Autoconsistente.

1.2.2 Específicos

Determinar las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante la aplicación del método estadístico corrector-predictor.

Determinar las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante la aplicación del término de intercambio.

1.3 Justificación

1.3.1 Teórica

Contribuir con un método para el cálculo de las funciones de onda de campo central.

1.3.2 Metodológica

Confeccionar una tabla de potenciales apoyado en la teoría de Thomas-Fermi. Esto se logra con la creación de un algoritmo que permita el cálculo de estos potenciales.

1.3.3 Científica

Los resultados serán usados en la ecuación de Dirac para que a través de su solución se pueda determinar el grado de precisión al ser comparados con otros métodos más elaborados.

1.4 Delimitantes de la Investigación

1.4.1 Teórica

Esta investigación se fundamenta en el estudio detallado de la teoría dada por Thomas-Fermi para la elaboración del potencial estadístico correspondiente y del estudio de la ecuación de Dirac para la determinación de los resultados finales.

1.4.2 Temporal

El estudio es de tipo longitudinal, se inicia en junio de 2023 y culmina en octubre de 2023.

1.4.3 Espacial

El proyecto de investigación está comprendido dentro del ámbito de la Física Teórica, desarrollado en la Universidad Nacional del Callao.

II. MARCO TEÓRICO

2.1 Antecedentes

2.1.1 *Antecedentes Internacionales*

Pueyo (2015), realiza el trabajo de tesis de Grado de maestro “Un Método para el Cálculo de la Mejor Función de Interacción Electrón-Electrón para un Funcional de Intercambio y Correlación Dado”, su objetivo fue mejorar formulaciones de una manera alternativa, estudiando la relación entre la forma del potencial de interacción electrónica y el funcional de intercambio y correlación, donde se construye un código que permite investigar numéricamente este problema.

Segura (2007), en su trabajo calcula la distribución de carga y energía de afinidad del ión H^- en el modelo atómico de Thomas-Fermi con corrección de Amaldi. El modelo admite la existencia de este ión simple con una energía de afinidad de 2.64 eV la cual, aunque excesiva con respecto al valor experimental (0.77 eV), se halla por debajo de la energía calculada con el programa de aplicación de DFT, ATOM 3.2, en LDA. Esto abre un interrogante sobre el límite de aplicabilidad de esta teoría hacia átomos livianos.

Buj (2015), en su trabajo aborda el funcional de intercambio y correlación de varios electrones con formulaciones aproximadas. Contribuye con mejora de soluciones o formulaciones aproximadas más óptimas, dado que hasta el momento no existían formulaciones únicas para dar con la solución exacta, construye un código que permite investigar numéricamente este problema.

Carbajal (2017), en su trabajo realiza una aproximación numérica de KLI a la funcional OEP que permite:

Evaluar el intercambio o exacto (EXX) en el marco de la teoría funcional de densidad, implementa un programa para calcular la estructura electrónica en su estado fundamental para sistemas atómicos usando DFT.

Contribuye con la formulación de dos métodos: el método de ondas planas aumentadas (APW), y el método de pseudopotenciales semiempíricos (EPM)

2.1.2 Antecedentes Nacionales

(Cabrera Arista, 2023), en su trabajo de tesis se determina la estructura electrónica y la energía total de la aleación antimonio de aluminio (AlSb) para lo cual se resolvió la ecuación de Schrödinger con el método (LMTO) para esta red cristalina. Se usó un potencial con base en la teoría del funcional de la densidad (DFT). Obtenido los autovalores de la energía y con la distribución de carga electrónica de la red cristalina calculada previamente, se determinó la energía total la cual resultó con un valor mínimo que correspondiente a la pequeña fracción de la carga electrónica externa de los átomos.

Arotaipe Ala (2019), en su tesis se traza como objetivo encontrar el valor del potencial de ionización para los átomos: oro, cobre y plata: Concluye una mejor aproximación al valor del potencial de ionización calculado para los átomos de oro, cobre y palta, mediante electrodinámica cuántica variacional.

Ramos Alvarado (2013), en su tesis estudia ALZr-B2 a través de la energía total y del potencial total (FP-LAPW) utilizando el paquete Wien 2k-10,

para ello se hubo que optimizar los parámetros k , RK_{max} y f_{max} , para el uso del método FP-LAPW.

2.2 Bases Teóricas

2.2.1 Teoría De Campo Central

El estudio de los átomos con varios electrones es un problema que encierra una dificultad de principio, pues para el movimiento de varios electrones que interactúan entre sí, no existe una ecuación relativista exacta como lo es la ecuación de Dirac para el movimiento de un solo electrón. La repulsión electrostática y la interacción magnética entre los electrones de los átomos es muy importante y a la vez compleja, pues aparecen nuevos términos identificables como interacciones espín-espín, espín de un electrón con la órbita de otro; por lo que su estudio a través de la mecánica cuántica es complicado.

Sin embargo, utilizando hamiltonianos más sencillos y la descripción aproximada de los sistemas atómicos trataremos de vencer las dificultades matemáticas que encierra la ecuación de Schrödinger como es el hecho de tener la función de onda, un número muy grande de variables, lo que hace imposible pensar en su solución numérica.

Por esta razón mediante aproximaciones sucesivas se estudiará un modelo de partículas independientes situados en la región de un campo central permitiendo así un desarrollo teórico razonable de los átomos.

Si consideramos un átomo con carga eléctrica $+Ze$ en el núcleo y rodeado de Z electrones de carga $-e$ el hamiltoniano para la interacción eléctrica se escribirá como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{i < j}} \quad (1)$$

Siendo el primer término del segundo miembro la suma de las energías cinéticas de todos los electrones y ∇_i^2 es el operador de Laplace referido al electrón i , el segundo término es la suma de las energías potenciales en el campo producido por el núcleo donde r_i es la distancia de ese electrón al núcleo y el tercero, la suma de las energías mutuas de repulsión de todos los pares de electrones siendo r_{ij} la distancia entre el electrón i y el electrón j .

La expresión anterior escrito en unidades atómicas permite al hamiltoniano tomar la forma:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Z}{r_i} + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{i < j}} \quad (1')$$

y la ecuación de Schrödinger se escribirá como:

$$H\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = E\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (2)$$

donde $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ es la función de onda que depende del parámetro r_i que representa la posición de los electrones con respecto a un sistema de coordenadas; así, por ejemplo, para el cobre que tiene 29 electrones, debemos considerar una función de onda de 87 coordenadas cuyo cálculo a pesar de considerar simetrías y aproximaciones que reducen considerablemente la dificultad, es complicado.

Debido a este hecho comenzaremos la aproximación empezando por una simplificación; considerando que el núcleo atómico por su gran carga eléctrica respecto a la carga eléctrica de los electrones tendrá un papel determinante y

que el comportamiento colectivo de los electrones podrá representarse por una nube de carga promedio.

La hipótesis fundamental del modelo atómico de campo central consiste en suponer que cada electrón se mueve en el campo central producido por el núcleo atómico y por otro potencial central medio que represente el efecto de los demás electrones sobre él. Dicho de otro modo, cada electrón se mueve debido a una fuerza de atracción de Coulomb proveniente del núcleo de carga $+Ze$ y a fuerzas de repulsión de Coulomb ejercidas por los otros $Z-1$ electrones, además de otras fuerzas que dependen del impulso angular de espín, que son más débiles que las producidas por las cargas, debido a esto se ignorará la interacción que existe entre el movimiento de cada par de electrones; por lo que la ecuación (1') para el hamiltoniano puede tomar la forma:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V_i(r_i) \quad (3)$$

Despreciándose el término $\sum_{i < j} \frac{1}{r_{i < j}}$ que representa la interacción entre electrones ya que sólo así la ecuación de Schrödinger se puede separar en un conjunto de Z ecuaciones donde en cada una intervienen las coordenadas de un solo electrón.

En la ecuación (3), $V_i(r_i)$ es la energía potencial del electrón i en el campo producido por el núcleo y los demás electrones, esto es, cada electrón se mueve independientemente en un potencial neto $V_i(r_i)$ esféricamente simétrico, donde r es la coordenada radial del electrón respecto al núcleo. Este potencial es la suma del potencial de atracción de Coulomb esféricamente simétrico debido al

núcleo y un potencial de repulsión esféricamente simétrico que representa el efecto promedio de las fuerzas de repulsión de Coulomb entre el electrón y los otros Z-1 electrones.

El potencial de repulsión promedio depende de la densidad (de probabilidad radial promedio) de los electrones y su cálculo estará condicionado a que el potencial promedio de repulsión sea auto consistente. Esto es, si calculamos las densidades electrónicas (de probabilidad) con el potencial de repulsión promedio correcto y evaluamos entonces un potencial de repulsión promedio a partir de ellas, es necesario que el potencial con el que terminamos sea idéntico al potencial inicial.

El hamiltoniano de la ecuación (3) nos permite escribir la ecuación de Schrödinger como:

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_i V(r_i) \right] \psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = E \psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (4)$$

Donde ψ y E son términos separables, lo cual permite escribir:

$$\psi = \varphi_a(r_1) \varphi_b(r_2) \dots \varphi_n(r_N) \quad (4')$$

$$E = E_a + E_b + \dots + E_n \quad (4'')$$

Así, cada una de las funciones propias $\varphi_j(r_i)$ y valores propios de la energía E_j representarán una solución de la ecuación de Schrödinger por lo que:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi_j(r) = E_j \varphi_j(r)$$

Es la expresión que describe el movimiento de un solo electrón en el campo central. Estas funciones de onda individuales representan los orbitales del átomo.

Al considerar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, esto es, no interesando el movimiento de traslación del átomo, describiremos a éste en un marco de referencia en el cual el centro de masa se encuentra en reposo y debido a que el potencial V es tomado como una función de la coordenada radial exclusivamente, es posible separar la función φ_j en tres ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma:

$$\varphi_{nlm\mu}(\vec{r}, \vec{s}) \equiv |nlm\mu, \vec{r}, \vec{s}\rangle R_{nl}(\vec{r}) Y_{lm}(\theta, \phi) \chi_{\mu}(\vec{s})$$

Siendo “n” el número cuántico principal, “l” el número cuántico del momento angular orbital, “m” el número cuántico magnético y “μ” la proyección del espín.

Los autovalores de la energía dependen del número cuántico principal n y del número cuántico de momento angular l, pero no de la proyección m de este último, ni del espín μ sobre una dirección privilegiada, debido a que en el hamiltoniano de la expresión (3) tal dirección privilegiada no existe. Este análisis se ha hecho teniendo en cuenta, en general, que el potencial V no es un potencial Coulombiano. Sin embargo, es conveniente observar que si se tiene un potencial Coulombiano, la forma de las funciones propias depende de los valores de los números cuánticos n, l, m, μ; los valores propios dependen sólo del número cuántico n. Ya que, para un valor dado de n, hay en general diferentes valores posibles para l y “m”. Se presentarán situaciones en las que dos o más funciones propias totalmente diferentes estén degeneradas puesto

que corresponden al mismo valor propio. Se presenta la degeneración respecto a m siempre que el potencial dependa exclusivamente de r , mientras que la degeneración respecto a l es una consecuencia de la forma como el potencial depende de r .

La función de onda $\psi(r_i)$ de la expresión (4'), si bien es solución de la ecuación de Schrödinger no es aceptable físicamente porque los electrones son fermiones y la función de onda que describa este conjunto debe ser antisimétrica o sea aquella que cambia de signo cuando se permuta un par cualquiera de conjuntos completos de coordenadas de dos partículas. Al permutar pares de coordenadas de la función producto se obtiene una nueva solución de la ecuación de Schrödinger para la misma energía lo que significa que cualquier combinación lineal de estas funciones producto permutadas seguirá siendo solución de la ecuación de Schrödinger para la misma energía. Por lo que si consideramos en particular el determinante de Slater formada por la combinación lineal de las funciones, tendremos:

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_a(x_1)\varphi_a(x_2)\dots\dots\varphi_a(x_N) \\ \varphi_b(x_1)\varphi_b(x_2)\dots\dots\varphi_b(x_N) \\ \vdots \\ \varphi_N(x_1)\varphi_N(x_2)\dots\dots\varphi_N(x_N) \end{vmatrix}$$

donde x_i representa a las tres variables espaciales \vec{r}_i y a la variable de espín \vec{s}_i ; y los subíndices de los orbitales indican el conjunto de los cuatro números cuánticos n, l, m, m_s de cada orbital. La raíz cuadrada del factorial del número de orbitales se introduce para que el determinante este normalizado, si lo estaba cada orbital. Por las propiedades de los determinantes la permutación

de coordenadas (permutación de dos columnas) hace que la función de onda cambie de signo por lo que el determinante de Slater es una función de onda antisimétrica; además para que este determinante no se anule es preciso que todos los orbitales sean distintos en el sentido de que deben diferir por lo menos en uno de los cuatro números cuánticos, requisito de antisimetría de las funciones de onda conocida con el nombre de principio de exclusión de Pauli. (Slater, 1928)

2.2.2 Estadística de Fermi-Dirac

La estadística de Fermi-Dirac es aplicada a partículas indiscernibles que cumplen el principio de exclusión y su aplicación más importante está en la teoría de libre elección de los metales.

Consideremos que cada estado cuántico corresponde a una celda en el espacio físico y puede estar ocupado como máximo por una partícula. Si existen n_i partículas, tendremos n_i celdas llenas y si hay g_i celdas que tienen la misma energía ϵ_i entonces habrán $(g_i - n_i)$ celdas vacantes. Las formas como se distribuyen (permutaciones) las g_i celdas son de $g_i!$ maneras diferentes, pero las permutaciones $n_i!$ de las celdas llenas entre sí carecen de sentido puesto que las partículas son indiscernibles y las permutaciones $(g_i - n_i)!$ de las celdas vacantes tampoco tienen sentido, puesto que no están ocupadas.

Considerando que la probabilidad de distribución es el número total de permutaciones posibles dividido por el número total de permutaciones sin sentido, vemos que el número de agrupaciones discernibles de partículas entre las celdas es:

$$\frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}$$

Y la probabilidad P de la distribución total de partículas es el producto

$$P = \pi \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}$$

Tomando logaritmo a ambos miembros:

$$L_n P = \sum [L_n g_i! - L_n n_i! - L_n (g_i - n_i)!]$$

Y teniendo en cuenta la fórmula de Stirling:

$$L_n N! = N L_n N - N$$

Podemos escribir:

$$L_n P = \sum [g_i L_n g_i - n_i L_n n_i - (g_i - n_i) L_n (g_i - n_i)]$$

Si la distribución representa la máxima probabilidad debe cumplirse:

$$\frac{dL_n P}{dn_i} = 0$$

Por lo que, teniendo en cuenta la conservación del número de partículas:

$$\sum dn_i = 0 \quad \text{ó} \quad -\alpha \sum dn_i = 0$$

Y la conservación de la energía:

$$\sum u_i dn_i = 0 \quad \text{ó} \quad -\beta \sum u_i dn_i = 0$$

Se obtiene:

$$\sum [-L_n n_i + L_n (g_i - n_i) - \alpha - \beta u_i] dn_i = 0$$

De donde se deduce que:

$$-L_n n_i + L_n (g_i - n_i) - \alpha - \beta u_i = 0$$

$$\text{ó } L_n \left[\frac{g_i - n_i}{n_i} \right] = \alpha + \beta u_i$$

De donde:

$$\frac{g_i}{n_i} - 1 = e^\alpha e^{\beta u_i}$$

Por lo que:

$$n_i = \frac{g_i}{e^\alpha e^{u_i/kT} + 1}$$

Siendo:
$$\beta = \frac{1}{kT}$$

n_i : número de partículas con energía u_i

g_i : número de estados con energía u_i

Esta expresión representa la ley de distribución estadística de Fermi-Dirac para un sistema formado por un “gas” de partículas que se mueven libremente sin interacción y se encuentran confinadas en una región.

Esta ley de distribución estadística permite por ejemplo describir algunas características importantes del comportamiento de los electrones confinados en un átomo y también para describir ciertas características del movimiento de los protones y neutrones confinados en el núcleo. (Gombas, 1963).

2.2.3 Energía de Fermi

Consideremos un sistema formado por partículas idénticas que pueden ser descritas por funciones antisimétricas moviéndose libremente sin interacción

y confinadas en una determinada región. Cada partícula se mueve independientemente de las demás en un potencial constante que asumiremos igual a cero dentro de una cierta región y que en las fronteras es mayor (infinitamente grande) que la energía total de las partículas.

La ecuación de Schrödinger para cada una de las partículas es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E \psi$$

con $\psi(x,y,z) = 0$ en las fronteras. Además, esta función puede ser escrita como:

$$\psi(x,y,z) = X(x) Y(y) Z(z)$$

Y corresponde al movimiento de una de las partículas idénticas que forma una onda estacionaria con nodos en las fronteras de la región. Por lo que es posible escribir las siguientes expresiones:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} = E_x X(x)$$

donde $X(x) = 0$ en las fronteras

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y}{dy^2} = E_y Y(y)$$

donde $Y(y) = 0$ en las fronteras

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Z}{dz^2} = E_z Z(z)$$

donde $Z(z) = 0$ en las fronteras y también:

$$E_x = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n_x \quad E_y = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n_y \quad E_z = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n_z$$

donde a es la arista del cubo que representa la región que contiene las partículas idénticas de Fermi, y n_x, n_y, n_z el conjunto posible de números cuánticos.

Por lo tanto, la energía permitida para una de las partículas es:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} r^2$$

De lo cual se deduce que:

$$dE = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2} r \, dr \quad \text{y} \quad E^{1/2} = \frac{\pi \hbar}{2^{1/2} m^{1/2} a} r$$

siendo “ r ” la posición de un punto de la malla cúbica situada en un octante del sistema cartesiano.

Si asumimos que el total de números cuánticos es igual al número $N(r)$ dr de puntos entre las esferas concéntricas de radios r y $r + dr$, tendremos.

$$N(r) dr = \frac{1}{8} 4\pi r^2 dr = \frac{\pi r^2}{2} dr$$

$$N(r) dr = \frac{2^{1/2} \pi m^{1/2} a}{2\pi \hbar} E^{1/2} \frac{ma^2}{\pi^2 \hbar^2} dE$$

Puesto que el número de puntos debe ser igual al número de estados cuánticos, la expresión anterior puede reescribirse como:

$$N(r) dr = N(E) dE = \frac{m^{3/2} a^3}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} E^{1/2} dE$$

Expresión correcta para el número de estados cuánticos cuya energía se encuentra entre E y $E + dE$. Aquí se debe tener en cuenta el principio de exclusión, haciendo que no más de dos partículas pueden tener los mismos números cuánticos espaciales n_x, n_y, n_z ya que cada partícula tendrá el número cuántico de espín $m_s = \frac{1}{2}$ ó $-\frac{1}{2}$

Para el sistema con N partículas idénticas la energía mínima total se alcanza sólo cuando hay dos partículas en cada uno de los estados de energía entre 0 y E_f .

La energía de Fermi E_f se puede calcular si se tiene en cuenta que la integral de $2N(E)$ desde 0 hasta E_f sea igual al número de partículas del sistema. El factor 2 se toma en cuenta por el hecho de que existen dos partículas en cada estado cuántico espacial.

Luego:

$$N = \frac{2^{1/2} m^{1/2} a^3}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_f} E^{1/2} dE$$

$$= \frac{2^{1/2} m^{1/2} a^3}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{3} E_f^{3/2}$$

Así

$$E_f = 3^{2/3} \pi^{4/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

siendo V el volumen de la malla cúbica de lado a .

Finalmente:

$$E_f = 3^{2/3} \pi^{4/3} \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3}$$

donde ρ es el número de partículas por unidad de volumen. (Beiser, 2017)

2.2.4 La Teoría del Potencial de Fermi-Thomas

Esta teoría representa un método sencillo para determinar el potencial central aproximado bajo cuya acción se mueven los electrones de un átomo. Estos electrones son considerados como un gas de Fermi que se mueven

libremente sin interacción y de energía mínima, confinados en una región esférica bajo un potencial efectivo $U(r)$ simétricamente esférico.

Si consideramos un sistema con N partículas idénticas de Fermi, la energía mínima total entre $E = 0$ y $E = E_f$ (energía de Fermi), se alcanza sólo si hay dos partículas en cada uno de los estados de energía. Así, la energía de Fermi estará dada por la siguiente expresión:

$$E_f = 3^{2/3} \pi^{4/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

N : número partículas idénticas.

V : volumen donde se confina la partícula de masa “ m ” y energía E .

$$E_f = 3^{2/3} \pi^{4/3} \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3} \quad (1)$$

Siendo ρ el número de partículas por unidad de volumen.

Al suponer que la profundidad del potencial es tal que todos los niveles de energía están llenos, se tiene:

$$E_f = -U(r) \quad (2)$$

Condición que asegura una energía total mínima para el átomo. Además, asumimos que la distancia sobre la que $U(r)$ no varía apreciablemente es grande, comparado con las longitudes de onda de los electrones, lo que implica suponer la ubicación de un número considerable de éstos en una región finita del espacio donde $U(r)$ es aproximadamente constante.

En consecuencia, es posible aplicar los métodos de la mecánica estadística de electrones libres. Esta condición se satisface para valores grandes de Z , a excepción de las regiones muy cercanas o muy lejanas del centro.

Esta teoría será inaplicable cuando Z sea pequeño; en este caso $U(r)$ no podrá suponerse constante.

Consideremos un átomo de carga nuclear Z y sea $\phi(r)$ el potencial electrostático en un punto del átomo. La energía potencial $U(r)$ para un electrón en dicho punto será:

$$U(r) = -e\phi(r) \quad (3)$$

De la expresión Ec.(1) tenemos:

$$\rho(r) = \frac{2^{3/2}m^{3/2}}{3h^3\pi^2} [-U(r)]^{3/2} \quad (4)$$

Utilizando la ecuación de Poisson:

$$\nabla^2\phi = -4\pi\rho$$

Y reemplazando las expresiones (3) y (4) que, de aquí en adelante serán puestas en unidades atómicas, obtenemos:

$$\begin{aligned} \nabla^2\phi(r) &= 4\pi \frac{2^{3/2}}{3\pi^2} \phi(r)^{3/2} \\ \nabla^2\phi(r) &= \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \phi(r)^{3/2} \end{aligned} \quad (5)$$

Que representa la ecuación de Fermi-Thomas, donde, el potencial electrostático constituido por los electrones de un átomo satisface la ecuación diferencial mostrada.

Este potencial electrostático $\phi(r)$ puede expresarse (se asume simetría esférica) en la forma:

$$\phi(r) = \frac{Z}{r} \varphi(r) \quad (6)$$

donde Z es el número atómico y $\phi(r)$ una función a determinarse con la ecuación de Fermi-Thomas.

Las condiciones de frontera que la función $\phi(r)$ debe satisfacer son:

Cuando : $r \rightarrow 0$ $\phi(r) = 1$ lo que implica que el potencial electrostático será debido únicamente al núcleo, esto es:

$$r\phi(r) = \frac{Z}{r} \quad (7)$$

Cuando: $r \rightarrow \infty$ $\phi(r) = 0$

Lo que implica que el potencial electrostático es debido a la carga nuclear Z , blindada por la carga $-(Z - 1)$ de los otros electrones de un átomo neutro, en consecuencia:

$$r\phi(r) \rightarrow [Z - (Z - 1)]$$

$$\text{ó} \quad r\phi(r) \rightarrow 0$$

De esta aproximación se deduce que la teoría de Fermi-Thomas no será precisa cuando nos encontremos lejos del centro del átomo.

Es conveniente escribir la Ec.(5) en términos de la Ec.(6) y de la variable adimensional χ definida por:

$$\chi = k Z^{1/3} r \quad (8)$$

donde k es una constante a determinarse.

Puesto que el operador de Laplace para una simetría esférica es:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r$$

tendremos inicialmente para la Ec (5).

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \left[\frac{Z}{r} \varphi \right] = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \left[\frac{Z}{r} \varphi \right]^{3/2}$$

$$\frac{Z}{r} \frac{d^2}{dr^2} \varphi = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \frac{Z^{3/2}}{r^{3/2}} \varphi^{3/2}$$

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \frac{Z^{1/2}}{r^{1/2}} \varphi^{3/2}$$

luego, como:

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} = k^2 Z^{2/3} \frac{d^2\varphi}{d\chi^2}$$

Y teniendo en cuenta la relación de la Ec (8) veremos que:

$$k^2 Z^{2/3} \frac{d^2\varphi}{d\chi^2} = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \frac{Z^{1/2}}{k^{-1/2} Z^{1/6} \chi^{1/2}} \varphi^{3/2}$$

$$\frac{d^2\varphi}{d\chi^2} = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} k^{-3/2} \chi^{1/2} \varphi^{3/2}$$

De donde se deduce que:

$$k = \left[\frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \right]^{2/3} \quad r = \left[\frac{3\pi}{8\sqrt{2}} \right]^{2/3} Z^{-1/3} \chi = 0.885341 Z^{-1/3} \chi \quad (9)$$

Así, la nueva ecuación diferencial con las condiciones de frontera analizadas será:

$$\frac{d^2\varphi}{d\chi^2} = \chi^{-1/2} \varphi^{3/2} \quad (10)$$

Donde la función $\varphi(\chi)$ determina el potencial neto $\phi(r)$ Ec. (3) y la densidad de electrones $\rho(r)$ Ec. (4). La variable r relacionada con χ Ec.(9) es proporcional a $Z^{-1/3}$ y es la misma para todos los átomos, por lo que al

aumentar Z la escala radial disminuye en un factor $Z^{-1/3}$, esto nos lleva a deducir que las dimensiones de un átomo decrecen al aumentar Z .

Equations of State of Elements Based on the Generalized Fermi-Thomas Theory,(1948).

2.2.5 La Ecuación de Onda de Dirac

El saber que los electrones se mueven con gran rapidez comparable con la rapidez de la luz implica tener en cuenta los efectos relativistas y es necesario emplear la dinámica relativista de Einstein para describir su movimiento. Para lo cual se hace necesario que deba formularse una hamiltoniana tal que la ecuación de onda resultante sea una invariante relativista.

Esto implica que el momentum y la energía deben aparecer simétricamente ya que forman parte de un cuatrivector. Así, la energía total de la partícula libre se escribirá como:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

Puesto que: $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ ó $p^2 = -\hbar^2\nabla^2$

tendríamos la ecuación de onda para estados estacionarios, esto es:

$$(-\hbar^2\nabla^2 + m_0^2c^4)\psi = E^2\psi$$

expresión conocida como la ecuación de Klein-Gordon; y también la ecuación de onda en función del tiempo:

$$(-\hbar^2\nabla^2 + m^2c^4)\psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

En presencia de un campo de fuerzas se tendrá:

$$E = c(p^2 + m^2c^2)^{1/2} + V(x,y,z)$$

$$c^2p^2 + m^2c^2 = (E - V)^2$$

Por lo que la ecuación de onda que se obtiene de esta expresión, al aplicarse por ejemplo al átomo de hidrógeno da un resultado que coincide en el primer orden de aproximación.

Dirac ha propuesto otro procedimiento que no sólo da el valor correcto de los niveles de energía del hidrógeno, incluyendo automáticamente la carga de la interacción espín-orbita correcto. Su idea consiste en racionalizar la expresión:

$$E = c\sqrt{m^2c^2 + p^2}$$

Escribiéndola en la forma: $H = c\vec{\beta} \cdot \vec{p} + \alpha\mu c^2$

donde: $\vec{\alpha}$ y $\vec{\beta}$ son dos nuevos operadores cuyas propiedades se van a determinar, siendo μ la masa reducida.

Sin embargo, debe hacerse notar que la ecuación de Dirac no es generalizable a más de un electrón y con excepción del hidrógeno o iones análogos, los demás átomos deben estudiarse con hamiltonianos que sólo incluyen correcciones relativistas hasta un cierto orden.

En presencia de un campo central de fuerzas el hamiltoniano pasará a ser:

$$H = c\vec{\beta} \cdot \vec{p} + \alpha\mu c^2 - U(r)$$

$$\text{ó} \quad (-\alpha\mu c^2 - c\vec{\beta} \cdot \vec{p} + U(r))\psi = w\psi$$

donde: $\vec{\alpha}$ y $\vec{\beta}$ son los dos nuevos operadores con las propiedades que:

$$\alpha^2 = \beta_x^2 = \beta_y^2 = \beta_z^2 = 1$$

Además: $\alpha, \beta_x, \beta_y, \beta_z$ anticonmutan entre sí:

$$\alpha\beta_x + \beta_x\alpha = 0 \quad \beta_x\beta_y + \beta_y\beta_x = 0$$

$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$: E es el operador de cantidad de movimiento lineal.

$U(r)$: Es la energía potencial del electrón en el campo central

W : Es la energía total relativista que incluye la energía de reposo

(autovalor de la energía) puede ser positiva o negativa.

Los autovalores de los operadores $\vec{\alpha}$ y $\vec{\beta}$ son ± 1

$\vec{\alpha}$: representa lo que se denomina "aspecto" del electrón.

$\vec{\beta}$: está asociado con la velocidad de la partícula considerando que la

Velocidad es:
$$V_x = \frac{dx}{dt} = (i\hbar)^{-1} [x, H]$$

$$= (i\hbar)^{-1} c \beta_1 [x, p_x] = c \beta_1$$

Tendremos:
$$\vec{V} = c \vec{\beta}$$

Por lo tanto:
$$\vec{\beta} \text{ equivale a } \frac{\vec{V}}{c}$$

Explícitamente tenemos:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \beta_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \beta_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \beta_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

El operador $\vec{\beta}$ satisface la relación de conmutación

$$(\vec{\beta} \times \vec{\beta}, \vec{\beta} \times \vec{\beta}) = 4(\vec{\beta} \times \vec{\beta}) \times \vec{\tau}$$

Siendo $\vec{\tau}$ la diada unidad de la forma:

$$\vec{\tau} = \begin{pmatrix} ii & 0 & 0 \\ 0 & jj & 0 \\ 0 & 0 & kk \end{pmatrix}$$

Por lo tanto, el operador $\vec{\beta} \times \vec{\beta}$ se comporta como un operador de momento angular.

Definimos el operador \vec{S} como:

$$\vec{S} = -\frac{1}{4} i\hbar (\vec{\beta} \times \vec{\beta}), \text{ que satisface } [\vec{S}, \vec{S}] = -i\hbar \vec{S} \times \vec{\tau}$$

de manera que:

$$S_x = -\frac{1}{2} i\hbar \beta_y \beta_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Definimos el operador K como:

$$K = \alpha \left(\frac{2}{\hbar^2} \vec{L} \cdot \vec{S} + 1 \right); \quad \vec{L} \text{ momento orbital y } \vec{S} \text{ momento de espín del electrón}$$

que conmuta con el hamiltoniano de Dirac, siendo sus autovalores iguales a

$$k = \pm \left(J + \frac{1}{2} \right); \quad k: \text{ número cuántico relativista.}$$

De manera que los estados pueden indicarse en términos de los autovalores de $J, \vec{J}, \vec{J}, k, \alpha$; es decir (J, m_J, k, α) determinan el estado de un electrón, excepto por una función de la distancia radial.

Así, la función de onda, para el estado (J, m_J, k, ℓ) es:

$$\psi = \frac{F(r)}{r} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{J+m_J}{2J}} \phi \left(J - \frac{1}{2}, m_J - \frac{1}{2} \right) \\ \sqrt{\frac{J-m_J}{2J}} \phi \left(J - \frac{1}{2}, m_J + \frac{1}{2} \right) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{Cuando: } J = \ell + 1/2; k = J + 1/2$$

$$\psi = \frac{F(r)}{r} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{J-m_J+1}{2J+2}} \phi \left(J + \frac{1}{2}, m_J - \frac{1}{2} \right) \\ -\sqrt{\frac{J+m_J+1}{2J+2}} \phi \left(J + \frac{1}{2}, m_J + \frac{1}{2} \right) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{Cuando: } J = \ell - 1/2; k = -(J + 1/2)$$

Para el estado $(J, m_J, k, -\ell)$ es:

$$\psi = \frac{-iG(r)}{r} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{\frac{J+m_J}{2J}} \phi \left(J - \frac{1}{2}, m_J - \frac{1}{2} \right) \\ -\sqrt{\frac{J-m_J}{2J}} \phi \left(J - \frac{1}{2}, m_J + \frac{1}{2} \right) \end{pmatrix} \quad \text{Cuando: } J = \ell + 1/2; k = -(J + 1/2)$$

$$\psi = \frac{-iG(r)}{r} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{\frac{J-m_J+1}{2J+2}} \phi(J+\frac{1}{2}, m_J-\frac{1}{2}) \\ -\sqrt{\frac{J+m_J+1}{2J+2}} \phi(J+\frac{1}{2}, m_J+\frac{1}{2}) \end{pmatrix} \quad \text{Cuando: } J = \ell - 1/2 ; k = j + 1/2$$

La función $\phi(\ell, m_\ell)$ es un armónico esférico, es decir:

$$\phi(\ell, m_\ell) = Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi)$$

En cada caso la primera componente diferente de cero corresponde al electrón con espín $m_s = 1/2$, mientras que la segunda componente corresponde al electrón con espín $m_s = -1/2$. La ecuación diferencial relativista de Dirac relaciona las componentes de igual orientación del espín pero diferente valor del autovalor k .

Teniendo en cuenta las expresiones de las funciones de onda para los estados (J, m_j, k, ℓ) y $(J, m_j, k, -\ell)$ la solución más general de la ecuación de Dirac que corresponde a valores definidos por los autovalores (J, m_j, k) es:

$$\psi(J, m_j, k) = \psi(J, m_j, k, +\ell) + \psi(J, m_j, k, -\ell)$$

Quedando por encontrar las funciones $F(r)$ y $G(r)$. Esto se puede hacer reemplazando $\psi(J, m_j, k)$ en la ecuación de Dirac.

Antes de efectuar esta sustitución es necesario transformar el operador $-c\vec{\beta} \cdot \vec{p}$ que aparece en la ecuación de Dirac, para lo cual definimos:

$$\beta_r = \vec{r}_0 \cdot \vec{\beta} \quad \vec{r} = \frac{\vec{r}}{r}$$

Usando las identidades:

$$\vec{r}_0 = i \operatorname{sen} \theta \cos \theta + j \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \theta + k \cos \theta$$

$$\vec{\beta} = i \beta_x + j \beta_y + k \beta_z$$

Obtenemos:

$$\beta_r = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cos \theta & \operatorname{sen} \theta e^{-i\phi} \\ 0 & 0 & \operatorname{sen} \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \\ \cos \theta & \operatorname{sen} \theta e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ \operatorname{sen} \theta e^{i\phi} & -\cos \theta & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Donde se ha hecho uso de las relaciones para $\alpha, \beta_x, \beta_y, \beta_z$

Se puede comprobar que: $\beta_r^2 = \ell$

Ahora escribimos:

$$-c\vec{\beta} \cdot \vec{p} = -c\beta_r^2 \vec{\beta} \cdot \vec{p} = -c\beta_r \vec{r}_0 \cdot \vec{\beta} \vec{\beta} \cdot \vec{p}$$

$$\vec{\beta} \vec{\beta} = \vec{S} - \frac{2i}{\hbar} \vec{S} \times \vec{S}$$

Hacemos uso de la identidad:

Que se puede comprobar fácilmente usando la definición de:

$$\vec{S} = -\frac{1}{4} i \hbar \vec{\beta} \times \vec{\beta}$$

Luego tenemos:

$$-c\vec{\beta} \cdot \vec{p} = -c\beta_r \vec{r}_0 \cdot \left(\vec{S} - \frac{2i}{\hbar} \vec{S} \times \vec{S} \right) \cdot \vec{p}$$

$$\vec{r}_0 \cdot \vec{S} \cdot \vec{p} = \vec{r}_0 \cdot \vec{p} = p_r$$

$$\vec{r}_0 \cdot (\vec{S} \times \vec{S}) \cdot \vec{p} = \vec{r}_0 \times (\vec{S} \times \vec{p})$$

$$= -\vec{S} \cdot \frac{(\vec{r} \times \vec{p})}{r}$$

$$= -\frac{\vec{S} \cdot \vec{L}}{r}$$

$$-c\vec{\beta} \cdot \vec{p} = -c\beta_r p_r + \frac{2ic}{\hbar} \left(-\beta_r \frac{\vec{S} \cdot \vec{L}}{r} \right)$$

$$-c\vec{\beta} \cdot \vec{p} = ic\hbar\beta_r \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{2\vec{L} \cdot \vec{S}}{\hbar^2 r} \right)$$

Obtenemos:

donde hemos usado: $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ de donde $p_r = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$

También necesitamos las relaciones:

$$\begin{aligned} \sin \theta e^{i\phi} Y_{\ell m_\ell} &= -\sqrt{\frac{(\ell + m_\ell + 1)(\ell + m_\ell + 2)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}} Y_{\ell+1, m_\ell+1} \\ &+ \sqrt{\frac{(\ell - m_\ell)(\ell - m_\ell - 1)}{(2\ell + 1)(2\ell - 1)}} Y_{\ell-1, m_\ell+1} \end{aligned}$$

$$\cos \theta Y_{\ell m_\ell} = \sqrt{\frac{(\ell + m_\ell + 1)(\ell - m_\ell + 1)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}} Y_{\ell+1, m_\ell} + \sqrt{\frac{(\ell + m_\ell)(\ell - m_\ell)}{(2\ell + 1)(2\ell - 1)}} Y_{\ell-1, m_\ell}$$

$$\begin{aligned} \sin \theta e^{-i\phi} Y_{\ell m_\ell} &= \sqrt{\frac{(\ell - m_\ell)(\ell - m_\ell + 1)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}} Y_{\ell+1, m_\ell-1} \\ &- \sqrt{\frac{(\ell + m_\ell)(\ell + m_\ell - 1)}{(2\ell + 1)(2\ell - 1)}} Y_{\ell-1, m_\ell-1} \end{aligned}$$

Ahora podemos comprobar para:

$$k = -\left(J + \frac{1}{2}\right); \quad \ell = J - \frac{1}{2}; \quad m_\ell = m_j - \frac{1}{2}$$

$$\beta_r \psi(J, m_j, k-1) = -\frac{iG(r)}{r} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{J-m_j+1}{2J+2}} Y_{\ell, m_\ell} \\ -\sqrt{\frac{J+m_j+1}{2J+2}} Y_{\ell, m_\ell+1} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\beta_r \psi(J, m_j, k+1) = \frac{F(r)}{r} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{\frac{J+m_j}{2J}} Y_{\ell-1, m_\ell} \\ \sqrt{\frac{J-m_j}{2J}} Y_{\ell-1, m_\ell+1} \end{pmatrix}$$

También se pueden deducir expresiones para $k = J + 1/2$ sustituyendo la solución general de la función de onda, esto es:

$$\psi(J, m_j, k) = \psi(j, m_j, k+1) + \psi(J, m_j, k-1)$$

En la ecuación de Dirac, tenemos:

$$\psi(J, m_j, k) = \begin{pmatrix} \frac{F(r)}{r} \sqrt{\frac{J+m_j}{2J}} Y_{\ell-1, m_\ell} \\ \frac{F(r)}{r} \sqrt{\frac{J-m_j}{2J}} Y_{\ell-1, m_\ell+1} \\ -\frac{iG(r)}{r} \sqrt{\frac{J-m_j+1}{2J+2}} Y_{\ell, m_\ell} \\ \frac{+iG(r)}{r} \sqrt{\frac{J-m_j+1}{2J+2}} Y_{\ell, m_\ell+1} \end{pmatrix} \quad \text{Para: } \begin{cases} k = J + \frac{1}{2} \\ \ell = j + \frac{1}{2} \\ m_\ell = m_j - \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$\psi(J, m_J, k) = \begin{pmatrix} \frac{F(r)}{r} \sqrt{\frac{J+m_J}{2J}} Y_{\ell-1, m_\ell} \\ \frac{F(r)}{r} \sqrt{\frac{J-m_J}{2J}} Y_{\ell-1, m_\ell+1} \\ \frac{-iG(r)}{r} \sqrt{\frac{J-m_J+1}{2J+2}} Y_{\ell, m_\ell} \\ \frac{+iG(r)}{r} \sqrt{\frac{J-m_J+1}{2J+2}} Y_{\ell, m_\ell+1} \end{pmatrix} \quad \text{Para: } \begin{cases} k = -(J + \frac{1}{2}) \\ \ell = J + \frac{1}{2} \\ m_\ell = m_J - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Así, la ecuación de Dirac toma la forma:

$$(-\alpha \mu c^2 + i c \hbar \beta_r (\frac{\partial}{\partial r} - \alpha \frac{k-1}{r}) + U(r) - W) \psi = 0$$

Que es equivalente, para $k = -(J + \frac{1}{2})$ a la matriz :

$$\begin{bmatrix} \sqrt{\frac{J-m_J+1}{2J+2}} Y_{\ell, m_\ell} (-\mu c^2 \frac{F(r)}{r} + \frac{c \hbar}{r} (\frac{\partial G}{\partial r} + \frac{kG}{r}) + (U-W) \frac{F(r)}{r}) \\ -\sqrt{\frac{J+m_J+1}{2J+2}} Y_{\ell, m_\ell+1} (-\mu c^2 \frac{F(r)}{r} + \frac{c \hbar}{r} (\frac{\partial G}{\partial r} + \frac{kG}{r}) + (U-W) \frac{F(r)}{r}) \\ -i \sqrt{\frac{J+m_J}{2J}} Y_{\ell-1, m} (\mu c^2 \frac{G(r)}{r} - \frac{c \hbar}{r} (\frac{\partial F}{\partial r} - \frac{kF}{r}) + (U-W) \frac{G(r)}{r}) \\ -i \sqrt{\frac{J-m_J}{2J}} Y_{\ell-1, m_\ell+1} (\mu c^2 \frac{G(r)}{r} - \frac{c \hbar}{r} (\frac{\partial F}{\partial r} - \frac{kF}{r}) + (U-W) \frac{G(r)}{r}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

De donde se deduce que:

$$c \hbar (\frac{\partial G}{\partial r} + \frac{kG}{r}) + (U - \mu c^2 + W) F = 0$$

$$-c \hbar (\frac{\partial F}{\partial r} - \frac{kF}{r}) + (U + \mu c^2 - W) G = 0$$

Expresiones válidas para todos los valores de k . La auto energía W puede ser positiva (cerca de μc^2) o negativa (cerca de $-\mu c^2$). Para autovalores positivos ($W > 0$) escribiremos: $W = \mu c^2 + \epsilon$

Siendo ϵ la energía total del electrón en el tratamiento no relativista, y si introducimos unidades atómicas tenemos:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial r} + \frac{kG}{r}\right) = \alpha(2c^2 + \epsilon - U)F - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial r^2} - \frac{kF}{r}\right) = \alpha(\epsilon - U)G$$

La función $G(r) \gg F(r)$ corresponde a la parte radial de la función de onda no relativista. La función $G(r)$ satisface la ecuación de 2do orden:

$$-\frac{\partial^2 G}{\partial r^2} + \frac{k(k+1)}{r^2}G - \frac{\frac{dU}{dr}}{2c^2 - U + \epsilon} \left(\frac{dG}{dr} + \frac{kG}{r}\right) + 2UG - \alpha^2(U - \epsilon)^2 G = 2\epsilon G$$

Luego de calcular $G(r)$ se puede hallar $F(r)$. Se afirma que los términos de la función de onda $\psi(J m_j k)$ que contienen la función $G(r)$ constituyen la componente mayor. Para electrones ligados ($\epsilon < 0$), $G(r)$ satisface las condiciones de frontera siguiente:

$$G(0) = 0 \quad \lim_{r \rightarrow \infty} G(r) = 0$$

Una vez calculado $G(r)$, la función $F(r)$ se determina de la relación:

$$F(r) = \frac{c \left(\frac{\partial G}{\partial r} + \frac{kG}{r} \right)}{2c^2 + \epsilon - U}$$

Los términos de la ecuación diferencial de 2do. orden para $G(r)$ tienen el siguiente significado físico:

OPERADORES

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} \quad \text{Energía cinética radial}$$

$$\frac{k(k+1)}{2r^2} \quad \text{Energía cinética orbital}$$

$$-\frac{1}{2c^2 + \epsilon} \frac{dU}{dr} \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right) \quad \text{Energía de la interacción espín-orbita, incluye término de contacto.}$$

$$U(r) \quad \text{Energía potencial electrostática}$$

$$-\frac{1}{2} \alpha^2 (\epsilon - U)^2 \quad \text{Corrección relativista para tomar en cuenta la variación de la masa con la rapidez}$$

$$\epsilon \quad \text{Energía total (autovalor)}$$

Para autovalores negativos ($W < 0$) escribiremos: $W = -\mu c^2 + \epsilon$ y el sistema de ecuaciones se reduce a la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial r} + \frac{G}{r} &= \alpha(\epsilon - U) F \\ -\left(\frac{\partial F}{\partial r} - \frac{F}{r} \right) &= \alpha(\epsilon - U - 2c^2) G \end{aligned}$$

Y en este caso $F(r) \gg G(r)$

Eliminando la función $G(r)$ de las expresiones anteriores obtenemos la siguiente ecuación para $F(r)$:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{k(k-1)}{r^2} + \frac{\frac{dU}{dr}}{2c^2 + U - \epsilon} \left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r} \right) - \alpha^2 (U - \epsilon)^2 \right] F(r) = -\epsilon F(r)$$

Donde cada término tiene una interpretación física análoga al caso anterior.

En este caso la energía potencial eléctrica que actúa sobre el electrón es negativa $-U(r)$ y por lo tanto de carácter repulsivo. Deducimos que no hay posibilidad de tener electrones ligados $\epsilon < 0$, por cuanto el término $\epsilon > 0$ debe ser necesariamente positivo.

Por lo tanto $\epsilon < 0$ y $F(r)$ satisfacen las siguientes condiciones de frontera: $F(0) = 0$ $\lim_{r \rightarrow \infty} F(r) = \text{finito}$

Debe notarse que tanto en el caso de energías positivas ($W > 0$) o negativas ($W < 0$), las componentes mayor y menor de la función de onda poseen diferente paridad. Esto se puede apreciar en las relaciones que definen la función de onda a través de los armónicos esféricos $Y_{\ell, m_{\ell}}(\theta, \phi)$ contenidos en ellos. También se puede apreciar esto en la forma que tiene el término que representa la energía cinética orbital en cada caso, que depende del número cuántico orbital y se diferencian en una unidad.

Para la comparación se da el resultado de la aproximación obtenida por el método de perturbación para los niveles de energía para electrones ligados en átomos hidrogénicos:

$$\epsilon(n, k) = -\frac{Z^2}{2n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

$$k = \pm \left(J + \frac{1}{2} \right)$$

Donde n es el número cuántico principal. (Allen & L.Tassie, 1991)

2.2.6 Interacción de Intercambio: Gas de electrones libres

2.2.6.1 Generalidades.

Consideremos un sistema que contiene N electrones y carga eléctrica positiva contenida en los núcleos atómicos. El hamiltoniano del sistema viene dado por:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(r_i) \right] + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (1)$$

Donde \vec{p}_i es el operador de momento lineal del iésimo electrón y $V(\vec{r}_i)$ es el potencial producido por las cargas positivas.

Utilizando el método aproximado de solución de Hartree-Fock que considera a los electrones como partículas independientes. Sea $u(\tau)$ la función de onda normalizada de un electrón en un estado determinado, donde τ representa las coordenadas de posición \vec{r} y espín σ .

Tenemos:

$$u(\tau) = f(\vec{r})\chi(\sigma) \quad (2)$$

Donde $\chi(\sigma)$ es un espinor con:

$$\chi(1/2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi(-1/2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Además, para el producto escalar de dos funciones de onda tenemos:

$$\langle u_i^*(\tau)u_j(\tau) \rangle = \int f_i^*(\vec{r})f_j(\vec{r})dv\chi^*(\sigma_i)\chi(\sigma_f) = \delta_{ij} \quad (3)$$

Suponemos que los N electrones ocupan N estados diferentes y que la función de onda ψ del sistema viene dada por la matriz de Slater,

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{vmatrix} u_1(\tau_1) & \dots & u_1(\tau_N) \\ \vdots & & \vdots \\ u_N(\tau_1) & \dots & u_N(\tau_N) \end{vmatrix} \quad (4a)$$

Con:
$$\int \psi^* \psi d\tau, \dots, d\tau_N = 1 \quad (4b)$$

A fin de satisfacer el requerimiento de que, los electrones son fermiones.

Las ecuaciones de Hartree- Fock que satisfacen las funciones $U_i(\tau)$ corresponden a las ecuaciones de Euler-Lagrange que resultan de someter la funcional

$$\int \psi^* H \psi d\tau, \dots, d\tau_N \quad (5)$$

a la condición de que sea un extremo, para que se cumpla el requerimiento de la normalización, (Ec. 4b). La ecuación de Hartree-Fock para el i-ésimo electrón viene dado por:

$$H_1 u_i(\tau_1) + \left[\sum_k \int u_k^*(\tau_2) u_k(\tau_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2 \right] u_i(\tau_1) - \sum_k \left[\int u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2 \right] u_k(\tau_1) = E_i u_i(\tau_1) \quad (6)$$

donde
$$H_1 = \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \quad (7)$$

El segundo término de la izquierda de la Ec. (6) representa la energía potencial electrostática del i-ésimo electrón en la posición \vec{r}_1 debido a todos los N electrones, es decir, incluyendo la carga del i-ésimo electrón, cuya ecuación estamos considerando. El último término de la izquierda de esta Ec. (6) se denomina término de intercambio y tiene una forma peculiar, puesto que contiene sumandos que multiplican a la función $U_k(\vec{r}_1)$ en vez de $U_i(\vec{r}_1)$. Notemos

además que este término contiene un sumando, cuando $k = i$, que cancela el correspondiente sumando del segundo término y de esta manera corrige (por el requerimiento) que el i -ésimo electrón no puede actuar sobre sí mismo.

2.2.7 Interpretación del Término de Intercambio

Para formular una interpretación del término de intercambio, primero subdividiremos a la totalidad de la densidad de carga de los electrones en dos partes, de acuerdo a la orientación de su espín, ρ_+ , ρ_- , de manera que:

$$\rho_+ = -e \sum_k u_k^*(\vec{r}, 1/2) u_k(\vec{r}, 1/2) \quad (8a)$$

espín $\sigma = 1/2$

$$\rho_- = -e \sum_k u_k^*(\vec{r}, 1/2) u_k(\vec{r}, -1/2) \quad (8b)$$

espín $\sigma = -1/2$

$$\rho = \rho_+ + \rho_- \quad (8c)$$

La Ec.(6) se puede reescribir en la forma:

$$H_i u_i(\vec{r}, 1/2) + \left[\int \rho_-(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) dv_2 + \sum_k \int u_k^* \left(\vec{r}_2, \frac{1}{2} \right) \right]$$

espín $-k = 1/2$

$$u_k(\vec{r}_2, 1/2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) dv_2 \Big] u_i(\vec{r}_1, 1/2) - \sum \left[\int u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_2) \right]$$

$$\frac{e^2}{r_{12}} d\tau_2 u_k(\tau_2) = E_i u_i(\vec{r}_1, 1/2)$$

Consideremos a continuación el sumando del término de intercambio, teniendo en cuenta que $U_i(\tau_2)$ representa la función de onda del i -ésimo electrón en la posición \vec{r}_2 conservando su espín inicial.

$$\left[\int u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2 \right] u_k(\vec{r}_1, 1/2)$$

$$\left[\int u_k^*(\vec{r}_2, \sigma_k) u_i(\vec{r}_2, \sigma_i) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2 \right] u_k(\vec{r}_1, 1/2) = 0 \text{ si } \sigma_k \neq \sigma_i$$

Por lo tanto, el término de intercambio se reduce a:

$$-\sum_k \left[\int u_k^*(\tau_2) u_i^*(\tau_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2 \right] u_k(\vec{r}_1, 1/2) \quad \text{espín } k = -1/2 \quad (9)$$

y contiene sólo la contribución de los electrones cuyos espines son paralelos a los del i -ésimo electrón, por cuanto la integración sobre τ_2 , que incluye la variable de espín cancela los sumandos con espines diferentes.

Reescribimos la Ec. (6) en la forma equivalente:

$$H_i u_i(\tau_1) + \left[\sum_{k=1}^N \int u_k^*(\tau_2) u_k(\tau_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2 \right] u_i(\tau_1) -$$

$$\left[\sum_{k=1}^N \int \frac{u_i^*(\tau_1) u_k^*(\tau_2) u_k(\tau_1) u_i(\tau_2) + \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right)}{u_i^*(\tau_1) u_i(\tau_1)} d\tau_2 \right] u_i(\tau_1) = E_i u_i(\tau_1) \quad (10)$$

El término de intercambio aparece ahora en la forma convencional de un factor que es función de τ_1 que multiplica a $U_i(\tau_1)$. Este factor tiene la forma de una energía potencial producida por una densidad de carga de intercambio o de corrección, $\rho_{int}(\tau_2, \tau_1)$, dada por:

$$\rho_{int}^{(i)}(\tau_2, \tau_1) = -e \sum_{k=1}^N \frac{u_i^*(\tau_1) u_k^*(\tau_2) u_k(\tau_1) u_i(\tau_2)}{u_i^*(\tau_1) u_i(\tau_1)} \quad (11)$$

Que depende también de τ_1 y del estado del i-ésimo electrón de manera que el término de intercambio se puede escribir en la forma:

$$\left[\rho_{int}^{(i)}(\tau_2, \tau_1) \left(\frac{+e}{r_{12}} \right) d\tau_2 \right] u_i(\tau_1) \quad (12)$$

Que define una energía potencial de intercambio para un electrón de carga (+e) con función de onda $U_i(\tau_1)$.

Propiedades de $\rho_{int}(\tau_2, \tau_1)$

La carga total de intercambio viene dada por:

$$\int \rho_{int}^{(i)}(\tau_2, \tau_1) d\tau_2 = -e \sum_{k=1}^N \frac{u_i^*(\tau_1) u_i(\tau_1)}{u_i^*(\tau_1) u_i(\tau_1)} \int u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_2) d\tau_2$$

donde $\int u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_2) d\tau_2 \delta_{ki}$

por lo que $\int \rho_{int}^{(i)}(\tau_2, \tau_1) d\tau_2 = -e$ (13)

Es decir, igual a la carga de un electrón

$$\begin{aligned} \lim_{\vec{r}_2 \rightarrow \vec{r}_1} \rho_{int}(\tau_2; \tau_1) &= \lim_{\vec{r}_2 \rightarrow \vec{r}_1} -e \sum_{k=1}^N \frac{u_k^*(\vec{r}_1, \sigma_i) u_k(\vec{r}_2, \sigma_k) u_k(\vec{r}_2, \sigma_k) u_i(\vec{r}_2, \sigma_i)}{u_i^*(\tau_1) u_i(\vec{r}_1, \sigma_i)} \\ &= -e \sum_{k=1}^N f_k^*(\vec{r}_1) f_k(\vec{r}_1) \delta_{\sigma_k \sigma_i} = -e \sum_{k=1}^N f_k^*(\vec{r}_1) f_k(\vec{r}_1) \delta_{\sigma_k \sigma_i} = -e \sum_{k=1}^N u_k^*(\tau_1) u_k(\tau_1) \end{aligned}$$

espín k = espín y = $\rho + (\vec{r}_1)$ (14)

Donde se ha tenido en cuenta que el producto escalar de las funciones de espín involucra a los electrones en la misma posición ya sea en \vec{r}_2 ó \vec{r}_1 . Es

decir, en la posición \vec{r}_1 , la densidad de carga de intercambio contiene la contribución sólo de los electrones con espín paralelo al espín del primer electrón. Este resultado se interpreta en el sentido que, en la vecindad del primer electrón la densidad total de carga electrónica exhibe una depresión debido a la exclusión de electrones del mismo espín. El término de intercambio es responsable de introducir una corrección en la densidad de carga alrededor del primer electrón como consecuencia del principio de exclusión.

Tomando la posición \vec{r}_1 como referencia, tenemos que, a medida que \vec{r}_2 se aleja, $\rho_{int}(\tau_2, \tau_1)$ debe disminuir de tal manera que se cumpla la propiedad Ec. 14. Estos resultados permiten llegar a la siguiente conclusión, que alrededor del primer electrón se produce una depresión en la densidad de carga electrónica debido a la exclusión de todos los electrones del mismo espín. Esta depresión en carga o hueco se puede decir que se desplaza junto con el electrón. Se puede hacer un estimado del volumen que ocupa este hueco si suponemos que posee forma esférica y densidad de carga uniforme igual a $|\rho_+ + (\tau_1)|$, planteando la siguiente ecuación.

$$\frac{4}{3} \pi r_0^3 |\rho_+| = e \quad \text{o} \quad r_0 = \left[\frac{3e}{4\pi\rho_+} \right]^{1/3} \quad (15)$$

La energía potencial que produce este hueco para un electrón ubicado en su centro viene dado por: $-\frac{3}{2} \frac{e^2}{r_0}$

En el análisis de la correlación electrónica es conveniente utilizar la función de distribución para dos electrones $P_2(\tau_1, \tau_2)$, que se define así:

$P_2(\tau_2, \tau_1)(d\tau_1, d\tau_2) =$ Probabilidad de encontrar un electrón en $d\tau_1$ y otro en $d\tau_2$
indistintamente de los estados que ocupan $= \int \psi^* \psi d\tau_3 \dots \dots d\tau_N$

$$= \frac{1}{N(N-1)} \left[\sum_{i,k=1}^N u_k^*(\tau_2) u_k(\tau_2) u_i^*(\tau_1) u_i(\tau_1) - \sum_{i,k=1}^N u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_1) u_k(\tau_1) u_i(\tau_2) \right] d\tau_1 d\tau_2 \quad (16)$$

donde se puede apreciar el término de intercambio.

La función de distribución para un electrón, $P_1(\tau_1)$ viene dado por:

$$P_1(\tau_1) d\tau_1 = \text{Probabilidad de hallar un electrón en } d\tau, \text{ indistintamente del estado que ocupa} = d\tau_1 \int P_2(\tau_1, \tau_2) d\tau_2$$

$$= d\tau_1 \frac{1}{N(N-1)} \left[\sum_{i=1}^N u_i^*(\tau_1) u_i(\tau_1) - \sum_{k=1}^N 1 - \sum_{i,k=1}^N u_i^*(\tau_1) u_k(\tau_1) \int u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_2) d\tau_2 \right]$$

siendo: $\int u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_2) d\tau_2 = \delta_{ki} = 0$

luego: $P_1(\tau_1) d\tau_1 = \frac{d\tau_1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N u_i^*(\tau_1) u_i(\tau_1) (N-1)$

$$= \frac{d\tau_1}{N} \sum_{i=1}^N u_i^*(\tau_1) u_i(\tau_1) \quad (17)$$

Para simplificar el cálculo del término de intercambio, Slater propuso utilizar una media ponderada para la densidad de carga de intercambio un lugar de la forma dada por la Ec. (11). Esta simplificación se fundamenta en el hecho que la carga de intercambio para diferentes funciones de onda, U_i que corresponden al mismo espín, no son muy diferentes entres si, ya que en todos

los casos se reducen al mínimo valor, cuando $\tau_2 = \tau_1$ y se integran el valor de uno (1) en todo el espacio.

Definimos el factor de ponderación.

$$w_i(\tau_1) = \frac{u_i^*(\tau_1)u_i(\tau_1)d\tau_1}{\sum_j u_j^*(\tau_1)u_j(\tau_1)d\tau_2} \quad (18)$$

= probabilidad de encontrar en (τ_1, τ_2) un electrón en el i-ésimo estado.

y la densidad de intercambio promedio, $\langle \rho_{int}(\tau_2, \tau_1) \rangle$ será:

$$\begin{aligned} \langle \rho_{int}(\tau_2, \tau_1) \rangle &= \sum_{i=1}^N w_i(\tau_1) \rho_{int}^{(i)}(\tau_2, \tau_1) \\ &= -e \frac{\sum_{i,k} u_i^*(\tau_1)u_k^*(\tau_2)u_k(\tau_1)u_i(\tau_2)}{\sum_j u_j^*(\tau_1)u_j(\tau_1)} \end{aligned} \quad (19)$$

Al sustituir esta expresión en la ecuación de Hartree Fock, obtenemos:

$$\left[H_1 \sum_k \int u_k^*(\tau_2)u_k(\tau_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2 - \frac{\sum_{i,k} \int u_i^*(\tau_1)u_k^*(\tau_2)u_k(\tau_1)u_i(\tau_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2}{\sum_j u_j^*(\tau_1)u_j(\tau_1)} \right] u_i(\tau_1) = E_i u_i(\tau_1) \quad (20)$$

Esta ecuación modificada posee la ventaja que todas las $U_i(\tau_1)$ son soluciones de la misma ecuación diferencial y por lo tanto, son ortogonales entre

sí. Esta aproximación permite simplificar enormemente los cálculos de estructura electrónica.

2.2.8 Aplicación al Gas de Electrones Libres

Consideremos un sistema de N electrones (con N un número muy grande) que ocupan el volumen V . Este volumen también contiene carga positiva no distribuida uniformemente de manera que la densidad de carga neta promedio es nula y el potencial promedio en que se mueven los electrones es constante dentro del volumen V_0 . Bajo estas condiciones calcularemos primero las funciones de onda para los estados que pueden ser ocupados por los electrones, considerados como partículas independientes. Luego consideraremos los efectos de la interacción de intercambio.

Se supone que los electrones ocupan los primeros N estados permitidos. Las funciones de onda $U_i(\tau)$ de los electrones, resultan de las soluciones de la ecuación:

$$\left(\frac{p^2}{2m} \right) u_i(\tau) = E_i u_i(\tau) \quad (21)$$

sometidas a la condición que $U_i(\tau)$ sea una función periódica. Las soluciones tienen la forma:

$$u_i(\tau) = \psi_i(\vec{r}) \chi(\sigma_i) \quad (22)$$

donde $\chi_i(\sigma)$ es la función de espín,

$$\chi_i(\sigma = 1/2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_i(\sigma = -1/2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \quad (23a)$$

Con

$$\vec{k}_i = 2\pi \left(\frac{m_i}{L_x} \hat{i} + \frac{n_i}{L_y} \hat{j} + \frac{l_i}{L_z} \hat{k} \right) \quad (23b)$$

Para una caja de forma de un paralelepípedo, con $V = L_x L_y L_z$

$$m_i = \pm 1, \pm 2, \dots, = n_i = l_i$$

$$\int u_i^*(\tau) u_j(\tau) d\tau = \int \psi_i^*(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) dV \chi^t(\sigma_i) \chi(\sigma_j) = \delta_{ij} \quad (24)$$

El volumen de espacio \vec{k} por estado viene dado por:

$$k = \left(\frac{2\pi}{L_x} \right) \left(\frac{2\pi}{L_y} \right) \left(\frac{2\pi}{L_z} \right) = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad (25)$$

Supondremos que los N electrones, siendo fermiones ocupan los N estados más bajos disponibles (incluyendo espín), de manera que el volumen de espacio \vec{k} , $\Delta\vec{k}$ que ocupan los N electrones viene dado por :

$$\Delta\vec{k} = \left(\frac{N}{2} \right) \delta\vec{k} = \frac{N}{2} \cdot \frac{8\pi^3}{V} \quad (26)$$

Donde el factor 2 toma en cuenta que por cada estado de movimiento de traslación se dan dos estados de espín que pueden ser ocupados con igual probabilidad; por otro lado, dado que N es un número grande y que la energía cinética es proporcional a \vec{k}^2 , podemos tomar a $\Delta\vec{k}$ como un volumen esférico de radio k_0 .

Así:

$$\Delta\vec{k} = \frac{4\pi}{3} k_0^3 = \frac{N}{2} \cdot \frac{8\pi^3}{V}$$

de donde:

$$k_0^3 = \frac{3\pi^2}{V} N ;$$

k_0 define el radio de la superficie de Fermi. (27). (Eisberg, 2002)

2.2.9 Cálculo de la Distribución $P_2(\tau_1, \tau_2)$

Consideremos primero la sumatoria de la ecuación

$$A = \sum_{j,k=1}^N u_k^*(\tau_2) u_k(\tau_2) u_j^*(\tau_1) u_j(\tau_1) = \sum_{k=1}^N \frac{1}{V} \sum_{j=1}^N \frac{1}{V} = \frac{N^2}{V^2} \quad (28a)$$

Ahora consideremos la segunda sumatoria:

$$B = \sum_{j,k=1}^N u_k^*(\tau_2) u_j^*(\tau_1) u_k(\tau_1) u_j(\tau_2) =$$

$$\sum_{j,k=1}^N \frac{e^{-i\vec{k}_k \cdot \vec{r}_2} e^{-i\vec{k}_j \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_k \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{r}_2}}{V^2} =$$

$$\sum_{j,k=1}^N \frac{e^{i(k_j - k_k) \cdot (r_2 - r_1)}}{2V^2} = \frac{2}{2V^2} \int_{\Delta\vec{k}} \frac{d\vec{k}_j}{\delta\vec{k}} e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{r}} 2 \frac{d\vec{k}_k}{\delta\vec{k}} e^{-i\vec{k}_k \cdot \vec{r}}$$

dónde: $\vec{r} = (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$, $r = |\vec{r}|$ y si se toma en cuenta que para cada estado

de movimiento de translación hay dos estados de espín, tendremos:

$$B = 2 \left| \int_{\Delta\vec{k}} \frac{d\vec{k}}{V\delta\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right|^2 \quad (28.b)$$

A continuación, calculamos la integral que aparece en la ecuación (28b)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\delta\vec{k}} \int_{\Delta\vec{k}} d\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} &= \frac{2\pi}{\delta E} \int_0^{k_0} k^2 dk \int_{-1}^1 d\mu e^{ikr\mu} \\ &= \frac{2\pi}{\delta\vec{k}} \int_0^{k_0} k^2 dk \frac{2i \text{sen} kr}{ikr} \end{aligned}$$

$$\frac{4\pi}{\delta\vec{k}} \left(\frac{1}{r^3} \right) \int_0^{k_0 r} x \text{sen} x dx \quad \text{con} \quad x = k_0 r$$

$$\frac{4\pi}{r^3 \delta\vec{k}} [\text{sen} x_0 - x_0 \cos x_0] \quad \text{con} \quad x_0 = k_0 r$$

$$\begin{aligned} & \frac{4\pi k_0^3}{\delta \bar{k}} \left[\frac{\text{sen } x_0 - x_0 \cos x_0}{x_0^3} \right] \\ &= \frac{V k_0^3}{2\pi^2} \left[\frac{\text{sen } x_0 - x_0 \cos x_0}{x_0^3} \right] = \frac{3N}{2} \left[\frac{\text{sen } x_0 - x_0 \cos x_0}{x_0^3} \right] \end{aligned} \quad (29)$$

Luego:

$$B = \frac{2}{V^2} \cdot \left(\frac{3N}{2} \right)^2 \left[\frac{\text{sen } x_0 - x_0 \cos x_0}{x_0^3} \right]^2 \quad (30)$$

Finalmente, tomando:

$$\frac{N^2}{N(N-1)} \cong (1 + 1/N) \cong 1$$

para $N \rightarrow \infty$, tenemos:

$$P_2(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{V^2} \left[1 - \frac{9}{2} \left| \frac{\text{sen } x_0 - x_0 \cos x_0}{x_0^3} \right|^2 \right] = f(k_0 r) \quad (31)$$

$P_2(\tau_1, \tau_2)$ depende sólo de la distancia $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$

$$P_2(\tau_1, \tau_2) = f(0) = \frac{1}{V^2} (1/2)$$

y tiene el valor asintótico de $\frac{1}{V^2}$ para grandes distancias. Este resultado

concuera con el principio de exclusión que permite alrededor de un electrón de cierto espín la presencia de electrones sólo de espín opuesto.

2.2.10 Cálculo de la Densidad de Intercambio Promedio

Teniendo como referencia la Ec. (19) y los resultados de la sección anterior, tenemos:

$$\langle \rho_{\text{int}}(\tau_2, \tau_1) \rangle = -e \frac{\sum_{i,k} u_i^*(\tau_1) u_k^*(\tau_2) u_k(\tau_1) u_i(\tau_2)}{\sum_j u_j^*(\tau_1) u_j(\tau_1)}$$

$$\begin{aligned}
&= -e \frac{\frac{2}{V^2} \left| \int_{\Delta \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{\delta \vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right|^2}{\sum_{J=1} \frac{1}{V}} \\
&= -e \frac{2}{NV} \left(\frac{3N}{2} \right)^2 \left(\frac{\text{sen } x_0 - x_0 \cos x_0}{x_0^3} \right)^2 \\
&= \left(-e \frac{N}{V} \right) \frac{9}{2} \left(\frac{\text{sen } x_0 - x_0 \cos x_0}{x_0^3} \right)^2 \\
&= \rho \left(\frac{9}{2} \right) \left(\frac{\text{sen } x_0 - x_0 \cos x_0}{x_0^3} \right)^2, \quad x_0 = k_0 r
\end{aligned} \tag{32}$$

donde ρ es la densidad de carga electrónica promedio en el medio y hemos utilizado las ecuaciones (28b) y (30).

Esta densidad de intercambio posee un valor extremo en la misma posición del electrón de referencia y tiende a cero asintóticamente a medida que r aumenta.

Para verificar si se cumple que la carga de intercambio total es $-e$, integramos la Ec. (32) sobre todo el volumen que rodea al electrón de referencia.

Así tenemos:

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \langle \rho_{\text{int}}(\tau_2, \tau_1) \rangle 4\pi r^2 dr &= \left(\frac{9\rho}{2} \right) \frac{4\pi}{k_0^3} \int_0^\infty dx_0 \left(\frac{\text{sen } x_0 - x_0 \cos x_0}{x_0^2} \right)^2 \\
&= -\frac{6e}{\pi} \int_0^\infty dx_0 [j_1(x_0)]^2 = -\frac{3e}{\pi} \int_0^\infty dx_0 [j_1(x_0)]^2 = -e
\end{aligned} \tag{33}$$

donde $j_\ell(x_0)$ es la función de Bessel esférica que es simétrica respecto al origen. Para evaluar la integral es necesario utilizar el método del valor principal.

2.2.11 Cálculo del Término de Energía Potencial de Intercambio

Este término viene dado por:

$$H_{\text{int}} u_i(\tau_1) = -\sum_k \int d\tau_2 u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_2) u_k(\tau_1) \left(\frac{e^2}{r_{21}} \right) \quad (34a)$$

$$= -\sum_k \int dV_2 \frac{e^{-i\vec{k}_k \cdot \vec{r}_2}}{\sqrt{V}} \frac{e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_2}}{\sqrt{V}} \frac{e^{-i\vec{k}_k \cdot \vec{r}_1}}{\sqrt{V}} \left(\frac{e^2}{r_{21}} \right); \quad \text{espín } k = \text{espín } i$$

$$= -e^2 \frac{e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1}}{\sqrt{V}} \cdot \frac{1}{2V} \sum_k \int dV_2 \frac{e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{k}_k (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}}{r_{21}} \quad (34b)$$

Consideremos primero la integral

$$\int dV_2 \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{21}}}{r_{21}} = \int dV \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r}, \quad \text{donde } \vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_k, \quad \vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$$

$$= 2 \int_0^\infty \frac{r^2 dr}{r} \int_{-1}^1 d\mu e^{ikr} = 2\pi \int_0^\infty r dr \cdot \frac{2 \text{sen } kr}{kr}$$

$$= 4\pi \left(\frac{1}{k} \right) \left[\lim_{x \rightarrow \infty} \int_0^x dx \text{sen } x \right] = \frac{4\pi}{R^2} \lim_{x \rightarrow \infty} [-\text{cos } x] = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{4\pi}{R^2} [1 - \text{cos } x]$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} x = k \lim_{r \rightarrow \infty} r = \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi \frac{r^2}{2}, \quad \text{cuando } k = 0$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}, \quad \text{cuando } k \neq 0$$

$$\text{cos } x \approx 1 - \frac{x^2}{2} = 1 - \left(\frac{\kappa^2 r^2}{2} \right)$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} = \frac{4\pi}{|\vec{k}_i - \vec{k}_k|^2}, \quad \text{para } \kappa \neq 0$$

Luego, consideramos la sumatoria:

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{4\pi}{|\vec{k}_i - \vec{k}_k|^2} = \frac{2\pi}{\delta\vec{k}} \cdot 2 \int_{\Delta\vec{k}} \frac{d\vec{k}_k}{(\vec{k}_i^2 - \vec{k}_k^2 - 2k_i k_k \mu)} \\
&= \frac{2\pi}{\delta\vec{k}} \cdot 2 \int_0^{k_0} 2\pi k_k^2 \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{(\vec{k}_i^2 + \vec{k}_k^2 - 2k_i k_k \mu)} \\
&= \frac{(2\pi)^2}{\delta\vec{k}} \cdot 2 \int_0^{k_0} \frac{k_k^2 dk_k}{2k_i k_k} \ln \left(\frac{k_i + k_k}{k_i - k_k} \right)^2 \\
&= \frac{(2\pi)^2}{\delta\vec{k}} \cdot 2 \int_0^{k_0} \frac{k_k dk_k}{k_i} \ln \left| \frac{k_i + k_k}{k_i - k_k} \right| \\
&= \frac{(2\pi)^2}{\delta\vec{k}} \cdot 2k_i \int_0^{\frac{k_0}{k_i}} x dx \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \\
&= \frac{2(2\pi)^2}{\delta\vec{k}} k_i \left[x_0 + \left(\frac{x_0^2 - 1}{2} \right) \ln \left(\frac{1+x_0}{1-x_0} \right) \right], \quad x_0 = \frac{k_0}{k_i} \\
&= \frac{2^2(2\pi)^2 k_0}{\delta\vec{k} V} \left[\frac{1}{2} + \left(\frac{1-\eta^2}{1+\eta} \right) \ln \left| \frac{1+\eta}{1-\eta} \right| \right], \quad \eta = \frac{1}{x_0}
\end{aligned}$$

Reemplazando obtenemos:

$$H_{\text{int}} u_i(\tau_1) = -e^2 \frac{e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}}{\sqrt{V}} \cdot 2 \frac{k_0}{\pi} f(\eta), \quad \text{donde} \quad (35a)$$

$$f(\eta) = \frac{1}{2} + \frac{1-\eta^2}{4\eta} \ln \left| \frac{1+\eta}{1-\eta} \right| \quad (35b)$$

como: k_0 se puede expresar de la siguiente manera:

$$\frac{4\pi k_0^3 \hbar^3}{3} V = \frac{N}{2} \hbar^3 = \frac{N}{2} (2\pi)^3 \hbar^3$$

$$\frac{4\pi \tau_0^3}{3} \left(\frac{N}{2V} \right) = 1$$

$$\left(\frac{4\pi r_0^3}{3}\right) \left(\frac{4\pi k_0^3}{3} \cdot \frac{1}{8\pi^3}\right) = 1$$

$$(r_0 k_0)^3 = \frac{9\pi}{2}$$

$$k_0 = \left(\frac{9\pi}{2}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_0}$$

$$\frac{2k_0}{\pi} = \left(\frac{8.9\pi}{2\pi^3}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_0} = \left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{r_0}$$

Por lo tanto:

$$H_{\text{int}} u_i(\tau) = -\frac{e^2}{r_0} \cdot \left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}} f(\eta) u_i(\tau_1)$$

Como se puede apreciar, el autovalor viene dado por:

$$E_{\text{int}} = -\left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}} f(\eta) \frac{e^2}{r_0} \quad (36)$$

y depende del parámetro $\eta = k/k_0$ a través de la función $f(\eta)$, $\langle f(\eta) \rangle$, que

viene dado por:

$$\langle f(\eta) \rangle = \frac{1}{\Delta \bar{k}} \int_{\Delta \bar{k}} d\bar{k} f(k/k_0) \quad (37a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{(4\pi/3)} \int_0^1 4\pi \eta^2 f(\eta) d\eta \\ &= 3 \int_0^1 \eta^2 \left[\frac{1}{2} + \frac{1-\eta^2}{4\eta} \ln\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right) \right] d\eta \\ &= \frac{1}{2} + \frac{3}{4} \int_0^1 \eta (1-\eta^2) \ln\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right) d\eta \end{aligned} \quad (37b)$$

Haciendo uso de los siguientes resultados:

$$\int_0^1 \eta \ln(1-\eta) d\eta = \frac{1}{4}; \int_0^1 \eta^3 \ln(1-\eta) d\eta = \frac{7}{48}$$

$$\int_0^1 \eta \ln(1-\eta) d\eta = \frac{3}{4}; \int_0^1 \eta^3 \ln(1-\eta) d\eta = \frac{25}{48}$$

Obtenemos:

$$\langle f(\eta) \rangle = \frac{3}{4} \quad (37c)$$

$$\begin{aligned} \langle E_{\text{int}} \rangle &= -\frac{3}{4} \left(\frac{6}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{e^2}{r_0} \\ &= 3e^2 \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{\frac{1}{3}} \end{aligned} \quad (38)$$

expresión que se puede escribir de la forma:

$$\langle E_{\text{int}} \rangle = -3e^2 \left(\frac{3|\rho|}{8\pi e} \right)^{1/3} \quad (39)$$

donde ρ es la densidad de carga electrónica total en el medio.

2.2.12 Aplicaciones al Cálculo de Orbitales Electrónicos Atómicos

El resultado obtenido para la energía de intercambio promedio de un electrón que forma parte de un sistema de electrones libres, según la Ec. (39), que es exacta para este caso, se utiliza para aproximar el término de intercambio que aparece en las ecuaciones de Hartree-Fock. Es decir, se establece la siguiente equivalencia:

$$\sum_{k=1}^N \left[\int u_k^*(\tau_2) u_i(\tau_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2 \right] u_k(\tau_1) \Rightarrow$$

$$-3e^2 \left[\frac{3|\rho(r_1)|}{8\pi e} \right]^{1/3} u_i(\tau_1) \quad (40)$$

Asimismo, el primer término de la interacción coulombiana entre los electrones más el término de interacción electrón - núcleo se puede escribir de la siguiente manera en términos del potencial $V(\vec{r})$,

$$-\frac{e^2 Z_{nuc}}{r_1} + \sum_{k=1}^N \int u_k^*(\tau_2) u_k(\tau_2) \cdot \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_2 =$$

$$-\frac{e^2 Z_{nuc}}{r_1} - e \int \frac{\rho(\tau^2) d(\tau^2)}{r_{12}} = -eV(\vec{r}) \quad (41)$$

Donde eZ_{nuc} es la carga eléctrica nuclear. Si consideramos que el campo potencial es esféricamente simétrico, $V(\vec{r}) = V(r)$, e introducimos la carga nuclear efectiva, $Z_{ef}(r)$ de la manera siguiente:

$$V(\vec{r}) = + \frac{eZ_{ef}(r)}{r} \quad (42)$$

donde: $Z_{ef}(0) = Z_{nuc}$

Podemos deducir una expresión para $\rho(r)$ en términos de $Z_{ef}(r)$ a través de la ecuación de Poisson:

$$\rho(r) = -\frac{1}{4\pi} \nabla^2 V(r) = -\frac{1}{4\pi} \left[\left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \right) \left(+ \frac{eZ_{ef}(r)}{r} \right) \right] \quad (43)$$

$$\text{de donde: } \rho(r) = -\frac{e}{4\pi} \cdot \frac{1}{r} \frac{d^2 Z_{ef}}{dr^2} + eZ_{nuc} \delta(\vec{r}) \quad (44)$$

de manera que el término de intercambio se puede escribir así:

$$-\frac{3e^2}{r_1} \left[\left(\frac{3r_1^2}{32\pi^2} \frac{d^2 Z_{ef}}{dr_1^2} \right) \right]^{\frac{1}{3}} u_i(\tau_1) \quad (45)$$

Escrito así, el término de intercambio se puede incluir sin mayor dificultad en la ecuación diferencial Ec.(44) para los orbitales electrónicos atómicos. Merece enfatizar que en el cálculo de $Z_{ef}(r)$ se debe tomar en cuenta todos los electrones del átomo cuyos orbitales se desea calcular. Por ejemplo, si se trata de un átomo neutro, debe incluirse los Z_{nuc} electrones; si es para un átomo ionizado una vez debe incluirse los $(Z_{nuc} - 1)$ electrones; etc.

2.3 Marco Conceptual

Funciones de onda de campo central utilizando el potencial de Thomas-Fermi para átomos en diferentes estados de ionización positiva.

2.4 Definición de Términos

2.4.1 *Método teórico de la mecánica cuántica,*

La cuantización de la energía es otra idea nueva que no aparece en la mecánica clásica. La interacción de la radiación y la materia por medio de la absorción o emisión de fotones es otro concepto nuevo que debe ser incorporado. Por consiguiente, esta situación ha exigido que se desarrolle un nuevo formalismo, llamado **mecánica cuántica**, que ha producido una profunda revolución en la física. La mecánica cuántica es esencial para comprender el comportamiento de los constituyentes fundamentales de la materia. La teoría es matemáticamente elaborada, pero sus ideas básicas son relativamente simples Alonso & Finn, (1981).

2.4.2 Niveles de energía

Los niveles de energía de los átomos son algo más complejos, así en un campo colombiano cada nivel de energía, que corresponde a un “n” dado, contiene “n” estados diferentes de momentum angular, todos con la misma energía y con ℓ entre cero y $n - 1$. Alonso & Finn, (1981).

2.4.3 Modelo de Thomas-Fermi

En el análisis del movimiento de electrones en la banda de conducción, ignoraremos, en primera aproximación, la fluctuación periódica de la energía potencial. En consecuencia, podemos considerar estos electrones como si fueran libres y moviéndose independientemente unos de otros. Alonso & Finn, (1981).

2.4.4 Función de Onda

En la teoría de la mecánica cuántica, cada partícula se describe mediante una cantidad Ψ llamada función de onda. La probabilidad por unidad de volumen de encontrar la partícula en un punto específico en algún instante es proporcional a Ψ^2 . La mecánica cuántica ha sido enormemente exitosa para describir el comportamiento de los sistemas atómicos y moleculares. Serway & Vuille, (2012)

2.4.5 Campo Central

“La ecuación de Schrödinger es una ecuación en derivadas parciales para Ψ en función de x y t . La técnica para resolverla es proponer soluciones que sean el producto de una función en x y otra en t . Veremos que este tipo de soluciones son posibles si la energía potencial sólo es una función de r , es decir una función de campo central. Beiser A. (2017)

2.4.6 Potencial de Thomas-Fermi

“Desarrollaron de manera independiente una teoría semiclásica para calcular el estado fundamental de átomos con N electrones. En ella, el campo central promedio que siente un electrón en el átomo multielectrónico se obtiene de la autoconsistencia que debe existir entre la densidad electrónica media (densidad de carga) y el potencial eléctrico donde se encuentra el electrón (Eisberg R. , 2000)

2.4.7 Ionización Positiva

“Es el nuevo estado que presenta un átomo neutro debido a la pérdida de uno o más electrones de sus orbitales”. Tipler, (2001).

III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

3.1 Hipótesis General

Teniendo en cuenta que, al tener un átomo muchas partículas tenemos un problema que hace imposible hallar una solución exacta para la función de onda y su energía a partir de la ecuación de Schrödinger, este hecho ha permitido desarrollar diversos métodos tomando en cuenta aproximaciones con el hamiltoniano a fin de que esta ecuación adquiriera una forma más simple. El desarrollo del método de la Teoría de Hartree-Fock y el método de la Teoría del Funcional Densidad, permitieron determinar para un átomo, las propiedades de su estado base y de sus estados excitados.

3.2 Hipótesis Específica

Una de las formas posibles para dar solución a la ecuación de Schrödinger es proponer que la energía potencial sólo sea función de r es decir: $V(x, t) = V(r)$.

Este hecho me ha permitido elegir al potencial de Thomas-Fermi modificado, como el potencial que trata de una teoría semiclásica para calcular el estado fundamental de los átomos con N electrones. Así, la energía potencial sólo será una función de r , es decir una función de campo central.

La solución que presento ha sido posible gracias a la creación de un algoritmo, el cual me ha permitido construir una tabla de potenciales que luego será de utilidad para calcular las funciones de onda y sus correspondientes niveles de energía para los átomos de hierro, bario y uranio.

3.3 Operacionalización De Variables

Variable I: Funciones de onda de campo central utilizando el potencial de Thomas-Fermi modificado.

Variable II: Átomos en diferentes estados de ionización positiva. Estados y niveles de energía de los elementos fierro, bario y uranio.

VARIABLES	DIMENSIÓN	INDICADORES	MÉTODO
Variable I: Funciones de onda de campo central utilizando el potencial de Thomas-Fermi.	Método teórico de la Mecánica Cuántica.	Estado fundamental de los átomos de fierro, bario y uranio	Enfoque, cuantitativo
Variable II: Átomos en diferentes estados de ionización positiva. Estados y niveles de energía de los elementos: fierro, bario y uranio.	Método teórico de la Mecánica Cuántica.	Aproximado de las funciones de onda del fierro, bario y uranio. Mayor precisión de los niveles de energía del fierro, bario y uranio.	Nivel, explicativo

IV. METODOLOGÍA DEL PROYECTO

4.1 Diseño metodológico

Por la naturaleza de la investigación, es de tipo cuantitativo, donde se realiza el estudio de las teorías que intervienen en el cálculo y en los resultados de las funciones de onda y sus niveles de energía de los electrones.

4.2 Método de investigación

Se trata de un método Hipotético- Deductivo, debido a que se propone la hipótesis para luego contrastar su veracidad o falsedad de la proposición.

4.3 Población y muestra

No aplica por ser una investigación teórica

Para este estudio de investigación se han considerado los siguientes elementos: Fierro, Bario y Uranio.

4.4 Lugar de estudio

Universidad Nacional del Callao, cito en Av. Juan Pablo II N°306, Bellavista Callao, 2023.

4.5 Técnicas e instrumentos para la recolección de la información

La técnica utilizada es el análisis documental, a la vez el instrumento de ficha de análisis de contenido.

4.6 Análisis Y Procesamiento De Datos

En esta investigación se han seguido los siguientes procesos metodológicos:

- Revisión bibliográfica.
- Programación en Fortran 4, utilizando los métodos de
- aproximación de Runge-Kutta y de Corrector Predictor.

- Generación de resultados.
- Análisis e interpretación.

4.7 Aspectos Éticos en Investigación

Se ha tenido en consideración las normas éticas de la Universidad, así como las directivas de investigación dispuestas para el posgrado.

V. RESULTADOS

5.1 Resultados Descriptivos

No se aplica

5.2 Resultados Inferenciales

Se ha observado que todos los electrones de la capa particular de un átomo tienen densidades de probabilidad que son aproximadamente de la misma forma en la región donde sus valores son grandes; por el contrario, son apreciablemente diferentes en la región cercana a $r = 0$. De lo cual se concluye que las energías totales de los electrones en una capa no son iguales.

5.3 Otro tipo de resultados

5.3.1 Construcción de la Tabla de Potenciales

En esta parte se explicarán los criterios que se tomaron en cuenta para hacer los programas (software) que permitieron confeccionar una tabla de potenciales y posteriormente utilizados para calcular los valores propios de la energía y sus correspondientes funciones de onda.

La tabla del Anexo 3, muestra la solución numérica de la ecuación de Thomas-Fermi.

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \varphi^{\frac{3}{2}}x^{-\frac{1}{2}} \quad (1)$$

Nótese que esta solución cumple con las condiciones iniciales, es decir:

$$\varphi(x) = 1 \quad \text{cuando } x \rightarrow 0 \quad (2)$$

$$\varphi(x) = 0 \quad \text{cuando } x \rightarrow \infty$$

el parámetro φ es la relación entre cargas eléctricas

$$\varphi = \frac{Z_{\text{ef}}(x)}{Z}$$

Siendo: Z_{ef} : carga efectiva

Z : número atómico

y; x es la distancia expresada en múltiplos de una unidad B la cual numéricamente es:

$$B = \frac{Z^{\frac{1}{3}}}{0.885341 a_0} \quad a_0: \text{radio de Bohr}$$

Entonces definimos:

$$r = x / B$$

r : distancia radial

$$\text{ó} \quad r = 0.885341 Z^{-1/3} x$$

Aquí se ha hecho $a_0 = 1$ ya que se está trabajando en unidades atómicas.

Partiremos inicialmente del gráfico 1 que corresponde a la solución general de la ecuación de Thomas-Fermi Ec.(1) y pasamos a definir la función $\varphi(x)$ como una función que depende del número atómico Z a través de:

$$K = -0.083 \left(\frac{Z - N + 1}{Z} \right)^3 \quad (3)$$

N : Número de electrones del átomo cuyos orbitales se desea calcular

$$\text{Así:} \quad \varphi(x) = \varphi_0(x) + K\eta_0(x) \quad (4)$$

Donde $\varphi_0(x)$ y $\eta_0(x)$ son los valores obtenidos de la solución general de la ecuación de Thomas-Fermi (Anexo 3) y K representa la pendiente de la función $\varphi(x)$.

El cálculo numérico de $\varphi(x)$ y el valor del punto de intercepción x_0 , con el eje x lo realiza el software PEON.

Al encontrar, en la primera interacción, el valor de x_0 , se calcula $r_0 (= x_0/B)$, siendo su valor la máxima distancia a la cual se debe considerar la carga electrónica; más allá de r_0 , ésta puede despreciarse.

De otro lado, teniendo en cuenta las condiciones Ec. (2) de la solución general de la ecuación de Thomas-Fermi, la nueva función $\varphi(x)$ evaluada en el punto x_0 debe también cumplirlas, esto es:

$$\varphi(x_0) = 0 \quad \text{Primera condición (lejos del núcleo)} \quad (5)$$

$$\text{ó} \quad \varphi_0(x_0) + k\eta_0(x_0) = 0$$

y considerando para $x < x_0$

$$V(x) = V_0 + \frac{Z\varphi(x)}{x} \quad \text{y} \quad V'(x) = \frac{Z}{x}\varphi'(x) - \frac{Z}{x^2}\varphi(x)$$

y para $x > x_0$

$$V(x) = \frac{Z-N+1}{x} \quad \text{y} \quad V'(x) = -\left(\frac{Z-N+1}{x^2}\right)$$

Veremos que:
$$Z\left[\frac{x\varphi'(x) - \varphi(x)}{x^2}\right] = -\left[\frac{Z-N+1}{x^2}\right]$$

y en particular para $x = x_0$, se cumple que:

$$x_0 \varphi'(x_0) = -\left[\frac{Z-N+1}{x_0^2}\right] \quad \text{Segunda condición (cerca del núcleo)} \quad (6)$$

El programa THOM.FOR mediante una interpolación en el software PEON, al determinar x_0 , determina también sus correspondientes valores

que en la condición (5) se cumple (gráfico 1), pero al comprobar la condición (6) esto es:

$$x_0 \varphi'(x_0) = \left[\frac{Z-N+1}{x^2} \right] \neq 0 \quad (7)$$

se observa, que la igualdad es diferente de cero.

Esto nos lleva a suponer que el valor de x_0 determinado inicialmente no es el valor buscado. Como $\varphi(x)$ depende de dos parámetros x y k , trataremos de aproximar mejor estos parámetros para satisfacer la condición (6).

El método de aproximación aplicado está basado en el TEOREMA DE TAYLOR (Anexo 7), donde la primera condición toma ahora la forma:

$$\varphi(x_0 + \Delta x, k + \Delta k) = 0 \quad (8)$$

cuyo desarrollo nos lleva a encontrar el incremento Δk para el parámetro k . Así:

$$\varphi(x_0 + \Delta x, k + \Delta k) = \varphi(x_0, k) + \Delta x \varphi'_x(x_0, k) + \Delta k \varphi'_k(x_0, k) = 0$$

$$\text{Como:} \quad \varphi(x_0, k) = 0 \quad \Delta k = -\frac{\varphi'_x(x_0, k)}{\varphi'_k(x_0, k)} \Delta x \quad (9)$$

Con su equivalente para el cálculo numérico:

$$\Delta k = -\frac{[-\varphi'_0(x_0) + k\eta'_0(x_0)]}{\eta'_0(x_0)} \Delta x \quad (9')$$

Y la segunda condición toma la forma:

$$(x_0 + \Delta x) \varphi'(x_0 + \Delta x, k + \Delta k) = -\left[\frac{Z-N+1}{Z} \right] \quad (10)$$

Siendo su desarrollo:

$$(x_0 + \Delta x) \left[\varphi'_x(x_0, k) + \Delta x \varphi''_{xx}(x_0, k) + \Delta x \varphi''_{xk}(x_0, k) \right] = - \left[\frac{Z - N + 1}{Z} \right]$$

$$x_0 \varphi'_x(x_0, k) + x_0 \Delta x \varphi''_{xx}(x_0, k) + x_0 \Delta k \varphi''_{xk}(x_0, k) + \Delta x \varphi'_x(x_0, k) + \Delta x^2 \varphi''_{xx}(x_0, k) + \Delta x \Delta k \varphi''_{xk}$$

Como solamente nos interesa la primera aproximación se ignorará el término cuadrático Δx^2 y el producto $\Delta x \Delta k$.

Luego:

$$\Delta x \left[x_0 \varphi''_{xk}(x_0, k) + \varphi''_x(x_0, k) \right] + x_0 \Delta k \varphi''_{xk}(x_0, k) = - \left[\frac{Z - N + 1}{Z} \right] - x_0 \varphi'_k(x_0, k) \quad (11)$$

Siendo:

$$\varphi'_{xk}(x_0, k) \quad \text{Función cuyo equivalente es } \varphi'_x = -\varphi'_0(x_0) + k\eta'_0(x_0)$$

$$\varphi''_{xk}(x_0, k) \quad \text{Función cuyo equivalente es } \eta'_0(x_0)$$

$$\varphi''_{xk}(x_0, k) \quad \text{Función que se calculará a partir de la definición:}$$

$$\varphi''_{xx}(x_0, k) = \varphi''_{0_xk}(x_0, k) + k\eta''_{0_xk}(x_0, k)$$

donde $\varphi''_{xk}(x_0, k)$ depende de la aproximación hecha por $\varphi''_{0_xk}(x_0, k)$

y por $\eta''_{0_xk}(x_0, k)$ tal como se verá más adelante.

El gráfico 2 muestra el gráfico de $\varphi(x)$, Ec.(4) en función de los valores de la variable x dados en la tabla (Anexo 3) donde se muestra la posición de los puntos x_2 , x_1 , x_0 .

Vamos a determinar mediante el teorema de expansión de Taylor una aproximación general válida para $\varphi''_{xk}(x_0, k)$ y $\eta''_{0_xk}(x_0, k)$.

Puesto que los puntos x_2 , x_1 , x_0 están ubicados tal como se mostró en el gráfico 2 ; el siguiente esquema grafica la posición de ellos y sus

respectivas funciones tomadas de la solución de la ecuación general de Thomas-Fermi. Si consideramos:

$$h_2 = x_2 - x_1 \quad \rightarrow \quad x_2 = x_1 + h_2$$

$$h_1 = x_0 - x_1 \quad \rightarrow \quad x_0 = x_1 + h_1$$

Luego:

$$\varphi(x_0) = \varphi(x_1 + h_1) = \varphi(x_1) + h_1 \varphi'(x_1) + \frac{h_1^2}{2} \varphi''(x_1) + \text{términos de } O^3$$

$$\varphi(x_2) = \varphi(x_1 + h_2) = \varphi(x_1) + h_2 \varphi'(x_1) + \frac{h_2^2}{2} \varphi''(x_1) + \text{términos de } O^3$$

de donde se obtiene:

$$\begin{aligned} \varphi(x_0) - \varphi(x_1) &= h_1 \varphi'(x_1) + \frac{h_1^2}{2} \varphi''(x_1) \\ \varphi(x_2) - \varphi(x_1) &= h_2 \varphi'(x_1) + \frac{h_2^2}{2} \varphi''(x_1) \end{aligned} \quad (12)$$

Los términos de orden tres no se toman en cuenta por ser su variación bastante pequeña.

GRÁFICO 1

SOLUCIÓN GENERAL DE LA ECUACIÓN DE THOMAS-FERMI

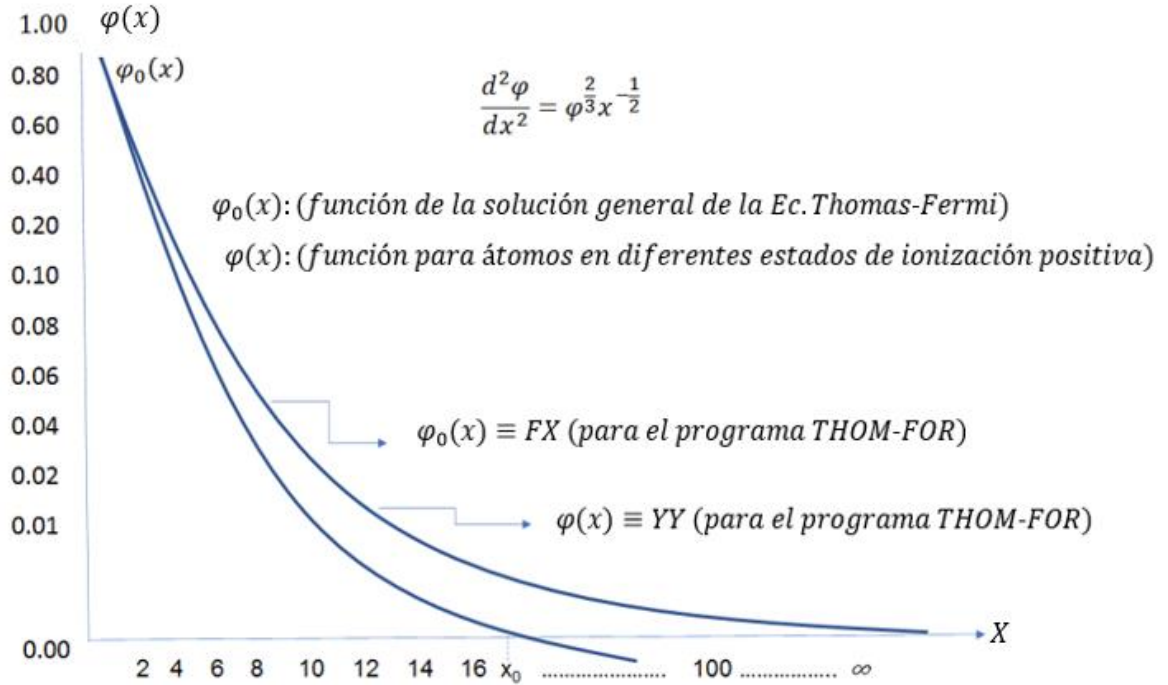
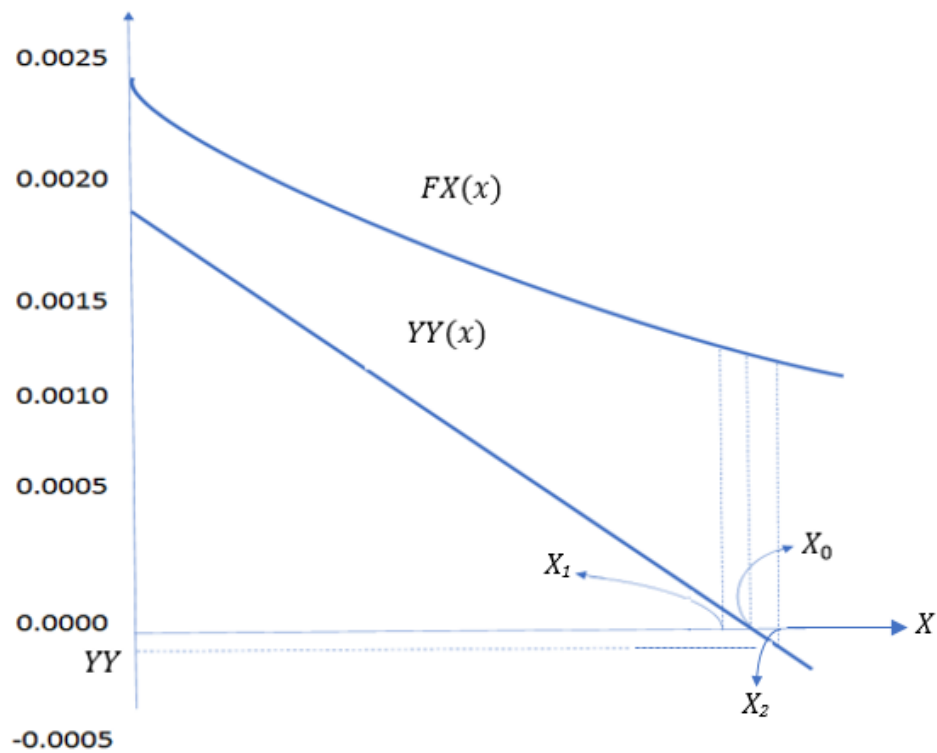


GRÁFICO 2

PUNTO DE INTERCEPTACIÓN x_0 DE LA FUNCIÓN $\varphi(x)$



Así:

$$\varphi'(x_1) = \frac{\begin{vmatrix} [\varphi(x_0) - \varphi(x_1)] & h_1^2 \\ [\varphi(x_2) - \varphi(x_1)] & h_2^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} h_1 & h_1^2 \\ h_2 & h_2^2 \end{vmatrix}}$$

$$\varphi'(x_1) = \frac{(h_1^2 - h_2^2)\varphi(x_1) + h_2\varphi(x_0) - h_1\varphi(x_2)}{h_1 h_2 (h_2 - h_1)} \quad (13)$$

Expresión que representa la forma general de la derivada de la función $\varphi(x_1)$ en el punto x_1 .

Aparentemente no se ha tomado en cuenta el punto x_0 , que es justamente el punto que necesita aproximarse, pero eso queda aclarado toda vez que podemos asumir que la segunda derivada de x_0 no varía mucho respecto a la segunda derivada de x_1 , lo cual hace que sean aproximadamente iguales. Esto se justifica puesto que x_0 es un punto que varía en el entorno de x_1 .

Derivando nuevamente $\varphi'(x_1)$, Ec. (13) tendremos:

$$\varphi''(x_1) \equiv \varphi''_{0_{xx}} = \frac{(h_1^2 - h_2^2)\varphi'(x_1) + h_2^2\varphi'(x_0) - h_1^2\varphi'(x_2)}{h_1 h_2 (h_2 - h_1)}$$

Un análisis similar nos permite deducir que:

$$\eta''_{0_{xk}} = \frac{(h_1^2 - h_2^2)\eta'(x_1) + h_2^2\eta'(x_0) - h_1^2\eta'(x_2)}{h_1 h_2 (h_2 - h_1)}$$

Ahora ya estamos en condiciones de calcular a partir de la Ec. (11) y de la Ec. (9) el incremento Δx , el cual será de la forma:

$$\Delta x = \frac{\left[\frac{Z-N+1}{Z} \right] - x_0 \varphi'_x(x_0, k)}{x_0 \varphi''_{xk}(x_0, k) + \varphi'_x(x_0, k) - \frac{\varphi'_k(x_0, k) \varphi''_{xk}(x_0, k)}{\varphi'_k(x_0, k)} x_0}$$

Y que finalmente se escribirá como:

$$\Delta x = - \frac{\left[\frac{Z-N+1}{Z} \right] - x_0 \varphi'_x(x_0, k)}{x_0 \varphi''_{xk}(x_0, k) + \varphi'_x(x_0, k) \left[1 - \frac{x_0 \varphi''_{xk}(x_0, k)}{\varphi'_k(x_0, k)} \right]}$$

Con esta expresión se determinarán Δx y Δk lo que permitirá aproximarnos mejor a las condiciones de la Ec. (5) y Ec. (6). Si aún no se cumplen; el programa continúa con el proceso iterativo, aproximando Δx y Δk , hasta que se satisfaga la condición.

$$x_0 \varphi'(x_0) + \left[\frac{Z-N+1}{Z} \right] = 0.000001$$

Con lo cual estamos en condiciones de calcular para x_0 :

$$V_0 = \left[\frac{Z-N+1}{r_0} \right] \quad \text{y} \quad V_r = V_0 + \frac{Z\varphi}{r_0}$$

Y teniendo en cuenta la definición de carga eléctrica dado por:

$$Z(r) = r_0 V_r = r_0 V_0 + Z\varphi$$

Y que unidades atómicas es de la forma:

$$Z2(r) = 2Z\varphi + 2r_0 V_r$$

Se confecciona la tabla de potenciales $Z2(r)$ en función de r , para cualquier átomo neutro.

Los cálculos numéricos mostrados a continuación se han realizado para los siguientes elementos: Hierro, Bario y Uranio.

5.3.2 Método numérico para el cálculo de la ecuación diferencial

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) y(x) = \lambda y(x) \quad (1)$$

Consideramos la ecuación exacta de la forma:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) y_0(x) = \lambda_0 y_0(x) \quad (2)$$

Con la condición: $y_0(0) = y_0(\infty) = 0$

donde $y_0(x)$ es la autofunción exacta y λ_0 es el autovalor exacto.

El método numérico para evaluar la solución de la ecuación diferencial será el METODO ITERATIVO DE HARTREE.

Sea λ_1 el estimado inicial del autovalor.

Así: $\lambda_1 = \lambda_0 + \delta\lambda_1$, siendo $\delta\lambda_1$, el error en el estimado de λ_0 . Donde

suponemos que:
$$\left| \frac{\delta\lambda_1}{\lambda_1} \right| \ll 1$$

Al usar λ_1 como autovalor e integrar la ecuación diferencial (1) desde el origen $x = 0$ hasta $x = x_1$, asumimos que $y_f^{(1)}$ es la función que resulta de la integración.

Luego:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) y_f^{(1)} = \lambda_1 y_f^{(1)}, \quad \text{para } 0 \leq x \leq x_1 \quad (3)$$

donde consideramos también que:

$$y_0(0) = y_f^{(1)}(0) = 0 \quad y_0(\infty) = y_f(x_1)$$

Ahora si multiplicamos la ecuación (2) por $y_f^{(1)}(x)$ y la ecuación (3) por $y_0(x)$; y restamos (2) de (3), obtenemos:

$$y_0 \frac{d^2}{dx^2} y_f^{(1)} - y_f^{(1)} \frac{d^2}{dx^2} y_0 = (\lambda_1 - \lambda_0) y_0 y_f^{(1)}$$

con y_0 e $y_f^{(1)}$ en $0 \leq x \leq x_1$

$$\text{ó} \quad \frac{d}{dx} \left[y_0 \frac{d}{dx} y_f^{(1)} - y_f^{(1)} \frac{d}{dx} y_0 \right]_{x=0}^{x=x_1} = \delta \lambda_1 y_0 y_f^{(1)} \quad (4)$$

Al integrar (4) de $x = 0$ a $x = x_1$, se tiene:

$$y_0 \frac{d}{dx} y_f^{(1)} - y_f^{(1)} \frac{d}{dx} y_0 \Big|_{x=0}^{x=x_1} = \delta \lambda_1 \int_0^{x_1} y_0 y_f^{(1)} dx \quad (5)$$

Si asumimos que: $y_f^{(1)} = y_f^{(1)}(x_1)$

y definimos: $\bar{y}_f^{(1)}(x) = \frac{y_f^{(1)}(x)}{y_f^{(1)}(x_1)}$

se puede tener una primera conclusión particular; que:

$$\bar{y}_f^{(1)}(x_1) = 1$$

Con lo que la Ec. (5) puede reescribirse al dividir ésta por $y_f^{(1)}(x_1)$;

$$y_0 \frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(1)} - \bar{y}_f^{(1)} \frac{d}{dx} y_0 \Big|_{x=0}^{x=x_1} = \delta \lambda_1 \int_0^{x_1} y_0 \bar{y}_f^{(1)} dx \quad (6)$$

Ahora queremos integrar la ecuación diferencial (4):

de $x=x_2$, (con $x_2 \gg x_1$) a $x = x_1$ esto es; una integración hacia adentro.

Para esto es necesario conocer el punto inicial $y(x_2)$; y su derivada dy/dx .

Considerando la forma asintótica de la ecuación diferencial cuando $x \rightarrow \infty$,

es posible hacer un estimado para $\frac{1}{y} dx$ en el punto $x = x_2$ ($x_2 \rightarrow \infty$), no así

en el punto $x = x_1$ en razón de que el estimado del autovalor en $x = x_2$ es intrascendente.

Al hacer la integración hacia adentro de la Ec. (4) consideremos a la función $y_d^{(1)}(x)$ como resultado de la misma, siendo λ_1 , también su autovalor. Por un análisis similar al obtenido en la expresión (4), tendremos:

$$\frac{d}{dx} \left(y_0 \frac{d}{dx} y_d^{(1)} - y_d^{(1)} \frac{d}{dx} y_0 \right) = \delta \lambda_1 y_0 y_d \quad \text{para } x_1 \leq x \leq x_2$$

$$\text{ó} \quad y_0 \frac{d}{dx} y_d^{(1)} - y_d^{(1)} \frac{d}{dx} y_0 \Big|_{x=x_2}^{x=x_1} = \delta \lambda_1 \int_{x_2}^{x_1} y_0 y_d^{(1)} dx \quad (7)$$

Análogamente definimos:

$$y_{d_1}^{(1)} = y_d^{(1)} \quad \text{e} \quad \bar{y}_d^{(1)}(x) = \frac{y_d^{(1)}(x)}{y_{d_1}^{(1)}}$$

Dividiendo (7) por $y_{d_1}^{(1)}(x_1)$, obtenemos:

$$y_0 \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(1)} - \bar{y}_d^{(1)} \frac{d}{dx} y_0 \Big|_{x=x_2}^{x=x_1} = \delta \lambda_1 \int_{x_2}^{x_1} y_0 \bar{y}_d^{(1)} dx \quad (8)$$

Ahora, restamos (8) de (6) y tendremos:

$$\left(y_0 \frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(1)} - \bar{y}_f^{(1)} \frac{d}{dx} y_0 \right) \Big|_{x=0}^{x=x_1} + \left(y_0 \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(1)} - \bar{y}_d^{(1)} \frac{d}{dx} y_0 \right) \Big|_{x=x_1}^{x=x_2} = \delta \lambda_1 \int_0^{x_2} y_0 \bar{y}^{(1)} dx \quad (9)$$

donde se ha tenido en cuenta que:

$$\bar{y}^{(1)}(x_2); \frac{d}{dx} \bar{y}^{(1)}(x_2); y_0(x_2); \frac{d}{dx} y_0(x_2)$$

se pueden despreciar.

Luego:

$$\bar{y}^{(1)}(x) = \begin{cases} \bar{y}_f^{(1)}, & 0 \leq x \leq x_1 \\ \bar{y}_d^{(1)}, & x_1 \leq x \leq x_2 \end{cases}$$

Puesto que habíamos considerado que $y_0(x)$ era la solución exacta de la Ec.(2) lo cual hace que sea continua en $x = x_1$ como también su derivada dy_0/dx . Vamos a asumir que las funciones $y_f^{(1)}$ e $y_d^{(1)}$ cumplen que:

$$\bar{y}_f^{(1)}(x_1) = \bar{y}_d^{(1)}(x_1) = 1$$

Con lo cual la Ec.(9) se reduce a:

$$\left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(1)} - \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(1)} \right) \Big|_{x=x_1} = \delta\lambda_1 \int_0^{x_2} y_0 \bar{y}^{(1)} dx \quad (10)$$

Como hemos asumido que λ_1 era el autovalor para $y_f^{(1)}$ e $y_d^{(1)}$ es posible esperar que las derivadas de esas funciones coincidan en el punto $x = x_1$.

Además, puesto que no se conoce $y_0(x)$ no es posible evaluar la integral de la Ec.(10) y por lo tanto no se puede calcular $\delta\lambda_1$.

Es posible tener un estimado de $\delta\lambda_1$ si hacemos que $y_0(x) \cong y(1)(x)$ debido a que $\delta\lambda_1$ representa un valor pequeño.

Si ahora usamos la expresión $\lambda' = \lambda_1 + \Delta\lambda$, siendo $\Delta\lambda_1$ una cantidad pequeña y conocida, tendremos:

$$\left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(1)} - \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(1)} \right) \Big|_{x=x_1} = (\lambda' - \lambda_0) \int_0^{x_2} y_0 \bar{y}^{(1)} dx \quad (11)$$

Como $\lambda_1 - \lambda_0 = \delta\lambda_1$ Entonces $\lambda_1 - \lambda_0 = \delta\lambda_1 + \Delta\lambda$

$$\lambda' - \lambda_1 = \Delta\lambda$$

$$\text{Luego: } \left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(1)} - \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(1)} \right) \Big|_{x=x_1} = (\delta\lambda' + \Delta\lambda) \int_0^{x_2} y_0 \bar{y}^{(1)} dx \quad (12)$$

Haciendo la aproximación $\lambda' = \bar{y}^{(1)}$, debido a que $\Delta\lambda$ es pequeño, restamos la Ec.(11) de la Ec.(12), obteniendo:

$$\left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(1)} - \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(1)} \right) \Big|_{x=x_1} - \left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(1)} - \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(1)} \right) \Big|_{x=x_1} = \Delta\lambda \int_0^{x_2} y_0 \bar{y}^{(1)} dx \quad (13)$$

Pudiéndose ahora calcular la integral.

Por lo que es posible calcular $\delta\lambda_1$ de la Ec.(10) relacionándola con la Ec. (13).

Así:

$$\delta\lambda_1 \Delta\lambda \left[\frac{\left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(1)} - \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(1)} \right)}{\left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f' - \frac{d}{dx} \bar{y}_d' \right)_{x=x_1} - \left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(1)} - \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(1)} \right)_{x=x_1}} \right]_{x=x_1} \quad (14)$$

Ahora definimos: $D = \left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f - \frac{d}{dx} \bar{y}_d \right) \Big|_{x=x_1}$

Así, la Ec.(14) toma la forma:

$$\delta\lambda_1 = \Delta\lambda = \left(\frac{D^{(1)}}{D' - D^{(1)}} \right)$$

Un mejor estimado del autovalor λ_2 es:

$$\lambda_2 = \lambda_1 - \delta\lambda_1 = \lambda_0 + \delta\lambda_2^0, \quad \text{toda vez que } \lambda_1 = \lambda_0 + \delta\lambda_1$$

Debido a todas las aproximaciones introducidas $\delta\lambda_1$ no representa el error exacto $\delta\lambda_1^0$.

Por lo que repetiremos las integraciones para λ_2 y obtendremos:

$$D^{(2)} = \left(\frac{d}{dx} \bar{y}_f^{(2)} - \frac{d}{dx} \bar{y}_d^{(2)} \right) \Big|_{x=x_1} = \delta\lambda_2^1 \int_0^{x_2} y_0 \bar{y}^{(2)} dx \quad (15)$$

$$\text{Luego:} \quad D^{(1)} = \delta\lambda_0 \int_0^{x_2} y_0 \bar{y}^{(1)} dx \quad (16)$$

Y como: $\lambda_1 = \lambda_0 + \delta\lambda_1^0$ tendremos: $\delta\lambda_2^1 = \delta\lambda_1^0 - \delta\lambda_1$

Restando la Ec.(15) de la Ec.(16), obtenemos:

$$D^{(1)} - D^{(2)} = \delta\lambda_1 \int_{0^{(1)}}^{x_2} y_0 \bar{y}^{(2)} dx \quad (17)$$

Aquí se ha aproximado: $\bar{y}^{(2)} = \bar{y}^{(1)}$

Obteniendo $\delta\lambda_2$ de las ecuaciones (15) y (17):

$$\delta\lambda_2 = \delta\lambda_1 \left(\frac{D^{(2)}}{D^{(1)} - D^{(2)}} \right) \quad (18)$$

Se ha considerado $\delta\lambda_2$ en lugar de $\delta\lambda_2^0$ por las aproximaciones introducidas.

Así, la Ec.(18) nos permite escribir una expresión general para la n-ésima corrección $\delta\lambda_n$; del autovalor.

Por lo tanto:

$$\delta\lambda_n = \delta\lambda_{n-1} \left(\frac{D^{(n)}}{D^{(n-1)} - D^{(n)}} \right)$$

Las interacciones continúan hasta cumplir la condición:

$$\left| \frac{\delta\lambda_n}{\delta\lambda_{n-1}} \right| < \varepsilon$$

Siendo ε el grado de precisión que se desea obtener. Además, durante el proceso iterativo se comprueba que;

$$|\delta\lambda_n| < \Delta\lambda$$

Si $|\delta\lambda_1| > \Delta\lambda$ se utiliza $\lambda_2^1 = \lambda_1 - \Delta\lambda$ en lugar de $\lambda_1 - \delta\lambda_1$.

Un análisis similar se hace con $\delta\lambda_2$.

El número de iteraciones a realizarse estará en función del grado de precisión ε .

5.3.3 Proceso de Integración de la Ecuación de Onda

Consideramos la ecuación diferencial

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2x^2} + V(x) \right] y(x) = \lambda y(x) \quad (1)$$

Si el núcleo se considera puntual, esta ecuación diferencial toma la forma:

$$\frac{d^2}{dx^2} y(x) = \left[\frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + 2V(x) - 2\lambda \right] y(x) \quad (2)$$

dónde: $0 \leq x < \infty$

Siendo: $V(x) = -\frac{Z}{x}$ cuando $x \rightarrow 0$

Si $x = 0$, $V(x)$ es indefinida.

Al iniciar la integración para encontrar la función $y(x)$, es necesario analizar su comportamiento en la vecindad de $x = 0$, para lo cual se utilizará el método de solución en series de potencias de la forma:

$$y(x) = x^s \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad (3)$$

Expresión para que $y(x)$ deba satisfacer las condiciones de ser finita y analítica.

Al sustituir la Ec.(3) en la Ec.(2) podemos encontrar las relaciones que permiten determinar las constantes s y a_n .

Así: $s = \ell + 1$ $a_0 = \text{constante} \neq 0$

$$a_1 = \frac{-2Z}{s(\ell + 1)} a_0$$

$$a_2 = \left[\frac{(2Z)^2}{4(\ell + 1)(2\ell + 3)} - \frac{2\lambda}{2(2\ell + 3)} \right] a_0$$

$$a_{m+2} = - \frac{2Za_{m+1} + 2\lambda a_m}{m(2\ell + m + \ell)}$$

por lo que, la función $y(x)$ en la vecindad del origen toma la forma:

$$\begin{aligned} y(x) &= x^{\ell+1} (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots) \\ &= x^{\ell+1} \left[a_0 + \frac{-2Z}{2(\ell + 1)} a_0 x + \left\{ \frac{(2Z)^2}{4(\ell + 1)(2\ell + 3)} - \frac{2\lambda}{2(2\ell + 3)} \right\} a_0 x^2 + \dots \right] \quad (4) \\ &= x^{\ell+1} \left[1 - \frac{2Z}{2(\ell + 1)} x + \frac{1}{2(2\ell + 3)} \left\{ \frac{(2Z)^2}{2(\ell + 1)} - 2\lambda \right\} x^2 + o(x^3) \right] \end{aligned}$$

donde se han omitido los términos de orden 3 (en x^3) por ser x bastante pequeño (próximo a la vecindad de $x = 0$)

Con $y(x)$ omitiendo términos de orden 2 (en x^2).

Así, para la función:

$$y(x) = x^{(\ell+1)} a_0 \left[1 + \frac{-Z}{(\ell + 1)} x + o(x^2) \right]$$

Su derivada será de la forma:

$$\begin{aligned}
 y'(x) &= (\ell + 1)x^\ell a_0 \left[1 + \frac{-Z}{(\ell + 1)}x + 0(x^2) \right] + x^{\ell+1} a_0 \left[\frac{-Z}{(\ell + 1)} + 0(x^2) \right] \\
 &= (\ell + 1)x^\ell a_0 \left[1 + \frac{-Z}{(\ell + 1)}x + \frac{-Z}{(\ell + 1)^2}x + 0(x^2) \right] \\
 &= (\ell + 1)x^\ell a_0 \left[1 - \frac{Z}{(\ell + 1)} \left(1 + \frac{1}{\ell + 1} \right) x + 0(x^2) \right] \\
 y'(x) &= (\ell + 1)x^\ell a_0 \left[1 - \frac{(\ell + 2)Z}{(\ell + 1)}x + 0(x^2) \right] \tag{5}
 \end{aligned}$$

Aplicando las condiciones de frontera en la Ec.(4) (para $x = 0$, $y(0) = 0$) y siendo necesario conocer $y'(x)$ en $x = 0$ para iniciar el proceso de integración hacia afuera con las condiciones:

$$y'(0) = \begin{cases} a_0 & \text{para } \ell = 0 \\ 0 & \text{para } \ell > 0 \end{cases}$$

El proceso de integración no puede iniciarse en $x = 0$ puesto que el potencial $V(x)$ es indefinido, por lo que la integración se inicia en un punto x_0 cercano al origen. Por lo tanto, la Ec.(4) y la Ec.(5) podrán reescribirse como:

$$\begin{aligned}
 y_0 = y(x_0) &= a_0 x_0^{\ell+1} \left[1 - \frac{Z}{(\ell + 1)}x_0 + 0(x_0^2) \right] \\
 p_0 = y'(x_0) &= a_0 (\ell + 1)x_0^\ell \left[1 - \frac{Z(\ell + 2)}{(\ell + 1)}x_0 + 0(x_0^2) \right]
 \end{aligned}$$

Donde p_0 puede ponerse en función de y_0 , toda vez que x_0 es bastante pequeño. Así, se muestra en la siguiente expresión:

$$p_0 \cong \frac{(\ell + 1)y_0}{x_0} = p^* = \frac{(\ell + 1)a_0 x_0^{\ell+1}}{x_0} \left[1 - \frac{Z}{(\ell + 1)}x_0 + 0(x_0^2) \right]$$

El valor estimado de p^* contiene un error relativo δ , dado por:

$$\delta = \frac{p^* - p_0}{p_0}$$

Luego:

$$\delta = \frac{\frac{(\ell+1)a_0 x_0^{\ell+1}}{x_0} \left[1 - \frac{Z}{(\ell+1)} x_0 + O(x_0^2) \right] - \frac{(\ell+1)a_0 x_0^{\ell+1}}{x_0} \left[1 - \frac{Z(\ell+2)}{(\ell+1)^2} x_0 \right]}{\frac{(\ell+1)a_0 x_0^{\ell+1}}{x_0} \left[1 - \frac{Z(\ell+2)}{(\ell+1)} x_0 + O(x_0^2) \right]}$$

simplificando:

$$\delta = \frac{\frac{Zx_0}{(\ell+1)^2}}{1 - \frac{Z(\ell+2)}{(\ell+1)^2} x_0} \cong \frac{Zx_0}{(\ell+1)^2}$$

Expresión que permite evaluar las aproximaciones que se introducen en el cálculo.

Al iniciar la integración hacia adentro, a partir de $x = x_2$, consideremos el comportamiento asintótico de la solución de la Ec.(2) cuando $x \rightarrow \infty$. En esta región se cumple la siguiente condición:

$$\frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + 2V(x) - 2\lambda > 0 \quad \text{para} \quad x > x_1$$

cuya solución viene dada por la expresión:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} y(x) = C \exp \left[- \int_{x_2}^{x_1} \sqrt{\frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + 2V(x) - 2\lambda} \, dx' \right]$$

siendo su derivada:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} y(x) \frac{d}{dx} y(x) = - \sqrt{\frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + 2V(x) - 2\lambda} \, y(x)$$

Por lo que los valores iniciales para la integración hacia adentro se muestran seguidamente:

$$y(x_2) = y_2 = \text{constante arbitraria} \neq 0$$

$$y'(x_2) = y'_2 - \sqrt{\frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + 2V(x) - 2\lambda} \quad y_2$$

Siendo $x_2 > x_1$ y suficientemente grande para que el error en el estimado de y'_2 sea convenientemente más pequeño.

De lo expuesto anteriormente se deduce que, los valores iniciales de las derivadas de $y(x)$ no se conocen con precisión por lo que en el estimado de los mismos se introduce un error.

Error que debe tenerse en cuenta al hacer uso del método de integración de RUNGE-KUTTA. El efecto de estos errores iniciales puede minimizarse al escoger para x_0 y x_2 una red de integración conveniente. Además, si el método de integración es estable los efectos de estos errores se atenúan por el mismo proceso de integración. (Bravo, 1971)

VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1 Contrastación y Demostración de las Hipótesis con los Resultados

El cálculo de las funciones de onda de campo central utilizando el potencial de Thomas-Fermi modificado para átomos en diferentes estados de ionización positiva fue realizado computacionalmente por el PROGRAMA ELIG, el cual me ha permitido determinar los niveles de energía para los diferentes átomos.

6.2 Contrastación de los resultados con otros estudios similares.

Teniendo en cuenta el MARCO TEORICO y el rubro antecedentes internacionales, en la Revista Colombiana de Física, Vol.39, N°1, se presentan resultados para el elemento H- (Hidrógeno negativo) satisfactorios, así también en antecedentes nacionales, en la Tesis “Cálculo del Potencial de Ionización y Afinidad Electrónica de los Átomos de oro, cobre y plata” se presenta una buena aproximación en base a los métodos computacionales utilizados.

6.3 Responsabilidad Ética

De acuerdo a los reglamentos vigentes, el autor se responsabiliza por la información emitida en el informe.

Se ha tomado en cuenta las referencias bibliográficas respetando la Directiva 004, así mismo, los niveles de similitud que corresponden a la maestría.

VII. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se realizó:

1. El estudio teórico de las propiedades de los átomos y de este conocimiento se obtuvo la información relacionada con su estructura lo que permite la aplicación de la ecuación del potencial de Thomas-Fermi modificado y de crear el algoritmo que permita el cálculo del potencial estadístico para cualquier átomo o ion en cualquier estado de ionización en base al método iterativo de Hartree.
2. Se encontró una solución aproximada al aplicar la ecuación de Schrödinger para átomos con más de un electrón apoyado en la solución dada por E. Hylleras.
3. Se encontró un método de aproximación en el hamiltoniano con el fin de que este adquiriera una forma más simple para el operador de interacción de intercambio electrónico y dar una interpretación acerca del término de intercambio para el estado base, así como de forma menos exacta, para estados excitados de los átomos.
4. Se determinaron los resultados a partir de la ecuación de Schrödinger para los orbitales de algunos átomos y se les comparó con valores experimentales calculados en tablas.
5. Se encontró, considerando el potencial estadístico de Thomas-Fermi modificado, en la ecuación de Schrödinger, la solución que permite obtener los estados cuánticos estacionarios descritos por

las funciones de onda y sus correspondientes niveles de energía para los átomos de hierro, bario y uranio.

En el proceso de integración numérica se hicieron aproximaciones para la solución a través del desarrollo en series, con la aplicación del Método de Runge-Kutta que permite resolver ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden, el otro Método es el de Correctores-Predictores que se basa en la sustitución de las derivadas por una aproximación en diferencias finitas. Esto ha permitido aproximarse mejor al valor esperado, pero siempre dentro de un margen de error.

VIII. RECOMENDACIONES

1. Los métodos iterativos utilizados para el cálculo de la ecuación universal de Thomas-Fermi y su función de corrección, así como para la solución de la ecuación radial de Schrödinger que determina los autovalores de la energía para diferentes orbitales, fueron hechos dentro de un determinado rango de precisión, esto es, los pasos o intervalos de integración tuvieron determinados valores los cuales pueden variarse para precisar aún más los resultados.
2. Finalmente, este trabajo puede tener mejores resultados si se considera un potencial más elaborado que el potencial de Thomas-Fermi.

IX. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Allen, T., & L.Tassie. (1991). Dirac equations in the Field of the Charge Cosmic string and in the Field of a Point charge With $z = 137$. *Aust J. Phys*, 585-590.
- Alonso, M., & Finn, E. J. (1981). *Física a Volumen III, Fundamentos cuánticos y estadísticos*. Bogotá: Fondo Educativo Interamericano .
- Arotaipe Ala, R. (2019). Cálculo del potencial de ionización y afinidad electrónica de los átomos de oro, cobre y plata mediante electrodinámica cuántica variacional. *Tesis*. Universidad Nacional de San Agustín, Arequipa.
- Baker, E. B. (s.f.). The Application of the Fermi-Thomas Statical model to the calculation of potential Distribution in Positive ions. *Physical Review*, 36, 630-647.
- Beiser, A. (2017). *Conceptos de Física Moderna*. México : McGraw Hill.
- Beiser, A. (2017). *Conceptos de la física moderna* . Nueva York: McGraw - Hill Book Company inc.
- Bravo, J. A. (1971). Photoionization of neutral barium vapor by sun light in the upper atmosphere of the earth. *Tesis Doctoral*. North Carolina State University.
- Buj, J. A. (2015). Un Método para el Cálculo de la Mejor Función de Interacción Electrón-Electrón para un Funcional de Intercambio y Correlación Dado. *Tesis de maestría*. Universidad de Zaragoza, Zaragoza. Obtenido de <https://zaguan.unizar.es/record/31648>
- Cabrera Arista, C. (2023). https://scholar.google.com/citations?view_op=view_citation&hl=es&user=BNZtZ9EAAAJ&citation_for_view=BNZtZ9EAAAJ:KlAtU1dfN6UC.
- Carbajal. (2017). Implementación de la Funcional de Intercambio exacto con la aproximación de KLI en el quantum espeso. *tesis de Licenciatura*. Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza- Argentina.
- Eisberg, R. (2000). *Fundamentos de la Física Moderna*. México: Editorial Limusa.
- Eisberg, R. M. (2002). *Fundamentos de la Física Moderna* . Mexico: Limusa-Wiley S.A.
- Equations of State of Elements Based on the Generalized Fermi-Thomas Theory. (1948). *Physical Review Journal Archive*. doi:<https://doi.org/10.1103/PhysRev.75.1561>
- Gombas, P. (1963). Present State of the Statistical Theory of Atoms. *Reviews of Modern Physics*, 35(3), 512-516.
- Juan, R. A. (2013). Calculo de parametro de red del sistema AlZr-B2 en estructuras BBC utilizando el metodo FP-LAPW. *Tesis de Licenciatura*. Universidad Nacional del Callao, Callao.

- Pueyo, A. G. (2015). Un Método para el Cálculo de la Mejor Función de Interacción Electron-Electron para un Funcional de Intercambio y Correlación Dado. *Tesis de maestría*. Universidad de Zaragoza, Zaragoza.
- Ramos Alvarado, J. (2013). Cálculo del parámetro de reo del sistema A1Zr-B2 en la estructura BBC utilizando el método FP-LAPW. *Tesis de licenciatura*. Universidad Nacional del Callao, Callao.
- Segura, M., Tamayo, G. M., & Espejo, C. (2007). EL ION H- EN EL MODELO DE THOMAS-FERMI-AMALDI. *REVISTA COLOMBIANA DE FÍSICA*, 39(1).
- Serway, R. A., & Vuille, C. (2012). *Fundamentos de Física*. México : Cengage Learning.
- Slater, J. C. (1928). The Self Consistent Field and the Structure of Atoms. *Physical Review Journals Archive*, 32, 339. doi:<https://doi.org/10.1103/PhysRev.32.339>
- Tipler, P. A. (2001). *Física para la Ciencia y la Tecnología*. Barcelona: Editorial Reverte S.A.
- Vitery, F. C., & Castañeda, É. G. (2011). *Mecánica cuántica Sobre su interpretación, historia y filosofía* (1ª ed.). Bogotá: Fundación Universidad de Bogotá Jorge Tadeo Lozano.
- Wikipedia. (s.f.). sin título. Obtenido de https://es.wikipedia.org/wiki/Mec%C3%A1nica_cu%C3%A1ntica

ANEXO 1

Matriz de Consistencia

CÁLCULO DE FUNCIONES DE ONDA DE CAMPO CENTRAL UTILIZANDO EL POTENCIAL DE THOMAS – FERMI MODIFICADO PARA ÁTOMOS EN DIFERENTES ESTADOS DE IONIZACIÓN POSITIVA, CALLAO 2023”

PROBLEMA GENERAL	OBJETIVOS GENERAL	HIPÓTESIS	VARIABLES	INDICADORES	METODOLOGÍA
¿Cuáles serán las funciones de onda y los niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante el uso potencial de Thomas-Fermi modificado en la ecuación de Schrödinger:?	Determinar las funciones de onda y los niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante el uso potencial de Thomas-Fermi modificado en la ecuación de Schrödinger	El uso del potencial de Thomas-Fermi modificado permite determinar en la ecuación de Schrödinger las funciones de onda y los niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio.	VARIABLE I: Funciones de Onda de Campo Central utilizando el Potencial de Thomas – Fermi	Niveles de energía de los diferentes átomos	Enfoque. Mixto Tipo. cuantitativo Método. Hipotetico deductivo El proceso metodológico consiste en el estudio de las teorías Thomas Fermi, y su aplicación en un programa Fortran 90 mediante los sistemas iterativos numéricos como Runge Kutta para calcular los niveles de energía de diferentes elementos como Bario, Fierro y Uranio.
<u>OBJETIVOS ESPECÍFICOS</u> ¿Cuáles serán las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante el método estadístico corrector-predictor? ¿Cuál serán las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante el método estadístico Runge Kutta?	<u>OBJETIVOS ESPECÍFICOS</u> Determinar las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante el método estadístico corrector-predictor. Determinar las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio, mediante el método estadístico Runge Kutta,	<u>HIPOTESIS ESPECÍFICAS</u> El método estadístico corrector-predictor permite determinar los resultados numéricos de las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio. El método estadístico Runge Kutta permite determinar los resultados numéricos de las funciones de onda y sus niveles de energía para los átomos de fierro, bario y uranio.	VARIABLE II: Átomos en diferentes estados de ionización positiva. Estados y niveles energía de los elementos Bario, Fierro y Uranio.	Aproximado de los Niveles de energía del Bario, Fierro y Uranio Mayor precisión de los Niveles de energía del Bario, Fierro y Uranio	

ANEXO 2

UNIDADES ATÓMICAS

MAGNITUD	DEFINICIÓN	NOMBRE	SISTEMA INTERNACIONAL
Longitud	$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$	bohr	$5,29177 \times 10^{-11} \text{ m}$
Masa	m_e		$9,10939 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Carga	e		$1,602218 \times 10^{-19} \text{ C}$
Energía	$E_k = \frac{m_e e^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}$	hartre	$4,35975 \times 10^{-15} \text{ J}$
Momento Angular	\hbar		$1,05457 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Tiempo	$\frac{\hbar}{E_k}$		$2,41888 \times 10^{-17} \text{ s}$
Permitividad	$\frac{1}{\pi}$		$8,85419 \times 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1}$
Potencial Eléctrico	$\frac{E_k}{e}$		$27,2114 \text{ v}$
Momento Dipolar Eléctrico	$e a_0$		$8,87836 \times 10^{-30} \text{ C m}$
Densidad de Flujo Magnético	$\frac{\hbar}{e a_0}$		$2,35052 \times 10^5 \text{ T}$
Momento Dipolar Magnético	$\frac{e\hbar}{m_e}$		$1,85480 \times 10^{-23} \text{ J T}^{-1}$
Constante de Estructura	$\alpha = \frac{1}{c} \sim \frac{1}{137}$		
fin de Sommerfield			
	Velocidad de la luz		$c = 137$

ANEXO 3

Solución general de la ecuación de Thomas- Fermi

THOMAS-DAT				
x	$\rho_0(x)$	$-\rho'_0(x)$	$\eta_0(x)$	$\eta'_0(x)$
0.00000	1.0000000000	1.5880710000	0.00000	1.00000
0.01000	0.9854500000	1.3895600000	0.01000	1.00100
0.02000	0.9719800000	1.3093000000	0.02002	1.00281
0.03000	0.9592000000	1.2489700000	0.03006	1.00514
0.04000	0.9469600000	1.1991000000	0.04013	1.00788
0.05000	0.9351900000	1.1560000000	0.05022	1.01098
0.06000	0.9238300000	1.1177400000	0.06035	1.01438
0.07000	0.9128200000	1.0831900000	0.07051	1.01807
0.08000	0.9021500000	1.0516100000	0.08071	1.02202
0.09000	0.8917800000	1.0224600000	0.09095	1.02620
0.10000	0.8817000000	0.9953500000	0.10123	1.03060
0.20000	0.7930600000	0.7942300000	0.20686	1,08460
0.30000	0.7206400000	0.6618000000	0.31862	1.15277
0.40000	0.6595400000	0.5646400000	0.43778	1.23208
0.50000	0.6069900000	0.4894100000	0.56536	1.32103
0.60000	0.5611600000	0.4291700000	0.70228	1.41873
0.70000	0.5207900000	0.3797900000	0.84938	1.52464
0.80000	0.4849300000	0.3386100000	1.00747	1.63843
0.90000	0.4528600000	0.3037800000	1.17731	1.75991
1.00000	0.4240100000	0.2739900000	1.35969	1.88895
1.20000	0.3742400000	0.2259100000	1.76504	2.16960
1.40000	0.3329000000	0.1890400000	2.22960	2.48050
1.60000	0.2981000000	0.1601100000	2.75930	2.82220
1.80000	0.2684700000	0.1370000000	3.36050	3.19540
2.00000	0.2430100000	0.1182400000	4.03960	3.60120
2.20000	0.2209500000	0.1028300000	4.80320	4.04060

2.40000	0.2017000000	0.0900260000	5.65820	4.51490
2.60000	0.1848000000	0.0792860000	6.61160	5.02530
2.80000	0.1698800000	0.0702000000	7.67080	5.57300
3.00000	0.1566300000	0.0624570000	8.84340	6.15940
3.20000	0.1448200000	0.0558130000	10.13700	6.78580
3.40000	0.1342500000	0.0500770000	11.56100	7.45380
3.60000	0.1247400000	0.0450980000	13.12200	8.16460
3.80000	0.1161700000	0.0407530000	14.82900	8.91980
4.00000	0.1084000000	0.0369440000	16.69300	9.72080
4.50000	0.0919480000	0.0292710000	22.09400	11.93300
5.00000	0.0788080000	0.0235600000	28.67900	14.46600
5.50000	0.0681600000	0.0192210000	36.61800	17.34200
6.00000	0.0594230000	0.0158680000	46.08400	20.58900
6.50000	0.0521730000	0.0132360000	57.27300	24.23000
7.00000	0.0460980000	0.0111432000	70.38500	28.29400
7.50000	0.0409620000	0.0094583000	85.64100	32.80700
8.00000	0.0365870000	0.0080886000	103.27000	37.79700
8.50000	0.0328330000	0.0069642000	123.52000	43.29300
9.00000	0.0295910000	0.0060331000	146.66000	49.32200
9.50000	0.0267740000	0.0052559000	172.94000	55.91600
10.00000	0.0243140000	0.0046029000	202.67000	63.10500
10.50000	0.0221550000	0.0040502000	236.15000	70.91800
11.00000	0.0202500000	0.0035798000	273.69000	79.39000
11.50000	0.0185640000	0.0031771000	315.65000	88.54000
12.00000	0.0170640000	0.0028305000	362.35000	98.42000
12.50000	0.0157250000	0.0025309000	414.20000	109.05000
13.00000	0.0145260000	0.0022705000	471.53000	120.47000
13.50000	0.0134490000	0.0020434000	534.80000	132.71000
14.00000	0.0124780000	0.0018445000	604.40000	145.80000
14.50000	0.0116010000	0.0016696000	680.74000	159.79000
15.00000	0.0108050000	0.0015153000	764.33000	174.69000

15.50000	0.0100830000	0.0013787000	855.59000	190.57000
16.00000	0.0094241000	0.0012574000	955.04000	207.44000
16.50000	0.0088229000	0.0011494000	1063.20000	225.43000
17.00000	0.0082728000	0.0010529000	1180.60000	244.34000
17.50000	0.0077683000	0.0009664500	1307.70000	264.43000
18.00000	0.0073048000	0.0008888300	1445.20000	285.67000
18.50000	0.0068782000	0.0008189600	1593.60000	308.11000
19.00000	0.0064847000	0.0007559200	1753.50000	331.78000
19.50000	0.0061213000	0.0006989100	1925.60000	356.72000
20.00000	0.0057849000	0.0006472500	2110.40000	382.97000
21.00000	0.0051839000	0.0005576600	2521.20000	439.57000
22.00000	0.0046646000	0.0004832300	2991.50000	501.92000
23.00000	0.0042134000	0.0004209400	3527.10000	570.40000
24.00000	0.0038194000	0.0003684900	4134.40000	645.20000
25.00000	0.0034738000	0.0003240400	4819.90000	727.00000
26.00000	0.0031691000	0.0002861700	5590.70000	815.80000
28.00000	0.0026602000	0.0002258000	7417.90000	1016.60000
30.00000	0.0022558000	0.0001806700	9679.00000	1250.70000
35.00000	0.0015509000	0.0001089100	17707.00000	2003.00000
40.00000	0.0011136000	0.0000696680	30179.00000	3097.00000
42.00000	0.0008275400	0.0000466940	48650.00000	4412.00000
50.00000	0.0006322600	0.0000324990	74960.00000	6188.00000
60.00000	0.0003939100	0.0000171980	16024.10000	11220.00000
70.00000	0.0002622700	0.0000099566	30752.10000	18710.00000
80.00000	0.0001835500	0.0000061662	54470.10000	29300.00000
90.00000	0.0001335500	0.0000040245	90620.10000	43700.00000
100.00000	0.0001002400	0.0000027393	14340.10000	62670.00000

ANEXO 4

PROGRAMA PARA CALCULAR EL POTENCIAL ESTADÍSTICO DE FERMI-THOMAS

Para un átomo dado su número atómico, Z, y su número de electrones, N, que contiene.

Si se da un numero de electrones como $N=Z$, el programa calcula el potencial del átomo neutro.

```
DIMENSION R(128),Z2(128)
```

```
COMMON XX,FX,DFX,GX,FXX,GXX,X,Z,N, YY1,YY2,FX1,FX2,XX1,XX2,GX1,  
1GX2,YY,Y,DGX,AK,DGX1,DGX2,DGXX,FIXX,DFX1,DFX2,DFXX,KJ,XX0,DFX0,  
DGX
```

```
20,FFXX,DFFX,GIXX,TARJ(84,5),L,JJ,B,VO
```

```
COMMON/INOUT/IR,IW
```

```
OPEN(10,FILE='THOMAS.DAT',STATUS='OLD')
```

```
OPEN(20,FILE='POTENC.DAT',STATUS='UNKNOWN')
```

```
IR=10
```

```
IW=20
```

```
CALL REY
```

```
J1=JJ
```

```
WRITE(6,400)AK
```

```
400 FORMAT(1H1,30X,'POTENCIAL CENTRAL PARA EL ATOMO DE'/42X,'  
'/1X,'CONSTANTE DE AJUSTE AK=',F15.10//1X,'LA TABLA DE DATOS DE  
ESTÉ EN UNIDADES ATOMICAS '///10X,'DISTANCIA RADIAL',15X,'DOBLE DE  
LA CARGA EFECTIVA'/17X,'UAT',29X,'HARTREES')
```

```
DO 2000 I=1,J1
```

```
XOX=TARJ(I,1)
```

```
XXJ=TARJ(I,2)+AK*TARJ(I,4)
```

WRITE(6,*) XOX,XXJ

R(I)=XOX/B

2000 Z2(I)=2.0*Z*XXJ+2.0*R(I)*VO

DO 401 I=1,J1

401 WRITE(6,2007) R(I),Z2(I)

2007 FORMAT(12X,2(F10.6,25X))

WRITE(20,2006) (R(I),Z2(I) ,I=1,J1)

2006 FORMAT(8F10.6)

CLOSE (10)

CLOSE (20)

CALL EXIT

END

C*****

SUBROUTINE PEON

COMMON XX,FX,DFX,GX,FXX,GXX,X,Z,N, YY1,YY2,FX1,FX2,XX1,XX2,GX1,

1GX2,YY,Y,DGX,AK,DGX1,DGX2,DGXX,FIXX,DFX1,DFX2,DFXX,KJ,XX0,DFX0,D

GX

20,FFXX,DFFX,GIXX,TARJ(84,5),L,JJ,B,VO

REAL N

Y=0

YY=FX+AK*GX

IF(-YY) 9,9,20

9 XX1=XX

FX1=FX

DFX1=DFX

GX1=GX

DGX1=DGX

YY1=YY

L=0

RETURN

20 XX2=XX

FX2=FX

DFX2=DFX

GX2=GX

DGX2=DGX

KJ=KJ-2

XX0=TARJ(KJ,1)

DFX0=TARJ(KJ,3)

DGX0=TARJ(KJ,5)

L=1

YY2=YY

$X = ((Y - YY1) * (XX2 - XX1)) / (YY2 - YY1) + XX1$

WRITE(6,8) X

8 FORMAT(1X,'X=',F15.10/)

RETURN

END

SUBROUTINE ALFIL

```

COMMON  XX,FX,DFX,GX,FXX,GXX,X,Z,N,    YY1,YY2,FX1,FX2,XX1,XX2,GX1,
1GX2,YY,Y,DGX,AK,DGX1,DGX2,DGXX,FIXX,DFX1,DFX2,DFXX,KJ,XX0,DFX0,D
GX
20,FFXX,DFFX,GIXX,TARJ(84,5),L,JJ,B,VO
FXX=((FX1-FX2)/(XX1-XX2))*(X-XX2)+FX2
DFXX=((DFX2-DFX1)*(X-XX1)/(XX2-XX1))+DFX1
WRITE(6,88) FXX,DFXX
88 FORMAT(1X,'FXX=',F15.10,2X,'DFXX=',F15.10/)
H2=XX2-XX1
H1=XX0-XX1
DEN=H1*H2*(H2-H1)
WRITE(6,985) H2,H1,DEN
985 FORMAT(1X,'H2=',F15.5,2X,'H1=',F15.5,2X,'DEN=',F15.5/)
FIXX=-((H1**2-H2**2)*DFX1+DFX0*(H2**2)-DFX2*H1**2)/DEN
GIXX=((H1**2-H2**2)*DGX1+DGX0*(H2**2)-DGX2*(H1**2))/DEN
WRITE(6,984) FIXX,GIXX
984 FORMAT(1X,'FIXX=',F15.10,2X,'GIXX=',F15.10/)
GXX=((GX2-GX1)/(XX2-XX1))*(X-XX1)+GX1
WRITE(6,888) GXX
888 FORMAT(1X,'GXX=',F15.7/)
DGXX=((DGX2-DGX1)/(XX2-XX1))*(X-XX1)+DGX1
WRITE(6,889) DGXX
889 FORMAT(1X,'DGXX=',F15.7/)
FFXX=FIXX+AK*GIXX

```


DFFX=-DFXX+AK*DGXX

WRITE(6,988) FFXX,DFFX

988 FORMAT(1X,'FFXX=',F15.10,2X,'DFFX=',F15.10/)

RETURN

END

C*****SUBROUTINE REY

REAL N,Z

COMMON XX,FX,DFX,GX,FXX,GXX,X,Z,N, YY1,YY2,FX1,FX2,XX1,XX2,GX1,
1GX2,YY,Y,DGX,AK,DGX1,DGX2,DGXX,FIXX,DFX1,DFX2,DFXX,KJ,XX0,DFX0,D

GX

20,FFXX,DFFX,GIXX,TARJ(84,5),L,JJ,B,VO

CE=1

VO=0.

VR=0.

WRITE(6,*) 'NO. DE ELECTRONES EN, N; Y NO. ATOMICO DE ATOMO, Z'

write(6,*)

READ(5,*) N,Z

1490 FORMAT(F4.0,F4.0)

C

IGRAD = Z-N

WRITE(6,1491) IGRAD,Z

1491 FORMAT(1H1,'GRADO DE IONIZACION = ',I2,6X,'NUMERO ATOMICO
DEL ELEMENTO = ',F4.0/)

C

```

UNTER=1./3

B=(Z**UNTER)/0.885341

AA=(Z-N)/Z

WRITE(6,30) AA

30 FORMAT(1X,'AA=',F15.10/)

C

RN=N

AK=-0.083*(1.-RN/Z)**3

DO 26 J=1,84

26 READ(10,1480) (TARJ(J,K), K=1,5)

1480 FORMAT(F10.5,F15.10,F15.10,F15.5,F15.5)

WRITE(6,1492) AK

1492 FORMAT(1X,'AK=',F15.10/)

IF(ABS(AK) - 1.E-9) 28,28,29

28 JJ=84

VO = 0.

GOTO 80

29 ICHEC = 0

C

JK=25

1493 DO 25 J=JK,84

XX=TARJ(J,1)

FX=TARJ(J,2)

DFX=TARJ(J,3)

```

```

GX=TARJ(J,4)
DGX=TARJ(J,5)
KJ=J
73 CALL PEON
WRITE(6,70) YY,Y
70 FORMAT(1X,'YY=',F15.10,2X,'Y=',F15.10)
IF(L-1) 25,35,35
25 CONTINUE
35 JJ=J
RO=X/B
WRITE(6,71) RO
71 FORMAT(1X,'RO= ', F15.10/)
40 CALL ALFIL
XXJ=FXX+AK*GXX
AB=X*DFFX
WRITE(6,770) XXJ,AB
770 FORMAT(1X,'XXJ=',F15.10,2X,'AB=',F15.10/)
CHECK=ABS(AB+AA)
IF(CHECK-0.000001) 768,768,769
769 DELX=-((AA+X*DFFX)/(X*(FIXX+AK*GIXX)+DFFX*(1-X*DGXX/GXX)))
WRITE(6,1101) DELX
1101 FORMAT(1X,'DELX=',F15.10/)
DELAJ=-((DFFX/GXX)*DELX)
WRITE(6,1100) DELAJ

```

```

1100 FORMAT(1X,'DELAK=',F15.10/)
IF(ABS(DELAK)-ABS(AK/4)) 894,895,895
894 AK1=AK+DELAK
GO TO 1501
895 IF(DELAK) 1,1,2
1 AK1=AK+AK/4
GO TO 1501
2 AK1=AK-AK/4
1501 WRITE(6,1102) AK1
1102 FORMAT(1X,'AK1=',F15.10/)
AK=AK1
XO1=X+DELX
WRITE(6,1103) XO1
1103 FORMAT(1X,'XO1=',F15.10/)
X=XO1
RO=X/B
WRITE(6,71) RO
IF(TARJ(JJ,1)-100) 1500,80,80
1500 IF(XO1-TARJ(JJ,1)) 880,881,881
881 JK=JJ
GO TO 1493
880 IF(XO1-TARJ(JJ-1,1)) 890,891,891
891 ICHEC = ICHEC+1
IF(ICHEC - 2) 893,893,768

```

```
890 IF(XO1-TARJ(JJ-4,1)) 892,893,893
892 WRITE(6,1999)TARJ(JJ-4,1)
1999 FORMAT(1X,'TARJ(JJ-4,1)=',F10.5/)
GO TO 80
893 JK=JJ-8
GO TO 1493
768 CALL ALFIL
XXJ=FXX+AK*GXX
VO=(Z-N)*CE/RO
VR=VO+(Z*CE/RO)*XXJ
WRITE(6,900) XXJ,VO,VR
900 FORMAT(1X,'XXJ=',F15.10,2X,'VO=',F15.10,2X,'VR=',F15.10/)
AB=X*DFFX
WRITE(6,901) AB
901 FORMAT(1X,'AB=',F15.10/)
80 RETURN
END
```

ANEXO 5

CÁLCULO DE LA TABLA DEL POTENCIAL CENTRAL DEL ÁTOMO DE BARIO

GRADO DE IONIZACION= 0 NUMERO ATOMICO= 56 NUMERO MASICO = 137.

RADIO NUCLEAR= $(0.12E-04 * A^{**1/3}) / 0.5291720 =$ 0001169027

AA= $(Z-N+1) / Z =$ 0178571400 $(3 * \text{PI} / 8 * 2^{**1/2})^{**2/3} =$ 0.885341

B= $(Z^{** 1/3}) / 0.885341 =$ 4.3213430000

AK= $- 0.083(1 - \text{RN}/Z)^{**3} =$ -.0000004726

J	XX	YY=FX+AK*GX	FX	-DFX	GX	DGX	DYY=-DFX+AK*DGX
35	4.00	.1083921000	.108400	.03694400	16.69300	9.72	-.03694859
36	4.50	.0919375600	.091948	.02927100	22.09400	11.93	-.02927664
37	5.00	.0787944500	.078808	.02356000	28.67900	14.47	-.02356684
38	5.50	.0681426900	.068160	.01922100	36.61800	17.34	-.01922920
39	6.00	.0594012200	.059423	.01586800	46.08400	20.59	-.01587773
40	6.50	.0521459300	.052173	.01323600	57.27300	24.23	-.01324745
41	7.00	.0460647300	.046098	.01114300	70.38500	28.29	-.01115637
42	7.50	.0409215200	.040962	.00945830	85.64100	32.81	-.00947381
43	8.00	.0365381900	.036587	.00808860	103.27000	37.80	-.00810646
44	8.50	.0327746200	.032833	.00696420	123.52000	43.29	-.00698466
45	9.00	.0295216900	.029591	.00603310	146.66000	49.32	-.00605641
46	9.50	.0266922700	.026774	.00525590	172.94000	55.92	-.00528233
47	10.00	.0242182100	.024314	.00460290	202.67000	63.10	-.00463272
48	10.50	.0220433900	.022155	.00405020	236.15000	70.92	-.00408372
49	11.00	.0201206500	.020250	.00357980	273.69000	79.39	-.00361732
50	11.50	.0184148200	.018564	.00317710	315.65000	88.54	-.00321895
51	12.00	.0168927400	.017064	.00283050	362.35000	98.42	-.00287702
52	12.50	.0155292400	.015725	.00253090	414.20000	109.05	-.00258244

53	13.00	.0143031400	.014526	.00227050	471.53000	120.47	-.00232744
54	13.50	.0131962400	.013449	.00204340	534.80000	132.71	-.00210612
55	14.00	.0121923500	.012478	.00184450	604.40000	145.80	-.00191341
56	14.50	.0112792700	.011601	.00166960	680.74000	159.79	-.00174512
57	15.00	.0104437600	.010805	.00151530	764.33000	174.69	-.00159786
58	15.50	.0096786290	.010083	.00137870	855.59000	190.57	-.00146877
59	16.00	.0089727270	.009424	.00125740	955.04000	207.44	-.00135544
60	16.50	.0083204090	.008823	.00114940	1063.20000	225.43	-.00125594
61	17.00	.0077148220	.008273	.00105290	1180.60000	244.34	-.00116838
62	17.50	.0071502520	.007768	.00096645	1307.70000	264.43	-.00109143
63	18.00	.0066217670	.007305	.00088883	1445.20000	285.67	-.00102384
64	18.50	.0061250300	.006878	.00081896	1593.60000	308.11	-.00096458
65	19.00	.0056559570	.006485	.00075592	1753.50000	331.78	-.00091273
66	19.50	.0052112190	.006121	.00069891	1925.60000	356.72	-.00086750
67	20.00	.0047874780	.005785	.00064725	2110.40000	382.97	-.00082825
68	21.00	.0039923250	.005184	.00055766	2521.20000	439.57	-.00076541
69	22.00	.0032507510	.004665	.00048323	2991.50000	501.92	-.00072045
70	23.00	.0025464150	.004213	.00042094	3527.10000	570.40	-.00069052
71	24.00	.0018653910	.003819	.00036849	4134.40000	645.20	-.00067343
72	25.00	.0011958090	.003474	.00032404	4819.90000	727.00	-.00066764
73	26.00	.0005268117	.003169	.00028617	5590.70000	815.80	-.00067174
74	28.00	-.0008456632	.002660	.00022580	7417.90000	1016.60	-.00070627

$$X = 26.0000000000$$

$$RO = X/B = 6.0166470000$$

$$H2 = 2.0000000000$$

$$H1 = -1.0000000000$$

$$DEN = -6.0000000000$$

$$F''(X1) = .0000352798$$

$$F'''(X1) = -.0000053398$$

$G''(X1)=92.5995500000$ $G'''(X1)= 7.8004760000$
 $D2YY1=D2FX1+AK*D2GX1= -.0000084848$ $D3YY1=D3FX1+AK*D3GX1= -.0000090265$
 $DEL0=-YY1/DYY1= .7842551000$
 $F(X1+DEL0)= -.0000033350$ $F'(X1+DEL0)= -.0006811652$
 $DEL1=-FX1D/DFX1D= -.0048959770$ $DEL=DEL0+DEL1= .7793592000$
 $X = X + DEL = 26.7793600000$
 $F(X1+DEL)= .0029563640$ $F'(X1+DEL)= .0002626450$
 $G(X1+DEL)= 6255.2390000000$ $G'(X1+DEL)= 894.0477000000$
 $FXXJ = F(X1+DEL) + AK*G(X1+DEL) = -.0000000001$ PRIMERA CONDICION
 $DFFX=-F'(X1+DEL)+AK*G'(X1+DEL)= -.0006851917$ $AA = Z-N+1/Z = .0178571400$
 $AB=X*DFFX= -.0183490000$ $AB+AA= .0004918518$ SEGUNDA CONDICION
 $DELTA X = .3232072000$ $DELTA AK = .0000000354$
 $AK= -.0000004372$
 $X= X + DELTA X = 27.1025700000$ $RO = X/B = 6.2717920000$
 $DEL= DEL+DELTA X= 1.1025660000$

J	XX	YY=FX+AK*GX	FX	-DFX	GX	DGX	DYY=-DFX+AK*DGX
66	19.50	.0052793920	.006121	.00069891	1925.60000	356.72	-.00085487
67	20.00	.0048621940	.005785	.00064725	2110.40000	382.97	-.00081469
68	21.00	.0040815850	.005184	.00055766	2521.20000	439.57	-.00074985
69	22.00	.0033566610	.004665	.00048323	2991.50000	501.92	-.00070268
70	23.00	.0026712870	.004213	.00042094	3527.10000	570.40	-.00067033
71	24.00	.0020117650	.003819	.00036849	4134.40000	645.20	-.00065058
72	25.00	.0013664510	.003474	.00032404	4819.90000	727.00	-.00064190
73	26.00	.0007247435	.003169	.00028617	5590.70000	815.80	-.00064285
74	28.00	-.0005830418	.002660	.00022580	7417.90000	1016.60	-.00067028

$X = 26.0000000000$ $RO = X/B = 6.0166470000$

$H2= 2.0000000000$ $H1=-1.0000000000$ $DEN=-6.0000000000$
 $F''(X1)= .0000352798$ $F'''(X1)= -.0000053398$
 $G''(X1)=92.5995500000$ $G'''(X1)= 7.8004760000$
 $D2YY1=D2FX1+AK*D2GX1= -.0000052064$ $D3YY1=D3FX1+AK*D3GX1= -.0000087503$
 $DEL0=-YY1/DYY1= 1.1273870000$
 $F(X1+DEL0)= -.0000053984$ $F'(X1+DEL0)= -.0006542831$
 $DEL1=-FX1D/DFX1D= -.0082508450$ $DEL=DEL0+DEL1= 1.1191360000$
 $X = X + DEL = 27.1191300000$
 $F(X1+DEL)= .0028696830$ $F'(X1+DEL)= .0002523889$
 $G(X1+DEL)= 6563.5020000000$ $G'(X1+DEL)= 928.1612000000$
 $FXXJ = F(X1+DEL) + AK*G(X1+DEL) = -.0000000006$ PRIMERA CONDICION
 $DFFX=-F'(X1+DEL)+AK*G'(X1+DEL)= -.0006581980$ $AA = Z-N+1/Z = .0178571400$
 $AB=X*DFFX= -.0178497600$ $AB+AA= .0000073841$ SEGUNDA CONDICION
 $DELTA X = -.0050603510$ $DELTA AK = -.0000000005$
 $AK= -.0000004377$
 $X= X + DELTA X = 27.1140700000$ $RO = X/B = 6.2744550000$
 $DEL= DEL+DELTA X= 1.1140750000$

J	XX	YY=FX+AK*GX	FX	-DFX	GX	DGX	DYY=-DFX+AK*DGX
66	19.50	.0052784160	.006121	.00069891	1925.60000	356.72	-.00085506
67	20.00	.0048611230	.005785	.00064725	2110.40000	382.97	-.00081489
68	21.00	.0040803050	.005184	.00055766	2521.20000	439.57	-.00075007
69	22.00	.0033551430	.004665	.00048323	2991.50000	501.92	-.00070293
70	23.00	.0026694980	.004213	.00042094	3527.10000	570.40	-.00067062
71	24.00	.0020096670	.003819	.00036849	4134.40000	645.20	-.00065091
72	25.00	.0013640050	.003474	.00032404	4819.90000	727.00	-.00064227

73 26.00 .0007219064 .003169 .00028617 5590.70000 815.80 -.00064327
 74 28.00 -.0005868061 .002660 .00022580 7417.90000 1016.60 -.00067079

$$X = 26.0000000000 \quad RO = X/B = 6.0166470000$$

$$H2 = 2.0000000000 \quad H1 = -1.0000000000 \quad DEN = -6.0000000000$$

$$F''(X1) = .0000352798 \quad F'''(X1) = -.0000053398$$

$$G''(X1) = 92.5995500000 \quad G'''(X1) = 7.8004760000$$

$$D2YY1 = D2FX1 + AK * D2GX1 = -.0000052534 \quad D3YY1 = D3FX1 + AK * D3GX1 = -.0000087543$$

$$DEL0 = -YY1/DYY1 = 1.1222510000$$

$$F(X1 + DEL0) = -.0000053704 \quad F'(X1 + DEL0) = -.0006546750$$

$$DEL1 = -FX1D/DFX1D = -.0082031610 \quad DEL = DEL0 + DEL1 = 1.1140470000$$

$$X = X + DEL = 27.1140500000$$

$$F(X1 + DEL) = .0028709560 \quad F'(X1 + DEL) = .0002525425$$

$$G(X1 + DEL) = 6558.8000000000 \quad G'(X1 + DEL) = 927.6503000000$$

$$FXXJ = F(X1 + DEL) + AK * G(X1 + DEL) = -.0000000005 \quad \text{PRIMERA CONDICION}$$

$$DFFX = -F'(X1 + DEL) + AK * G'(X1 + DEL) = -.0006585990 \quad AA = Z - N + 1/Z = .0178571400$$

$$AB = X * DFFX = -.0178572800 \quad AB + AA = .0000001402 \quad \text{SEGUNDA CONDICION}$$

$$YY1 = .0007219064 \quad DYY1 = -.0006432667$$

$$D2YY1 = D2FX1 + AK * D2GX1 = -.0000052534 \quad D3YY1 = D3FX1 + AK * D3GX1 = -.0000087543$$

$$F(X1 + DEL0) = -.0000053704 \quad F'(X1 + DEL0) = -.0006546750$$

$$DEL0 = -YY1/DYY1 = 1.1222510000 \quad DEL1 = -FX1D/DFX1D = -.0082031610 \quad DEL = 1.1140470000$$

$$X = X + DEL = 27.1140500000$$

$$H2 = 2.0000000000 \quad H1 = -1.0000000000 \quad DEN = -6.0000000000$$

$$F''(X1) = .0000352798 \quad F'''(X1) = -.0000053398$$

$$G''(X1) = 92.5995500000 \quad G'''(X1) = 7.8004760000$$

$$D2YY1=D2FX1+AK*D2GX1= -.0000052534 \quad D3YY1=D3FX1+AK*D3GX1= -.0000087543$$

$$DEL0=-YY1/DYY1= 1.1222510000$$

$$F(X1+DEL0)= -.0000053704 \quad F'(X1+DEL0)= -.0006546750$$

$$DEL1=-FX1D/DFX1D= -.0082031610 \quad DEL=DEL0+DEL1= 1.1140470000$$

$$X = X + DEL = 28.2281000000$$

$$F(X1+DEL)= .0028709560 \quad F'(X1+DEL)= .0002525425$$

$$G(X1+DEL)= 6558.8000000000 \quad G'(X1+DEL)= 927.6503000000$$

$$FXXJ = F(X1+DEL) + AK*G(X1+DEL) = -.0000000005 \quad \text{PRIMERA CONDICION}$$

$$DFFX=-F'(X1+DEL)+AK*G'(X1+DEL)= -.0006585990 \quad AA = Z-N+1/Z = .0178571400$$

$$X = 27.1140500000 \quad RO = X/B = 6.2744490000$$

$$AB=X*DFFX= -.0178572800 \quad AB+AA= .0000001402 \quad \text{SEGUNDA CONDICION}$$

$$FXXJ= -.0000000005 \quad VO=(Z-N+1)/RO= .1593765000 \quad VR=Z/RO*FXXJ + VO= .1593765000$$

POTENCIAL CENTRAL PARA EL ÁTOMO DE BARIO

GRADO DE IONIZACION = 0

CONSTANTE DE AJUSTE AK = -.0000004377

LA DISTANCIA RADIAL ESTA EN UNIDADES ATOMICAS

LA CARGA $Z2 = 2*Z*FXXJ + 2*R*VO$ ESTA EN HARTREES

TABLA DE DATOS PARA EL ÁTOMO DE BARIO

R	Z2	R	Z2	R	Z2	R	Z2
.000000	112.000000	.002314	110.371100	.004628	108.863200	.006942	107.432600
.009256	106.062500	.011570	104.745000	.013885	103.473400	.016199	102.241000
.018513	101.046700	.020827	99.885990	.023141	98.757770	.046282	88.837460
.069423	80.733800	.092564	73.897960	.115705	68.019730	.138846	62.894150
.161987	58.380070	.185128	54.371120	.208269	50.786650	.231410	47.562820
.277691	42.003310	.323973	37.387950	.370255	33.505080	.416537	30.201250
.462819	27.364450	.509101	24.908440	.555383	22.767150	.601665	20.889060

.647947 19.232720 .694229 17.763410 .740510 16.455380 .786792 15.286230
.833074 14.235780 .879356 13.290610 .925638 12.435030 1.041343 10.629020
1.157048 9.193903 1.272752 8.037819 1.388457 7.095692 1.504162 6.320024
1.619867 5.675863 1.735571 5.136764 1.851276 4.682781 1.966981 4.298222
2.082686 3.970865 2.198390 3.690953 2.314095 3.450857 2.429800 3.244289
2.545505 3.065970 2.661209 2.911962 2.776914 2.778554 2.892619 2.662925
3.008324 2.562708 3.124028 2.475863 3.239733 2.400580 3.355438 2.335495
3.471143 2.279126 3.586848 2.230669 3.702552 2.188878 3.818257 2.153122
3.933962 2.122637 4.049666 2.096783 4.165371 2.075011 4.281076 2.056838
4.396781 2.041808 4.512486 2.029551 4.628191 2.019696 4.859600 2.006007
5.091010 1.998551 5.322419 1.995521 5.553828 1.995383 5.785238 1.996831
6.016647 1.998678 6.479466 1.999628

CÁLCULO DE LA TABLA DEL POTENCIAL CENTRAL DEL ÁTOMO DE FIERRO

GRADO DE IONIZACION= 0 NUMERO ATOMICO= 26. NUMERO MASICO = 56.

RADIO NUCLEAR = $(0.12E-04 * A^{1/3}) / 0.5291720 = .0000867588$

AA= $(Z-N+1) / Z = .0384615400$ $(3 * \pi / 8 * 2^{1/2})^{2/3} = 0.885341$

B= $(Z^{1/3}) / 0.885341 = 3.3461640000$

AK= $-0.083(1 - RN/Z)^3 = -.0000047223$

J	XX	YY=FX+AK*GX	FX	-DFX	GX	DGX	DYY=-DFX+AK*DGX
1	.00	1.0000000000	1.000000	1.58807100	.000000	1.00	-1.58807600
2	.01	.9854500000	.985450	1.38956000	.010000	1.00	-1.38956500
3	.02	.9719799000	.971980	1.30930000	.02002	1.00	-1.30930500
4	.03	.9591999000	.959200	1.24897000	.03006	1.01	-1.24897500
5	.04	.9469598000	.946960	1.19910000	.04013	1.01	-1.19910500
6	.05	.9351898000	.935190	1.15600000	.05022	1.01	-1.15600500

7	.06	.9238297000	.923830	1.11774000	.06035	1.01	-1.11774500
8	.07	.9128196000	.912820	1.08319000	.07051	1.02	-1.08319500
9	.08	.9021496000	.902150	1.05161000	.08071	1.02	-1.05161500
10	.09	.8917796000	.891780	1.02246000	.09095	1.03	-1.02246500
11	.10	.8816995000	.881700	.99535000	.10123	1.03	-.99535490
12	.20	.7930591000	.793060	.79423000	.20686	1.08	-.79423510
13	.30	.7206385000	.720640	.66180000	.31862	1.15	-.66180550
14	.40	.6595379000	.659540	.56464000	.43778	1.23	-.56464580
15	.50	.6069873000	.606990	.48941000	.56536	1.32	-.48941620
16	.60	.5611567000	.561160	.42917000	.70228	1.42	-.42917670
17	.70	.5207860000	.520790	.37979000	.84938	1.52	-.37979720
18	.80	.4849252000	.484930	.33861000	1.00747	1.64	-.33861770
19	.90	.4528544000	.452860	.30378000	1.17731	1.76	-.30378830
20	1.00	.4240036000	.424010	.27399000	1.35969	1.89	-.27399890
21	1.20	.3742317000	.374240	.22591000	1.76504	2.17	-.22592020
22	1.40	.3328895000	.332900	.18904000	2.22960	2.48	-.18905170
23	1.60	.2980870000	.298100	.16011000	2.75930	2.82	-.16012330
24	1.80	.2684541000	.268470	.13700000	3.36050	3.20	-.13701510
25	2.00	.2429909000	.243010	.11824000	4.03960	3.60	-.11825700
26	2.20	.2209273000	.220950	.10283000	4.80320	4.04	-.10284910
27	2.40	.2016733000	.201700	.09002600	5.65820	4.51	-.09004732
28	2.60	.1847688000	.184800	.07928600	6.61160	5.03	-.07930973
29	2.80	.1698438000	.169880	.07020000	7.67080	5.57	-.07022632
30	3.00	.1565882000	.156630	.06245700	8.84340	6.16	-.06248609
31	3.20	.1447721000	.144820	.05581300	10.13700	6.79	-.05584504
32	3.40	.1341954000	.134250	.05007700	11.56100	7.45	-.05011220
33	3.60	.1246780000	.124740	.04509800	13.12200	8.16	-.04513656
34	3.80	.1161000000	.116170	.04075300	14.82900	8.92	-.04079512
35	4.00	.1083212000	.108400	.03694400	16.69300	9.72	-.03698990
36	4.50	.0918436600	.091948	.02927100	22.09400	11.93	-.02932735
37	5.00	.0786725700	.078808	.02356000	28.67900	14.47	-.02362831

38	5.50	.0679870800	.068160	.01922100	36.61800	17.34	-.01930290
39	6.00	.0592053800	.059423	.01586800	46.08400	20.59	-.01596523
40	6.50	.0519025400	.052173	.01323600	57.27300	24.23	-.01335042
41	7.00	.0457656200	.046098	.01114300	70.38500	28.29	-.01127661
42	7.50	.0405575700	.040962	.00945830	85.64100	32.81	-.00961323
43	8.00	.0360993200	.036587	.00808860	103.27000	37.80	-.00826709
44	8.50	.0322496900	.032833	.00696420	123.52000	43.29	-.00716864
45	9.00	.0288984200	.029591	.00603310	146.66000	49.32	-.00626602
46	9.50	.0259573200	.026774	.00525590	172.94000	55.92	-.00551995
47	10.00	.0233569200	.024314	.00460290	202.67000	63.10	-.00490090
48	10.50	.0210398200	.022155	.00405020	236.15000	70.92	-.00438510
49	11.00	.0189575400	.020250	.00357980	273.69000	79.39	-.00395471
50	11.50	.0170733900	.018564	.00317710	315.65000	88.54	-.00359522
51	12.00	.0153528600	.017064	.00283050	362.35000	98.42	-.00329527
52	12.50	.0137690000	.015725	.00253090	414.20000	109.05	-.00304587
53	13.00	.0122992700	.014526	.00227050	471.53000	120.47	-.00283940
54	13.50	.0109234900	.013449	.00204340	534.80000	132.71	-.00267010
55	14.00	.0096238130	.012478	.00184450	604.40000	145.80	-.00253302
56	14.50	.0083863080	.011601	.00166960	680.74000	159.79	-.00242418
57	15.00	.0071955670	.010805	.00151530	764.33000	174.69	-.00234025
58	15.50	.0060426060	.010083	.00137870	855.59000	190.57	-.00227864
59	16.00	.0049140680	.009424	.00125740	955.04000	207.44	-.00223700
60	16.50	.0038021000	.008823	.00114940	1063.20000	225.43	-.00221396
61	17.00	.0026975950	.008273	.00105290	1180.60000	244.34	-.00220676
62	17.50	.0015928850	.007768	.00096645	1307.70000	264.43	-.00221518
63	18.00	.0004800625	.007305	.00088883	1445.20000	285.67	-.00223786
64	18.50	-.0006473343	.006878	.00081896	1593.60000	308.11	-.00227396

X=18.0000000000

RO=X/B= 5.3792940000

H2= .50

H1= -.50

DEN= -.03125

$F''(X1) = .00014760$ $F'''(X1) = -.00003048$
 $G''(X1) = 43.600100$ $G'''(X1) = 5.520264$
 $D2YY1 = -.0000582970$ $D3YY1 = -.0000565466$
 $DEL0 = .214518$ $DEL1 = -.000637$ $DEL = .213881$ $X = 18.213880$
 $FXX = .0071180230$ $DFXX = .0008589422$ $GXX = 1507.306000$ $DGXX = 295.269000$

$FXXJ = FXX + AK * GXX = .0000000000$ PRIMERA CONDICION

$DFFX = -DFXX + AK * DGXX = -.0022533050$ $AA = .0384615400$

$AB = X * DFFX = -.0410414300$ $AB + AA = .0025798910$ SEGUNDA CONDICION

$DELX = .5727642000$ $DELAK = .0000008562$
 $AK = -.0000038661$

$X = 18.7866400000$ $RO = X/B = 5.6143820000$

J XX YY=FX+AK*GX FX -DFX GX DGX DYY=-DFX+AK*DGX

64 18.50 .0007171670 .006878 .00081896 1593.60000 308.11 -.00201015

65 19.00 -.0002945242 .006485 .00075592 1753.50000 331.78 -.00203862

$X = 18.5000000000$ $RO = X/B = 5.5287190000$

$H2 = .50$ $H1 = -.50$ $DEN = -.03125$

$F''(X1) = .00013240$ $F'''(X1) = -.00002737$

$G''(X1) = 46.000000$ $G'''(X1) = 4.561523$

$D2YY1 = -.0000454405$ $D3YY1 = -.0000450023$

$DEL0 = .356773$ $DEL1 = -.001593$ $DEL = .355180$ $X = 18.855180$

FXX= .0065954690 DFXX= .0007741789 GXX= 1705.970000 DGXX=
324.924200

FXXJ = FXX + AK*GXX = .0000000000 PRIMERA CONDICION

DFFX=-DFXX+AK*DGXX= -.0020303720 AA= .0384615400

AB=X*DFFX= -.0382830200 AB+AA= .0001785147 SEGUNDA CONDICION

DELX= -.0435087800 DELAK= -.0000000518

AK= -.0000039179

X=18.8116700000 RO=X/B= 5.6218620000

J	XX	YY=FX+AK*GX	FX	-DFX	GX	DGX	DYY=-DFX+AK*DGX
57	15.00	.0078104370	.010805	.00151530	764.33000	174.69	-.00219972
58	15.50	.0067308910	.010083	.00137870	855.59000	190.57	-.00212533
59	16.00	.0056823560	.009424	.00125740	955.04000	207.44	-.00207013
60	16.50	.0046573980	.008823	.00114940	1063.20000	225.43	-.00203261
61	17.00	.0036473360	.008273	.00105290	1180.60000	244.34	-.00201020
62	17.50	.0026448730	.007768	.00096645	1307.70000	264.43	-.00200246
63	18.00	.0016426630	.007305	.00088883	1445.20000	285.67	-.00200805
64	18.50	.0006346471	.006878	.00081896	1593.60000	308.11	-.00202610
65	19.00	-.0003853240	.006485	.00075592	1753.50000	331.78	-.00205580

X=18.5000000000 RO=X/B= 5.5287190000

H2= .50 H1= -.50 DEN= -.03125

F"(X1)= .00013240 F'''(X1)= -.00002737

G"(X1)= 46.000000 G'''(X1)= 4.561523

D2YY1=-.0000478225 D3YY1=-.0000452385

DEL0= .313236 DEL1= -.001262 DEL= .311974 X= 18.811970

FXX= .0066290100 DFXX= .0007796264 GXX= 1691.984000 DGXX= 322.878800

FXXJ = FXX + AK*GXX = -.0000000002 PRIMERA CONDICION

DFFX=-DFXX+AK*DGXX= -.0020446310 AA= .0384615400

AB=X*DFFX= -.0384635400 AB+AA= .0000020032 SEGUNDA CONDICION

DELX= .0004850219 DELAK= .0000000006
AK= -.0000039173

X=18.8124600000 RO=X/B= 5.6220970000

J	XX	YY=FX+AK*GX	FX	-DFX	GX	DGX	DYY=-DFX+AK*DGX
57	15.00	.0078108850	.010805	.00151530	764.33000	174.69	-.00219961
58	15.50	.0067313920	.010083	.00137870	855.59000	190.57	-.00212522
59	16.00	.0056829160	.009424	.00125740	955.04000	207.44	-.00207001
60	16.50	.0046580210	.008823	.00114940	1063.20000	225.43	-.00203248
61	17.00	.0036480280	.008273	.00105290	1180.60000	244.34	-.00201005
62	17.50	.0026456390	.007768	.00096645	1307.70000	264.43	-.00200230
63	18.00	.0016435100	.007305	.00088883	1445.20000	285.67	-.00200789
64	18.50	.0006355812	.006878	.00081896	1593.60000	308.11	-.00202592
65	19.00	-.0003842962	.006485	.00075592	1753.50000	331.78	-.00205560

X=18.5000000000 RO=X/B= 5.5287190000

H2= .50 H1= -.50 DEN= -.03125

F"(X1)= .00013240 F'''(X1)= -.00002737

G"(X1)= 46.000000 G'''(X1)= 4.561523

D2YY1=-.0000477955 D3YY1=-.0000452358

DEL0= .313725 DEL1= -.001265 DEL= .312459 X= 18.812460

FXX= .0066286320 DFXX= .0007795651 GXX= 1692.141000 DGXX=
322.901800

FXXJ = FXX + AK*GXX = -.0000000001 PRIMERA CONDICION

DFFX=-DFXX+AK*DGXX= -.0020444700 AA= .0384615400

AB=X*DFFX= -.0384615100 AB+AA= .0000000246 SEGUNDA CONDICION

H2= .50 H1= -.50 DEN= -.03125

F"(X1)= .00013240 F'''(X1)= -.00002737

G"(X1)= 46.000000 G'''(X1)= 4.561523

D2YY1=-.0000477955 D3YY1=-.0000452358

DEL0= .313725 DEL1= -.001265 DEL= .312459 X= 19.124920

FXX=.0066286320 DFXX= .0007795651 GXX=1692.141000 DGXX= 322.901800

$FXXJ = FXX + AK * GXX = -.0000000001$ PRIMERA CONDICION
 $DFFX = -DFXX + AK * DGXX = -.0020444700$ AA= .0384615400
 $X = 18.8124600000$ RO=X/B= 5.6220970000
 AB=X*DFFX= -.0384615100 AB+AA= .0000000246 SEGUNDA CONDICION
 $FXXJ = -.0000000001$ VO= .1778696000 VR= .1778696000

POTENCIAL CENTRAL PARA EL ÁTOMO DE FIERRO

GRADO DE IONIZACION= 0
 CONSTANTE DE AJUSTE AK = -.0000039173
 LA DISTANCIA RADIAL ESTA EN UNIDADES ATOMICAS
 LA CARGA $Z2 = 2 * Z * XXJ + 2 * R * VO$ ESTA EN HARTREES

TABLA DE DATOS PARA EL ÁTOMO DE FIERRO

R	Z2	R	Z2	R	Z2	R	Z2
.000000	52.000000	.002988	51.244460	.005977	50.545080	.008965	49.881580
.011954	49.246160	.014942	48.635190	.017931	48.045520	.020919	47.474060
.023908	46.920290	.026896	46.382110	.029885	45.859010	.059770	41.260340
.089655	37.505110	.119540	34.338520	.149425	31.616520	.179310	29.243970
.209195	27.155320	.239080	25.301210	.268965	23.644160	.298850	22.154560
.358620	19.587700	.418390	17.459180	.478159	15.670740	.537929	14.151120
.597699	12.848320	.657469	11.722310	.717239	10.742400	.777009	9.884665
.836779	9.129872	.896549	8.461896	.956319	7.868775	1.016089	7.340108
1.075859	6.866532	1.135629	6.441807	1.195399	6.058650	1.344823	5.255202
1.494248	4.623737	1.643673	4.121580	1.793098	3.718484	1.942523	3.392361
2.091948	3.126946	2.241373	2.909923	2.390797	2.731988	2.540222	2.585811
2.689647	2.465670	2.839072	2.366989	2.988497	2.286169	3.137922	2.220238
3.287346	2.166687	3.436771	2.123624	3.586196	2.089267	3.735621	2.062234
3.885046	2.041364	4.034471	2.025628	4.183896	2.014115	4.333320	2.006117
4.482745	2.000854	4.632170	1.997876	4.781595	1.996512	4.931019	1.996374
5.080444	1.997010	5.229869	1.998042	5.379294	1.999088	5.528719	1.999832
5.678144	1.999954						

CÁLCULO DE LA TABLA DEL POTENCIAL CENTRAL DEL ATOMO DE URANIO

GRADO DE IONIZACION = 0 NUMERO ATOMICO= 92. NUMERO MASICO = 238.

RADIO NUCLEAR = $(0.12E-04 * A^{1/3}) / 0.5291720 = .0001405325$

AA = $(Z - N + 1) / Z = .0108695700$ $(3 * \pi / 8 * 2^{1/2})^{2/3} = 0.885341$

B = $(Z^{1/3}) / 0.885341 = 5.0990040000$

AK = $-0.083(1 - RN/Z)^3 = -.0000001066$

J	XX	YY=FX+AK*GX	FX	-DFX	GX	DGX	DYY=-DFX+AK*DGX
1	.00	1.0000000000	1.000000	1.58807100	.00000	1.00	-1.58807100
2	.01	.9854500000	.985450	1.38956000	.01000	1.00	-1.38956000
3	.02	.9719800000	.971980	1.30930000	.02002	1.00	-1.30930000
4	.03	.9592000000	.959200	1.24897000	.03006	1.01	-1.24897000
5	.04	.9469600000	.946960	1.19910000	.04013	1.01	-1.19910000
6	.05	.9351900000	.935190	1.15600000	.05022	1.01	-1.15600000
7	.06	.9238300000	.923830	1.11774000	.06035	1.01	-1.11774000
8	.07	.9128200000	.912820	1.08319000	.07051	1.02	-1.08319000
9	.08	.9021500000	.902150	1.05161000	.08071	1.02	-1.05161000
10	.09	.8917800000	.891780	1.02246000	.09095	1.03	-1.02246000
11	.10	.8817000000	.881700	.99535000	.10123	1.03	-.99535010
12	.20	.7930600000	.793060	.79423000	.20686	1.08	-.79423010
13	.30	.7206399000	.720640	.66180000	.31862	1.15	-.66180010
14	.40	.6595399000	.659540	.56464000	.43778	1.23	-.56464010
15	.50	.6069899000	.606990	.48941000	.56536	1.32	-.48941020
16	.60	.5611600000	.561160	.42917000	.70228	1.42	-.42917020
17	.70	.5207899000	.520790	.37979000	.84938	1.52	-.37979020
18	.80	.4849299000	.484930	.33861000	1.00747	1.64	-.33861020
19	.90	.4528599000	.452860	.30378000	1.17731	1.76	-.30378020
20	1.00	.4240099000	.424010	.27399000	1.35969	1.89	-.27399020
21	1.20	.3742398000	.374240	.22591000	1.76504	2.17	-.22591020
22	1.40	.3328997000	.332900	.18904000	2.22960	2.48	-.18904030
23	1.60	.2980997000	.298100	.16011000	2.75930	2.82	-.16011030
24	1.80	.2684696000	.268470	.13700000	3.36050	3.20	-.13700030

25	2.00	.2430096000	.243010	.11824000	4.03960	3.60	-.11824040
26	2.20	.2209495000	.220950	.10283000	4.80320	4.04	-.10283040
27	2.40	.2016994000	.201700	.09002600	5.65820	4.51	-.09002648
28	2.60	.1847993000	.184800	.07928600	6.61160	5.03	-.07928654
29	2.80	.1698792000	.169880	.07020000	7.67080	5.57	-.07020060
30	3.00	.1566291000	.156630	.06245700	8.84340	6.16	-.06245765
31	3.20	.1448189000	.144820	.05581300	10.13700	6.79	-.05581372
32	3.40	.1342488000	.134250	.05007700	11.56100	7.45	-.05007779
33	3.60	.1247386000	.124740	.04509800	13.12200	8.16	-.04509887
34	3.80	.1161684000	.116170	.04075300	14.82900	8.92	-.04075395
35	4.00	.1083982000	.108400	.03694400	16.69300	9.72	-.03694503
36	4.50	.0919456500	.091948	.02927100	22.09400	11.93	-.02927227
37	5.00	.0788049500	.078808	.02356000	28.67900	14.47	-.02356154
38	5.50	.0681560900	.068160	.01922100	36.61800	17.34	-.01922285
39	6.00	.0594180900	.059423	.01586800	46.08400	20.59	-.01587019
40	6.50	.0521668900	.052173	.01323600	57.27300	24.23	-.01323858
41	7.00	.0460905000	.046098	.01114300	70.38500	28.29	-.01114602
42	7.50	.0409528700	.040962	.00945830	85.64100	32.81	-.00946180
43	8.00	.0365759900	.036587	.00808860	103.27000	37.80	-.00809263
44	8.50	.0328198300	.032833	.00696420	123.52000	43.29	-.00696881
45	9.00	.0295753700	.029591	.00603310	146.66000	49.32	-.00603836
46	9.50	.0267555700	.026774	.00525590	172.94000	55.92	-.00526186
47	10.00	.0242924000	.024314	.00460290	202.67000	63.10	-.00460963
48	10.50	.0221298300	.022155	.00405020	236.15000	70.92	-.00405776
49	11.00	.0202208300	.020250	.00357980	273.69000	79.39	-.00358826
50	11.50	.0185303600	.018564	.00317710	315.65000	88.54	-.00318654
51	12.00	.0170253800	.017064	.00283050	362.35000	98.42	-.00284099
52	12.50	.0156808500	.015725	.00253090	414.20000	109.05	-.00254252
53	13.00	.0144757400	.014526	.00227050	471.53000	120.47	-.00228334
54	13.50	.0133920000	.013449	.00204340	534.80000	132.71	-.00205755
55	14.00	.0124135800	.012478	.00184450	604.40000	145.80	-.00186004

56	14.50	.0115284400	.011601	.00166960	680.74000	159.79	-.00168663
57	15.00	.0107235300	.010805	.00151530	764.33000	174.69	-.00153392
58	15.50	.0099918030	.010083	.00137870	855.59000	190.57	-.00139901
59	16.00	.0093223020	.009424	.00125740	955.04000	207.44	-.00127951
60	16.50	.0087095740	.008823	.00114940	1063.20000	225.43	-.00117343
61	17.00	.0081469600	.008273	.00105290	1180.60000	244.34	-.00107894
62	17.50	.0076289130	.007768	.00096645	1307.70000	264.43	-.00099464
63	18.00	.0071507570	.007305	.00088883	1445.20000	285.67	-.00091928
64	18.50	.0067083390	.006878	.00081896	1593.60000	308.11	-.00085180
65	19.00	.0062977950	.006485	.00075592	1753.50000	331.78	-.00079128
66	19.50	.0059160520	.006121	.00069891	1925.60000	356.72	-.00073693
67	20.00	.0055599530	.005785	.00064725	2110.40000	382.97	-.00068807
68	21.00	.0049151660	.005184	.00055766	2521.20000	439.57	-.00060451
69	22.00	.0043457370	.004665	.00048323	2991.50000	501.92	-.00053673
70	23.00	.0038374480	.004213	.00042094	3527.10000	570.40	-.00048174
71	24.00	.0033787160	.003819	.00036849	4134.40000	645.20	-.00043726
72	25.00	.0029600490	.003474	.00032404	4819.90000	727.00	-.00040153
73	26.00	.0025731900	.003169	.00028617	5590.70000	815.80	-.00037313
74	28.00	.0018695290	.002660	.00022580	7417.90000	1016.60	-.00033416
75	30.00	.0012241200	.002256	.00018067	9679.00000	1250.70	-.00031398
76	35.00	-.0003364809	.001551	.00010891	17707.00000	2003.00	-.00032241

X=30.0000000000

RO=X/B= 5.8835020000

H2= 5.00

H1= -2.00

DEN=-350.00000

F"(X1)= .00001991

F'''(X1)= -.00000242

G"(X1)=126.381400

G'''(X1)= 9.347193

D2YY1= .0000064437

D3YY1=-.0000034195

DEL0= 3.898700

DEL1= .048273

DEL= 3.946973

X= 33.946970

FXX= .0016729880

DFXX= .0001240230

GXX= 15695.690000

DGXX= 1844.562000

$FXXJ = FXX + AK * GXX = -.0000000081$ PRIMERA CONDICION
 $DFFX = -DFXX + AK * DGXX = -.0003206340$ AA= .0108695700
 $AB = X * DFFX = -.0108845500$ AB+AA= .0000149876 SEGUNDA CONDICION
 $DELX = .0208422500$ DELAK= .0000000004
 AK= -.0000001062

$X = 33.9678200000$ RO=X/B= 6.6616560000

J	XX	YY=FX+AK*GX	FX	-DFX	GX	DGX	DYY=-DFX+AK*DGX
68	21.00	.0049162400	.005184	.00055766	2521.20000	439.57	-.00060433
69	22.00	.0043470110	.004665	.00048323	2991.50000	501.92	-.00053652
70	23.00	.0038389500	.004213	.00042094	3527.10000	570.40	-.00048150
71	24.00	.0033804760	.003819	.00036849	4134.40000	645.20	-.00043699
72	25.00	.0029621010	.003474	.00032404	4819.90000	727.00	-.00040122
73	26.00	.0025755700	.003169	.00028617	5590.70000	815.80	-.00037278
74	28.00	.0018726880	.002660	.00022580	7417.90000	1016.60	-.00033373
75	30.00	.0012282410	.002256	.00018067	9679.00000	1250.70	-.00031345
76	35.00	-.0003289418	.001551	.00010891	17707.00000	2003.00	-.00032156

$X = 30.0000000000$ RO=X/B= 5.8835020000

$H2 = 5.00$ H1= -2.00 DEN=-350.00000
 $F''(X1) = .00001991$ F'''(X1)= -.00000242
 $G''(X1) = 126.381400$ G'''(X1)= 9.347193
 $D2YY1 = .0000064975$ D3YY1=-.0000034155
 $DEL0 = 3.918471$ DEL1= .049754 DEL= 3.968225 X= 33.968220
 $FXX = .0016704210$ DFXX= .0001237180 GXX= 15734.460000 DGXX=
 1847.759000
 $FXXJ = FXX + AK * GXX = -.0000000086$ PRIMERA CONDICION
 $DFFX = -DFXX + AK * DGXX = -.0003198831$ AA= .0108695700

$AB=X*DFFX= -.0108658600$ $AB+AA= .0000037044$ SEGUNDA CONDICION
 $DELX= -.0051704070$ $DELAK= -.0000000001$
 $AK= -.0000001063$

$X=33.9630500000$ $RO=X/B= 6.6607230000$

J	XX	YY=FX+AK*GX	FX	-DFX	GX	DGX	DYY=-DFX+AK*DGX
68	21.00	.0049159750	.005184	.00055766	2521.20000	439.57	-.00060437
69	22.00	.0043466970	.004665	.00048323	2991.50000	501.92	-.00053657
70	23.00	.0038385790	.004213	.00042094	3527.10000	570.40	-.00048156
71	24.00	.0033800420	.003819	.00036849	4134.40000	645.20	-.00043705
72	25.00	.0029615950	.003474	.00032404	4819.90000	727.00	-.00040130
73	26.00	.0025749830	.003169	.00028617	5590.70000	815.80	-.00037286
74	28.00	.0018719080	.002660	.00022580	7417.90000	1016.60	-.00033383
75	30.00	.0012272230	.002256	.00018067	9679.00000	1250.70	-.00031358
76	35.00	-.0003308031	.001551	.00010891	17707.00000	2003.00	-.00032177

$X=30.0000000000$ $RO=X/B= 5.8835020000$

$H2= 5.00$ $H1= -2.00$ $DEN=-350.00000$

$F''(X1)= .00001991$ $F'''(X1)= -.00000242$

$G''(X1)=126.381400$ $G'''(X1)= 9.347193$

$D2YY1= .0000064842$ $D3YY1=-.0000034165$

$DEL0= 3.913583$ $DEL1= .049386$ $DEL= 3.962969$ $X= 33.962970$

$FXX= .0016710550$ $DFXX= .0001237935$ $GXX= 15724.860000$ $DGXX= 1846.968000$

$FXXJ = FXX + AK*GXX = -.0000000084$ PRIMERA CONDICION

$DFFX=-DFXX+AK*DGXX= -.0003200687$ $AA= .0108695700$

$AB=X*DFFX= -.0108704800$ $AB+AA= .0000009197$ SEGUNDA CONDICION

$H2= 5.00$ $H1= -2.00$ $DEN=-350.00000$

$F''(X1) = .00001991$ $F'''(X1) = -.00000242$
 $G''(X1) = 126.381400$ $G'''(X1) = 9.347193$
 $D2YY1 = .0000064842$ $D3YY1 = -.0000034165$
 $DEL0 = 3.913583$ $DEL1 = .049386$ $DEL = 3.962969$ $X = 37.925940$
 $FXX = .0016710550$ $DFXX = .0001237935$ $GXX = 15724.860000$ $DGXX = 1846.968000$
 $FXXJ = FXX + AK * GXX = -.0000000084$ PRIMERA CONDICION
 $DFFX = -DFXX + AK * DGXX = -.0003200687$ $AA = .0108695700$

$X = 33.9629700000$ $RO = X/B = 6.6607070000$
 $AB = X * DFFX = -.0108704800$ $AB + AA = .0000009197$ SEGUNDA CONDICION
 $FXXJ = -.0000000084$ $VO = .1501342000$ $VR = .1501341000$

POTENCIAL CENTRAL PARA EL ATOMO DE URANIO

GRADO DE IONIZACION = 0
 CONSTANTE DE AJUSTE AK = -.0000001063

LA DISTANCIA RADIAL ESTA EN UNIDADES ATOMICAS
 LA CARGA $Z2 = 2 * Z * XXJ + 2 * R * VO$ ESTA EN HARTREES

TABLA DE DATOS PARA EL ÁTOMO DE URANIO

R	Z2	R	Z2	R	Z2	R	Z2
.000000184.000000	.001961181.323400	.003922178.845500	.005884176.494600				
.007845174.243000	.009806172.077900	.011767169.988300	.013728167.963000				
.015689166.000300	.017651164.092800	.019612162.238700	.039223145.934800				
.058835132.615400	.078447 121.378900	.098058111.715600	.117670103.288800				
.137282 95.866550	.156893 89.274210	.176505 83.379220	.196117 78.076700				
.235340 68.930790	.274563 61.335990	.313787 54.944560	.353010 49.504410				
.392233 44.831540	.431457 40.784260	.470680 37.254020	.509903 34.156180				

.549127	31.422660	.588350	28.996410	.627573	26.835120	.666797	24.901990
.706020	23.163900	.745244	21.598760	.784467	20.180820	.882525	17.182990
.980584	14.794550	1.078642	12.864610	1.176700	11.286260	1.274759	9.981482
1.372817	8.892870	1.470875	7.976991	1.568934	7.201090	1.666992	6.539402
1.765051	5.971865	1.863109	5.482467	1.961167	5.058690	2.059226	4.690223
2.157284	4.368412	2.255342	4.086812	2.353401	3.839343	2.451459	3.621397
2.549517	3.429104	2.647576	3.259142	2.745634	3.108561	2.843693	2.975144
2.941751	2.856490	3.039809	2.751301	3.137867	2.657562	3.235926	2.574271
3.333984	2.500201	3.432043	2.434331	3.530101	2.375803	3.628159	2.323850
3.726218	2.277763	3.824276	2.236976	3.922334	2.200909	4.118451	2.141180
4.314568	2.095321	4.510684	2.060715	4.706801	2.035232	4.902918	2.017125
5.099035	2.004876	5.491268	1.993286	5.883502	1.992439	6.864085	2.000201

ANEXO 6

TAREAS QUE REALIZA EL PROGRAMA *ELIG* PARA EL CÁLCULO DE FUNCIONES DE ONDA EN ELECTRONES LIGADOS

Código	Tarea
A03	Descripción del orbital electrónico ligado cuya función de onda se calcula.
A05	Cálculo de los polinomios de interpolación de la energía potencial:
	- Numero de intervalos de interpolación.
	- Coordenadas radiales de los intervalos.
	- Grados de los polinomios de interpolación.
A04	Información sobre la energía potencial electrostática atómica.
	- Numero de datos en la tabla de esta energía potencial.
	- Tabla de distancias radiales y doble de la carga nuclear efectiva.
	- Número Z y número de masa A del átomo, y número total de electrones presentes.
A06	Información sobre la grilla de integración de la ecuación de onda:
	- Numero de intervalos.
	- Tabla de las coordenadas radiales de los intervalos de integración.
	- Número de pasos de integración en cada intervalo.
A07	Valor inicial del doble del autovalor de energía del orbital por calcular
A10	Datos sobre las propiedades del orbital por calcular:
	- Valor del momento angular orbital.
	- Valor del número cuántico relativístico.
	- Factor de aplicación para incluir la energía de la interacción fina.
	- Factor de aplicación para incluir la energía relativística por masa.
A14	Valor de la corrección inicial en el autovalor para la primera iteración y de la corrección final como criterio de convergencia.
A15	Datos requeridos para la integración hacia adentro de la ecuación de onda:
	- Valor del intervalo donde se inicia la integración de la ecuación de onda hacia adentro.
	- Ubicación del punto de la grilla donde se comparan los valores de la función de onda y su derivada para calcular la siguiente corrección en el autovalor
A17	Se ordena llevar a cabo la integración de la ecuación de onda si se cuenta con toda la información requerida.
	- Se lleva a cabo hasta 16 iteraciones para hallar un nuevo autovalor que cumpla con el criterio de convergencia. Se listan los resultados de cada iteración.
	- Si no se cumple con este requisito se da por terminado el proceso de integración.
A18	Se lleva a cabo el proceso de normalización de la función de onda.
A26	Se determina el número de ceros de la función de onda calculada y se determina el número cuántico principal del orbital calculado. De esta manera el programador se entera si la función de onda calculada corresponde al orbital deseado. Si no fuera así, este resultado permite deducir un nuevo valor inicial del autovalor para un siguiente intento,

A28	Se guardan los resultados de la función de onda calculada. Esto incluye:
	- Descripción del orbital.
	- Número de pasos de la grilla de integración.
	- Número de intervalos de integración utilizados.
	- Energía del orbital calculado.
	- Tabla de la componente radial de la componente principal.
	- Tabla de la componente radial de la componente secundaria.
A27	Se da por terminada la tarea.

0A03

FIERRO N=1 L=0 J=1/2 K= -1 Z=26 A=56

0A05

OINTERVALOS Y GRADOS DE LAS CURVAS DE AJUSTE

.000000 .028000 .200000 .330000 .800000 1.250000 2.150000 3.000000
4.500000 6.100000 10.000000 30.000000
3 3 2 2 2 2 2 1 1 1

0A04

TABLA DEL RADIO Y DEL DOBLE DE LA CARGA DEL ELEMENTO

.000000 52.000000 .002988 51.244460 .005977 50.545080 .008965 49.881580
.011954 49.246160 .014942 48.635190 .017931 48.045520 .020919 47.474070
.023908 46.920290 .026896 46.382110 .029885 45.859010 .059770 41.260340
.089655 37.505110 .119540 34.338520 .149425 31.616530 .179310 29.243970
.209195 27.155330 .239080 25.301210 .268965 23.644170 .298850 22.154560
.358620 19.587710 .418390 17.459190 .478159 15.670750 .537929 14.151130
.597699 12.848340 .657469 11.722330 .717239 10.742420 .777009 9.884687
.836779 9.129896 .896549 8.461921 .956319 7.868803 1.016089 7.340136
1.075859 6.866562 1.135629 6.441838 1.195399 6.058683 1.344823 5.255239
1.494248 4.623778 1.643673 4.121625 1.793098 3.718533 1.942523 3.392413
2.091948 3.127003 2.241373 2.909983 2.390797 2.732052 2.540222 2.585878
2.689647 2.465740 2.839072 2.367063 2.988497 2.286246 3.137922 2.220317
3.287346 2.166769 3.436771 2.123709 3.586196 2.089355 3.735621 2.062323
3.885046 2.041455 4.034471 2.025721 4.183896 2.014210 4.333320 2.006212
4.482745 2.000950 4.632170 2.000004 4.781595 2.000000 4.931019 2.000000
5.080444 2.000000 5.229869 2.000000 5.379294 2.000000 5.528719 2.000000
5.678144 2.000000 5.827569 2.000000 5.976994 2.000000 6.275843 2.000000

6.574693 2.000000 6.873542 2.000000 7.172392 2.000000 7.471242 2.000000
 7.770092 2.000000 8.367791 2.000000 8.965490 2.000000 10.459740 2.000000
 11.953990 2.000000 12.551690 2.000000 14.942480 2.000000 17.930980 2.000000
 20.919480 2.000000 23.907970 2.000000 26.896470 2.000000 29.884970 2.000000

LA CARGA NUCLEAR ES 26.0 Y EL NÚMERO DE MASA ES 56.0 Y EL NÚMERO DE ELECTRONES ES 26.0

Ingrese el valor de BETA

AJUSTE DE CURVA PARA EL POTENCIAL ATÓMICO

NÚMERO DE INTERVALO	ERROR ESTANDAR	GRADO DEL POLINOMIO
1	.469E-02	3
2	.215E-01	3
3	.663E-02	2
4	.773E-01	2
5	.100E-01	2
6	.177E-01	2
7	.359E-02	2
8	.373E-02	2
9	.114E-05	1
10	.000E+00	1
11	.000E+00	1

0A06

21 INTERVALOS DE INTEGRACIÓN. PUNTOS EXTREMOS Y NÚMERO DE PASOS

.000001 .000011 .000031 .000071 .000151 .000311 .000631 .001271
 .002551 .005111 .010231 .020471 .040951 .081911 .163831 .327671
 .777351 1.510711 3.021421 6.042841 12.085681 24.171361
 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 20 20 20

0A07

0VALOR DE ENTRADA DE 2E = -.35000000E+03

0A10

0MOMENTUM ANGULAR L = 0

EL NÚMERO CUÁNTICO RELATIVÍSTICO ES -1.00

LA CORRECCIÓN RELATIVISTA POR VELOCIDAD TIENE UN PESO = 1.00

LA CORRECCIÓN DE SPIN SE TOMA CON UN PESO= 1.00

-350.0000000000000000

02ZP O DELT2ZP CALCULADO DE LAS CURVAS DE AJUSTE

0INTERVALO DE R = .000001 A R = .000011

.899004 1.348431 1.797769 2.246987 2.696056
3.144946 3.593627 4.042069 4.490242 4.938117
5.385663 5.832851 6.279650 6.726032 7.171966
7.617422 8.062370 8.506781 8.950624 9.393870
9.836490

0INTERVALO DE R = .000011 A R = .000031

9.836490 10.719727 11.600099 12.477364 13.351286
14.221624 15.088140 15.950595 16.808750 17.662366
18.511205 19.355027 20.193594 21.026667 21.854006
22.675373 23.490530 24.299236 25.101254 25.896345
26.684269

0INTERVALO DE R = .000031 A R = .000071

26.684269 28.237661 29.759522 31.247939 32.701001
34.116798 35.493418 36.828951 38.121484 39.369108
40.569911 41.721983 42.823411 43.872285 44.866694
45.804727 46.684473 47.504020 48.261459 48.954876
49.582363

0INTERVALO DE R = .000071 A R = .000151

49.582363 50.631897 51.394773 51.855703 51.973118
51.972095 51.971072 51.970050 51.969027 51.968005
51.966983 51.965961 51.964938 51.963916 51.962894
51.961873 51.960851 51.959829 51.958807 51.957786
51.956764

OINTERVALO DE R = .000151 A R = .000311

51.956764 51.954722 51.952679 51.950637 51.948595
51.946554 51.944513 51.942472 51.940431 51.938391
51.936351 51.934312 51.932272 51.930233 51.928195
51.926156 51.924118 51.922081 51.920043 51.918006
51.915970

OINTERVALO DE R = .000311 A R = .000631

51.915970 51.911897 51.907826 51.903756 51.899687
51.895619 51.891553 51.887488 51.883424 51.879362
51.875300 51.871240 51.867182 51.863124 51.859068
51.855013 51.850959 51.846906 51.842855 51.838805
51.834756

OINTERVALO DE R = .000631 A R = .001271

51.834756 51.826662 51.818574 51.810490 51.802411
51.794337 51.786267 51.778203 51.770144 51.762090
51.754040 51.745996 51.737956 51.729922 51.721892
51.713867 51.705847 51.697832 51.689822 51.681817
51.673817

OINTERVALO DE R = .001271 A R = .002551

51.673817 51.657830 51.641864 51.625916 51.609988
51.594080 51.578190 51.562320 51.546469 51.530637
51.514824 51.499031 51.483256 51.467500 51.451763
51.436045 51.420346 51.404666 51.389004 51.373361
51.357737

OINTERVALO DE R = .002551 A R = .005111

51.357737 51.326545 51.295426 51.264382 51.233411
51.202513 51.171688 51.140936 51.110255 51.079647
51.049110 51.018644 50.988249 50.957925 50.927670
50.897485 50.867370 50.837324 50.807347 50.777438
50.747598

OINTERVALO DE R = .005111 A R = .010231

50.747598 50.688119 50.628909 50.569965 50.511284
50.452863 50.394700 50.336791 50.279135 50.221728
50.164569 50.107653 50.050979 49.994543 49.938344
49.882378 49.826642 49.771134 49.715852 49.660792
49.605952

OINTERVALO DE R = .010231 A R = .020471

49.605952 49.496921 49.388737 49.281379 49.174824
49.069051 48.964039 48.859767 48.756211 48.653352
48.551167 48.449635 48.348734 48.248443 48.148739
48.049602 47.951010 47.852941 47.755374 47.658287
47.561659

OINTERVALO DE R = .020471 A R = .040951

47.561659 47.369691 47.179299 46.990309 46.802548
46.615845 46.430026 46.244919 46.059192 45.886354
45.714631 45.544015 45.374501 45.206083 45.038752
44.872504 44.707331 44.543228 44.380187 44.218202
44.057267

OINTERVALO DE R = .040951 A R = .081911

44.057267 43.738520 43.423893 43.113336 42.806795
42.504220 42.205557 41.910756 41.619765 41.332530
41.049002 40.769127 40.492855 40.220132 39.950907
39.685128 39.422744 39.163702 38.907951 38.655438
38.406113

OINTERVALO DE R = .081911 A R = .163831

38.406113 37.916813 37.439639 36.974173 36.520002
36.076709 35.643880 35.221100 34.807954 34.404026
34.008902 33.622166 33.243403 32.872198 32.508136
32.150801 31.799780 31.454656 31.115014 30.780440
30.450518

OINTERVALO DE R = .163831 A R = .327671

30.450518	29.802970	29.169050	28.545436	27.928808
27.441614	26.909498	26.391077	25.886351	25.395319
24.917983	24.454340	24.004393	23.568140	23.145582
22.736719	22.341551	21.960077	21.592298	21.238213
20.897823				

OINTERVALO DE R = .327671 A R = .777351

20.897823	19.805346	19.023841	18.271534	17.548425
16.854514	16.189801	15.554285	14.947968	14.370848
13.822927	13.304203	12.814677	12.354349	11.923219
11.521287	11.148553	10.805017	10.490678	10.205538
9.949596				

OINTERVALO DE R = .777351 A R = 1.510711

9.949596	9.384039	8.964988	8.567231	8.190767
7.835597	7.501721	7.189138	6.897850	6.627855
6.379153	6.151746	5.945632	5.653406	5.483773
5.319590	5.160858	5.007576	4.859745	4.717364
4.580434				

OINTERVALO DE R = 1.510711 A R = 3.021421

4.580434	4.315540	4.073775	3.855140	3.659634
3.487259	3.338013	3.211897	3.108910	2.971646
2.877495	2.789508	2.707687	2.632032	2.562542
2.499217	2.442058	2.391064	2.346236	2.307573
2.256167				

OINTERVALO DE R = 3.021421 A R = 6.042841

2.256167	2.229423	2.204180	2.180439	2.158198
2.137458	2.118219	2.100481	2.084244	2.069508
2.056272	2.044538	2.034304	2.025572	2.018340
2.012609	2.008379	2.005651	2.004423	2.004695
2.000002	2.000001	2.000001	2.000001	2.000001
2.000001	2.000001	2.000001	2.000001	2.000001
2.000000	2.000000	2.000000	2.000000	2.000000

2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 1.999999
1.999999

OINTERVALO DE R = 6.042841 A R = 12.085681

1.999999 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000

OINTERVALO DE R = 12.085681 A R = 24.171361

2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000

0A14

OINCREMENTO INICIAL Y FINAL EN 2E

.40000000E+02 .10000000E-02

0A15

INTEGRACIÓN HACIA ADENTRO SE INICIA EN EL INTERVALO 17 Y LA
COMPARACIÓN SE HACE A 2 PASOS DEL INTERVALO 14

0A17

341.757013404535300	-350.0000000000000000	357
OD1 = -.208561E+02		
341.757013404535300	-310.0000000000000000	357
OD1 = -.156605E+02		
DE2 = .400000E+02		
-270.0000000000000000		
262.403114321358700	-270.0000000000000000	357
OD1 = .117644E+02		
DE2 = -.171587E+02		
-287.158708794882700		
279.437599798222900	-287.158708794882700	357
OD1 = .101597E+01		
DE2 = -.162189E+01		
-288.780596283834800		
281.047339854634600	-288.780596283834800	357
OD1 = .171776E+00		
DE2 = -.330020E+00		
-289.110616415456700		
281.374879662465200	-289.110616415456700	357
OD1 = .292709E-02		
DE2 = -.572107E-02		
-289.116337485597000		
281.380557709334900	-289.116337485597000	357
OD1 = .855485E-05		
VALOR PROPIO 2E = -.289116354E+03 = -.39336274E+01 keV		
ENCONTRADO DESPUÉS DE, 6 ITERACIONES		

0A18

LOS FACTORES DE NORMALIZACIÓN SON .30452E+04 .20105E+01

0A26

NÚMERO DE CEROS = 0

NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL N = 1 NÚMERO CUÁNTICO DEL MOMENTUM ANGULAR L = 0

NÚMERO CUÁNTICO EFECTIVO NX = .058812

EL DEFECTO CUÁNTICO = .941188

EL CORRIMIENTO DE FASE EXTRAPOLADO ES = 2.956830 RAD

0A28

0A27

0A03

Bario I N=1 L=0 J=1/2 K=-1 Z=56 A=130

0A05

OINTERVALOS Y GRADOS DE LAS CURVAS DE AJUSTE

.000000 .020000 .120000 .400000 .800000 1.250000 2.500000 3.300000

4.500000 7.500000 13.000000 27.600000

3 3 3 3 4 4 4 3 2 2 2

0A04

TABLA DEL RADIO Y DEL DOBLE DE LA CARGA DEL ELEMENTO

.000000112.000000 .002314110.370400 .004628108.861800 .006942107.430400

.009256106.059500 .011570104.741300 .013885103.469000 .016199102.235800

.018513101.040800 .020827 99.879360 .023141 98.750400 .046282 88.822720

.069423 80.711680 .092564 73.868480 .115705 67.982880 .138846 62.849920

.161987 58.328480 .185128 54.312160 .208269 50.720320 .231410 47.489120

.277691 41.914880 .323973 37.284800 .370255 33.387200 .416537 30.068640

.462819 27.217120 .509101 24.746400 .555383 22.590400 .601665 20.697600

.647947 19.026560 .694229 17.542560 .740510 16.219840 .786792 15.036000

.833074 13.970880 .879356 13.011040 .925638 12.140800 1.041343 10.298180

1.157048 8.826496 1.272752 7.633920 1.388457 6.655376 1.504162 5.843376

1.619867 5.162976 1.735571 4.587744 1.851276 4.097744 1.966981 3.677296

2.082686 3.314192 2.198390 2.998688 2.314095 2.723168 2.429800 2.481360

2.545505 2.268000 2.661209 2.079168 2.776914 1.911168 2.892619 1.761200

3.008324 1.626912 3.124028 1.506288 3.239733 1.397536 3.355438 1.299312

3.471143 1.210160 3.586848 1.129296 3.702552 1.055499 3.818257 .988165

3.933962 .926554 4.049666 .870050 4.165371 .818138 4.281076 .770358
 4.396781 .726286 4.512486 .685586 4.628191 .647909 4.859600 .580597
 5.091010 .522435 5.322419 .471901 5.553828 .427773 5.785238 .389066
 6.016647 .354939 6.479466 .297942 6.942286 .252650 8.099333 .173701
 9.256381 .124723 9.719200 .092684 11.570480 .070813 13.884570 .044118
 16.198670 .029374 18.512760 .020558 20.826860 .014958 23.140950 .011227

LA CARGA NUCLEAR ES 56.0 Y EL NÚMERO DE MASA ES 130.0 Y EL NÚMERO DE ELECTRONES ES 56.0

Ingrese el valor de BETA

AJUSTE DE CURVA PARA EL POTENCIAL ATÓMICO

NÚMERO DE INTERVALO	ERROR ESTANDAR	GRADO DEL POLINOMIO
1	.861E-02	3
2	.238E-01	3
3	.290E-01	3
4	.122E-01	3
5	.000E+00	4
6	.187E-02	4
7	.172E-04	4
8	.191E-03	3
9	.458E-02	2
10	.109E-01	2
11	.915E-03	2

0A06

21 INTERVALOS DE INTEGRACION. PUNTOS EXTREMOS Y NÚMERO DE PASOS

.000001 .000011 .000031 .000071 .000151 .000311 .000631 .001271
 .002551 .005111 .010231 .020471 .040951 .081911 .163831 .327671
 .777351 1.510711 3.021421 6.042841 12.085681 24.171361

10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 20 20 40

40

0A07

OVALOR DE ENTRADA DE 2E = $-1.5000000E+04$

0A10

OMOMENTUM ANGULAR L = 0

EL NÚMERO CUÁNTICO RELATIVÍSTICO ES -1.00

LA CORRECCIÓN RELATIVISTA POR VELOCIDAD TIENE UN PESO = 1.00

LA CORRECCIÓN DE SPIN SE TOMA CON UN PESO= 1.00

-1500.0000000000000000

02ZP O DELT2ZP CALCULADO DE LAS CURVAS DE AJUSTE

OINTERVALO DE R = .000001 A R = .000011

1.462400 2.193530 2.924578 3.655515 4.386313
5.116945 5.847383 6.577599 7.307566 8.037256
8.766641 9.495694 10.224387 10.952691 11.680580
12.408026 13.135001 13.861478 14.587427 15.312823
16.037637

OINTERVALO DE R = .000011 A R = .000031

16.037637 17.485409 18.930521 20.372752 21.811879
23.247683 24.679940 26.108429 27.532929 28.953218
30.369073 31.780275 33.186601 34.587828 35.983737
37.374105 38.758710 40.137331 41.509746 42.875733
44.235072

OINTERVALO DE R = .000031 A R = .000071

44.235072 46.932915 49.601502 52.239059 54.843815
57.413995 59.947826 62.443536 64.899351 67.313499
69.684205 72.009698 74.288203 76.517948 78.697160
80.824066 82.896892 84.913866 86.873213 88.773162
90.611940

OINTERVALO DE R = .000071 A R = .000151

90.611940 94.098886 97.319868 100.260700 102.907199
105.245178 107.260453 108.938840 110.266154 111.228209
111.810822 111.910656 111.907797 111.904939 111.902080
111.899222 111.896365 111.893507 111.890650 111.887793

111.884937

OINTERVALO DE R = .000151 A R = .000311

111.884937 111.879225 111.873514 111.867804 111.862096

111.856388 111.850682 111.844978 111.839274 111.833571

111.827870 111.822170 111.816471 111.810774 111.805077

111.799382 111.793688 111.787995 111.782304 111.776613

111.770924

OINTERVALO DE R = .000311 A R = .000631

111.770924 111.759549 111.748179 111.736814 111.725453

111.714098 111.702747 111.691401 111.680059 111.668722

111.657391 111.646064 111.634741 111.623424 111.612111

111.600803 111.589499 111.578201 111.566907 111.555617

111.544333

OINTERVALO DE R = .000631 A R = .001271

111.544333 111.521778 111.499242 111.476725 111.454227

111.431747 111.409287 111.386844 111.364421 111.342016

111.319630 111.297263 111.274914 111.252583 111.230271

111.207978 111.185703 111.163446 111.141208 111.118988

111.096787

OINTERVALO DE R = .001271 A R = .002551

111.096787 111.052438 111.008163 110.963961 110.919831

110.875773 110.831787 110.787873 110.744031 110.700260

110.656560 110.612931 110.569373 110.525885 110.482467

110.439119 110.395841 110.352633 110.309493 110.266423

110.223421

OINTERVALO DE R = .002551 A R = .005111

110.223421 110.137623 110.052098 109.966842 109.881856

109.797136 109.712681 109.628489 109.544558 109.460886

109.377471 109.294313 109.211407 109.128754 109.046350

108.964195 108.882285 108.800620 108.719198 108.638016

108.557072

OINTERVALO DE R = .005111 A R = .010231

108.557072 108.395895 108.235649 108.076322 107.917896
107.760359 107.603695 107.447888 107.292924 107.138789
106.985466 106.832942 106.681202 106.530229 106.380010
106.230530 106.081773 105.933725 105.786370 105.639695
105.493684

OINTERVALO DE R = .010231 A R = .020471

105.493684 105.203593 104.915979 104.630722 104.347704
104.066804 103.787904 103.510883 103.235623 102.962005
102.689908 102.419214 102.149803 101.881556 101.614353
101.348076 101.082604 100.817818 100.553600 100.289829
100.040013

OINTERVALO DE R = .020471 A R = .040951

100.040013 99.545697 99.055789 98.570251 98.089044
97.612130 97.139472 96.671032 96.206770 95.746649
95.290631 94.838678 94.390751 93.946813 93.506826
93.070751 92.638549 92.210184 91.785617 91.364810
90.947725

OINTERVALO DE R = .040951 A R = .081911

90.947725 90.124566 89.315838 88.521234 87.740450
86.973181 86.219122 85.477967 84.749413 84.033155
83.328887 82.636304 81.955102 81.284975 80.625620
79.976730 79.338001 78.709128 78.089807 77.479731
76.878597

OINTERVALO DE R = .081911 A R = .163831

76.878597 75.701934 74.557378 73.442488 72.354828
71.291956 70.251434 69.230823 68.227683 67.239576
66.198482 65.311332 64.440165 63.584754 62.744873
61.920295 61.110794 60.316142 59.536115 58.770484
58.019024

OINTERVALO DE R = .163831 A R = .327671

58.019024 56.557709 55.150359 53.795160 52.490301
51.233970 50.024354 48.859641 47.738019 46.657676
45.616799 44.613577 43.646198 42.712848 41.811717
40.940991 40.098859 39.283509 38.493128 37.725904
36.980025

OINTERVALO DE R = .327671 A R = .777351

36.980025 35.027825 33.185298 31.414977 29.990017
28.574099 27.245216 25.998881 24.830604 23.735898
22.710273 21.749241 20.848313 20.003000 19.208815
18.461267 17.755869 17.088132 16.453567 15.847686
15.266000

OINTERVALO DE R = .777351 A R = 1.510711

15.266000 14.394301 13.594449 12.854490 12.169760
11.535733 10.948022 10.402377 9.894686 9.420976
8.977411 8.560296 8.166070 7.807648 7.469713
7.150583 6.849209 6.564581 6.295727 6.041714
5.801645

OINTERVALO DE R = 1.510711 A R = 3.021421

5.801645 5.568048 5.347438 5.138962 4.941811
4.755215 4.578451 4.410835 4.251729 4.100534
3.956697 3.819706 3.689092 3.564429 3.445332
3.331462 3.222518 3.118247 3.018434 2.922909
2.831546 2.744257 2.661003 2.581781 2.506636
2.435654 2.368962 2.294268 2.229168 2.166540
2.106277 2.048273 1.992430 1.938649 1.886838
1.836908 1.788773 1.742353 1.697569 1.654348
1.612620

OINTERVALO DE R = 3.021421 A R = 6.042841

1.612620 1.533381 1.459369 1.390162 1.325017
1.264712 1.207857 1.154279 1.103807 1.056268
1.011490 .969300 .929528 .891999 .856543

.822987	.791159	.760886	.731996	.704318
.674446	.652789	.631687	.611139	.591147
.571709	.552827	.534499	.516726	.499509
.482846	.466738	.451185	.436187	.421744
.407856	.394522	.381744	.369520	.357852
.346738				

OINTERVALO DE R = 6.042841 A R = 12.085681

.346738	.336180	.326176	.316727	.307833
.299494	.291710	.284481	.277807	.271688
.266124	.261114	.256660	.252760	.249416
.246626	.244391	.242711	.241586	.241016
.211006	.205743	.200580	.195518	.190555
.185693	.180931	.176269	.171707	.167245
.162884	.158623	.154462	.150401	.146441
.142581	.138820	.135161	.131601	.128141
.124782	.121523	.118364	.115306	.112347
.109489	.106731	.104073	.101516	.099058
.096701	.094444	.092287	.090231	.088274
.086418	.084662	.083006	.081451	.079996
.078640	.077385	.076231	.075176	.074222
.073368	.072614	.071960	.071407	.070953
.070600	.070347	.070195	.070142	.070190
.070338	.070586	.070935	.071383	.071932
.072581				

OINTERVALO DE R = 12.085681 A R = 24.171361

.072581	.074180	.076179	.078579	.081380
.084582	.088185	.048758	.047696	.046649
.045617	.044601	.043601	.042615	.041646
.040691	.039752	.038828	.037920	.037027
.036149	.035287	.034440	.033608	.032792
.031991	.031205	.030435	.029681	.028941
.028217	.027509	.026815	.026137	.025475

.024828	.024196	.023579	.022978	.022393
.021822	.021267	.020728	.020204	.019695
.019201	.018723	.018260	.017813	.017381
.016964	.016563	.016177	.015807	.015451
.015112	.014787	.014478	.014184	.013906
.013643	.013396	.013163	.012946	.012745
.012559	.012388	.012233	.012093	.011968
.011859	.011765	.011686	.011623	.011575
.011543	.011526	.011524	.011538	.011567
.011611				

0A14

OINCREMENTO INICIAL Y FINAL EN 2E

.10000000E+03 .10000000E-04

0A15

INTEGRACIÓN HACIA ADENTRO SE INICIA EN EL INTERVALO 16 Y LA
COMPARACIÓN SE HACE A 2 PASOS DEL INTERVALO 13

0A17

1441.903204793847000 -1500.0000000000000000 336

OD1 = .668173E+01

1441.903204793847000 -1400.0000000000000000 336

OD1 = .302662E+02

DE2 = -.750000E+02

-1475.0000000000000000

1417.873841232184000 -1475.0000000000000000 336

OD1 = .182160E+02

DE2 = -.750000E+02

-1550.0000000000000000

1489.912008794142000 -1550.0000000000000000 336

OD1 = -.111398E+02

DE2 = .284607E+02

-1521.539338835338000

1462.592923806361000 -1521.539338835338000 336

OD1 = $-.170841E+01$
DE2 = $.515538E+01$
-1516.383958788495000
1457.642022345199000 -1516.383958788495000 336

OD1 = $.189323E+00$
DE2 = $-.514314E+00$
-1516.898272929374000
1458.135968947075000 -1516.898272929374000 336

OD1 = $-.292589E-02$
DE2 = $.782751E-02$
-1516.890445423026000
1458.128451473396000 -1516.890445423026000 336

OD1 = $-.494300E-05$
DE2 = $.132461E-04$
-1516.890432176879000
1458.128438751903000 -1516.890432176879000 336

OD1 = $.129305E-09$
VALOR PROPIO 2E = $-.151689043E+04$ = $-.20638340E+02$ keV
ENCONTRADO DESPUÉS DE, 8 ITERACIONES

0A18

LOS FACTORES DE NORMALIZACIÓN SON $.14183E+05$ $.12294E-01$

0A26

NÚMERO DE CEROS = 0

NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL N = 1 NÚMERO CUÁNTICO DEL MOMENTUM
ANGULAR L = 0

NÚMERO CUÁNTICO EFECTIVO NX = $.025676$

EL DEFECTO CUÁNTICO= $.974324$

EL CORRIMIENTO DE FASE EXTRAPOLADO ES= 3.060930 RAD

0A28

0A27

A03

URANIO 1MAS N=1 L=0 J=1/2 K= -1 Z=92 A=238

0A05

OINTERVALOS Y GRADOS DE LAS CURVAS DE AJUSTE

.000000 .011000 .040000 .130000 .400000 .800000 1.400000 2.300000

3.000000 5.500000 80.000000

4 4 3 3 3 3 2 1 0

0A04

TABLA DEL RADIO Y DEL DOBLE DE LA CARGA DEL ELEMENTO

.000000184.000000 .001961181.323400 .003922178.845500 .005884176.494600

.007845174.243000 .009806172.077900 .011767169.988300 .013728167.963000

.015689166.000300 .017651164.092800 .019612162.238700 .039223145.934800

.058835132.615400 .078447121.378900 .098058111.715600 .117670103.288800

.137282 95.866600 .156893 89.274260 .176505 83.379270 .196117 78.076760

.235340 68.930870 .274563 61.336080 .313787 54.944660 .353010 49.504520

.392233 44.831660 .431457 40.784390 .470680 37.254170 .509903 34.156340

.549127 31.422820 .588350 28.996590 .627573 26.835320 .666797 24.902200

.706020 23.164120 .745244 21.598990 .784467 20.181060 .882525 17.183270

.980584 14.794850 1.078642 12.864940 1.176700 11.286620 1.274759 9.981874

1.372817 8.893291 1.470875 7.977441 1.568934 7.201571 1.666992 6.539912

1.765051 5.972404 1.863109 5.483036 1.961167 5.059287 2.059226 4.690850

2.157284 4.369069 2.255342 4.087496 2.353401 3.840056 2.451459 3.622138

2.549517 3.429873 2.647576 3.259940 2.745634 3.109386 2.843693 2.975997

2.941751 2.857369 3.039809 2.752208 3.137867 2.658496 3.235926 2.575230

3.333984 2.501186 3.432043 2.435342 3.530101 2.376839 3.628159 2.324911

3.726218 2.278849 3.824276 2.238086 3.922334 2.202042 4.118451 2.142358

4.314568 2.096542 4.510684 2.061977 4.706801 2.036532 4.902918 2.018460

5.099035 2.006243 5.491268 2.000000 5.883502 2.000000 10.000000 2.000000

20.000000 2.000000 40.000000 2.000000 80.000000 2.000000

LA CARGA NUCLEAR ES 92.0 Y EL NÚMERO DE MASA ES 238.0 Y EL NÚMERO DE ELECTRONES ES 91.0

Ingrese el valor de BETA

AJUSTE DE CURVA PARA EL POTENCIAL ATÓMICO

NÚMERO DE INTERVALO	ERROR ESTANDAR	GRADO DEL POLINOMIO
1	.138E-02	4
2	.249E-03	4
3	.000E+00	3
4	.764E-01	3
5	.162E-01	3
6	.662E-02	3
7	.369E-02	3
8	.328E-02	2
9	.967E-01	1
10	.000E+00	0

0A06

21 INTERVALOS DE INTEGRACIÓN. PUNTOS EXTREMOS Y NÚMERO DE PASOS

.000001 .000011 .000031 .000071 .000151 .000311 .000631 .001271
.002551 .005111 .010231 .020471 .040951 .081911 .163831 .327671
.777351 1.510711 3.021421 6.042841 12.085681 24.171361

10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 20 20

20

0A07

OVALOR DE ENTRADA DE 2E = -.51500000E+04

0A10

OMOMENTUM ANGULAR L = 0

EL NÚMERO CUÁNTICO RELATIVÍSTICO ES -1.00

LA CORRECCIÓN RELATIVISTA POR VELOCIDAD TIENE UN PESO = 1.00

LA CORRECCIÓN DE SPIN SE TOMA CON UN PESO= 1.00

-5150.0000000000000000

02ZP O DELT2ZP CALCULADO DE LAS CURVAS DE AJUSTE

OINTERVALO DE R = .000001 A R = .000011

1.963925 2.945826 3.927652 4.909379 5.890981
6.872434 7.853713 8.834793 9.815650 10.796258
11.776592 12.756628 13.736341 14.715705 15.694697
16.673291 17.651463 18.629187 19.606438 20.583193
21.559425

OINTERVALO DE R = .000011 A R = .000031

21.559425 23.510224 25.458636 27.404463 29.347505
31.287564 33.224441 35.157936 37.087852 39.013989
40.936148 42.854130 44.767737 46.676769 48.581028
50.480315 52.374431 54.263177 56.146353 58.023763
59.895205

OINTERVALO DE R = .000031 A R = .000071

59.895205 63.619395 67.317331 70.987423 74.628079
78.237709 81.814722 85.357525 88.864529 92.334142
95.764773 99.154830 102.502723 105.806861 109.065652
112.277506 115.440831 118.554036 121.615531 124.623723
127.577022

OINTERVALO DE R = .000071 A R = .000151

127.577022 133.312577 138.809466 144.054960 149.036331
153.740849 158.155787 162.268414 166.066003 169.535824
172.665149 175.441248 177.851394 179.882856 181.522906
182.758816 183.577856 183.967298 183.796220 183.790544
183.784869

OINTERVALO DE R = .000151 A R = .000311

183.784869 183.773523 183.762181 183.750844 183.739512
183.728185 183.716862 183.705544 183.694230 183.682921
183.671617 183.660317 183.649022 183.637731 183.626445
183.615164 183.603887 183.592615 183.581347 183.570084
183.558826

OINTERVALO DE R = .000311 A R = .000631

183.558826 183.536322 183.513836 183.491369 183.468919
183.446488 183.424074 183.401678 183.379300 183.356939
183.334597 183.312271 183.289963 183.267673 183.245400
183.223145 183.200906 183.178685 183.156481 183.134295
183.112125

OINTERVALO DE R = .000631 A R = .001271

183.112125 183.067837 183.023616 182.979463 182.935376
182.891356 182.847402 182.803513 182.759689 182.715930
182.672235 182.628604 182.585037 182.541532 182.498091
182.454711 182.411393 182.368136 182.324941 182.281806
182.238731

OINTERVALO DE R = .001271 A R = .002551

182.238731 182.152760 182.067026 181.981524 181.896252
181.811207 181.726386 181.641786 181.557403 181.473235
181.389280 181.305534 181.221994 181.138658 181.055523
180.972586 180.889845 180.807297 180.724939 180.642769
180.560784

OINTERVALO DE R = .002551 A R = .005111

180.560784 180.397360 180.234647 180.072627 179.911280
179.750589 179.590537 179.431105 179.272279 179.114042
178.956378 178.799273 178.642712 178.486683 178.331171
178.176164 178.021650 177.867617 177.714054 177.560951
177.408298

OINTERVALO DE R = .005111 A R = .010231

177.408298 177.104302 176.801999 176.501327 176.202235
175.904678 175.608622 175.314040 175.020914 174.729235
174.439003 174.150224 173.862916 173.577103 173.292819
173.010105 172.729013 172.449602 172.171938 171.896099
171.622169

OINTERVALO DE R = .010231 A R = .020471

171.622169 171.080419 170.527999 169.988275 169.453197
168.922655 168.396540 167.874745 167.357169 166.843711
166.334273 165.828762 165.327085 164.829155 164.334884
163.844191 163.356995 162.873220 162.392790 161.915634
161.441683

OINTERVALO DE R = .020471 A R = .040951

161.441683 160.503139 159.576665 158.661816 157.758191
156.865437 155.983244 155.111350 154.249539 153.397638
152.555524 151.723116 150.900382 150.087332 149.284027
148.490568 147.707107 146.933837 146.171002 145.418888
144.516912

OINTERVALO DE R = .040951 A R = .081911

144.516912 143.065427 141.637711 140.233379 138.852051
137.493343 136.156874 134.842261 133.549121 132.277073
131.025734 129.794722 128.583654 127.392148 126.219823
125.066294 123.931182 122.814102 121.714673 120.632512
119.567237

OINTERVALO DE R = .081911 A R = .163831

119.567237 117.485816 115.467352 113.508786 111.607059
109.759113 107.961890 106.212332 104.507378 102.843973
101.219056 99.629569 97.977625 96.533797 95.117676
93.728860 92.366946 91.031533 89.722219 88.438601
87.180276

OINTERVALO DE R = .163831 A R = .327671

87.180276 84.737901 82.391876 80.138984 77.976008
75.899729 73.906931 71.994397 70.158908 68.397249
66.706201 65.082546 63.523069 62.024551 60.583775
59.197523 57.862579 56.575725 55.333743 54.133417
52.971529

OINTERVALO DE R = .327671 A R = .777351

52.971529 49.953954 47.135177 44.448676 42.105961
39.964539 37.962137 36.091430 34.345093 32.715801
31.196229 29.779052 28.456944 27.222580 26.068636
24.987786 23.972705 23.016068 22.110550 21.248826
20.423570

OINTERVALO DE R = .777351 A R = 1.510711

20.423570 19.150064 18.063005 17.052614 16.114692
15.245039 14.439456 13.693742 13.003698 12.365125
11.773823 11.225592 10.716232 10.241544 9.797329
9.379386 8.983516 8.595868 8.263545 7.948121
7.648969

OINTERVALO DE R = 1.510711 A R = 3.021421

7.648969 7.081330 6.574594 6.123278 5.721895
5.364963 5.046995 4.762508 4.506017 4.272037
4.055084 3.864165 3.697075 3.541705 3.398056
3.266128 3.145920 3.037433 2.940666 2.855620
2.571769

OINTERVALO DE R = 3.021421 A R = 6.042841

2.571769 2.548937 2.526105 2.503273 2.480440
2.457608 2.434776 2.411943 2.389111 2.366279
2.343447 2.320614 2.297782 2.274950 2.252118
2.229285 2.206453 2.183621 2.160789 2.137956
2.115124 2.092292 2.069460 2.046627 2.023795
2.000963 1.978131 1.955298 1.932466 1.909634
1.886801 1.863969 1.841137 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000

OINTERVALO DE R = 6.042841 A R = 12.085681

2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000

OINTERVALO DE R = 12.085681 A R = 24.171361

2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000 2.000000 2.000000 2.000000 2.000000
2.000000

0A14

OINCREMENTO INICIAL Y FINAL EN 2E

.10000000E+04 .10000000E-02

0A15

INTEGRACIÓN HACIA ADENTRO SE INICIA EN EL INTERVALO 17 Y LA
COMPARACIÓN SE HACE A 2 PASOS DEL INTERVALO 12

0A17

4788.074284206641000 -5150.000000000000000 357

OD1 = -.157930E+01

4788.074284206641000 -4150.000000000000000 357

OD1 = .115312E+03

DE2 = -.986489E+03

-5136.489130283013000
 4776.409940963558000 -5136.489130283013000 357
 OD1 = .971076E+00
 DE2 = -.837806E+01
 -5144.867192254492000
 4783.643548233301000 -5144.867192254492000 357
 OD1 = -.617725E+00
 DE2 = .325739E+01
 -5141.609805693353000
 4780.831347181204000 -5141.609805693353000 357
 OD1 = -.286163E-02
 DE2 = .151602E-01
 -5141.594645519992000
 4780.818258281216000 -5141.594645519992000 357
 OD1 = .846774E-05
 VALOR PROPIO 2E = -.514159469E+04 = -.69954942E+02 keV
 ENCONTRADO DESPUÉS DE, 5 ITERACIONES
 0A18
 LOS FACTORES DE NORMALIZACIÓN SON .64216E+05 .87266E-38
 0A26
 NÚMERO DE CEROS = 0
 NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL N = 1 NÚMERO CUÁNTICO DEL MOMENTUM
 ANGULAR L = 0
 NÚMERO CUÁNTICO EFECTIVO NX = .027892
 EL DEFECTO CUÁNTICO= .972108
 EL CORRIMIENTO DE FASE EXTRAPOLADO ES= 3.053967 RAD
 0A28
 0A27

ANEXO 7

TEOREMA DE TAYLOR

Si todas las n-ésimas derivadas parciales de $f(x,y)$ son continuas en una región cerrada y si las (n+1)-ésimas derivadas parciales existen en la región abierta, se tiene:

$$f(x_0 + h, y_0 + k) = f(x_0, y_0) + \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x_0, y_0) + \frac{1}{2!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f(x_0, y_0) + \dots + \frac{1}{n!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^n f(x_0, y_0) + R_n$$

siendo: $\left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x_0, y_0) = hf_x(x_0, y_0) + kf_y(x_0, y_0)$

Así para la función $\varphi(x_0 + \Delta x, k + \Delta k) = 0$

que representa la primera condición en la solución general de la ecuación de Thomas-Fermi, se observa que:

$$\varphi(x_0 + \Delta x, k + \Delta k) = \varphi(x_0, k) + \Delta x \varphi'_x(x_0, k) + \Delta k \varphi'_k(x_0, k) = 0$$

Aquí, $\varphi(x_0, k)$ es cero, debido a esta condición la función $\varphi(x_0, k)$ en el punto x_0 será cero y los términos de las potencias cuadráticas, cúbicas, etc se desprecian por ser bastante pequeños.

Luego: $\Delta x \varphi'_x(x_0, k) + \Delta k \varphi'_k(x_0, k) = 0$

donde: $\Delta k = - \frac{\varphi'_x(x_0, k)}{\varphi'_k(x_0, k)} \Delta x = - \frac{\varphi'_x(x_0) + k \eta'_x(x_0)}{\eta(x_0)} \Delta x$

y para el programa:

$$\Delta k = - \frac{DFFX}{GXX} DELX = - \frac{DFFX + AK \cdot DGXX}{GXX} DELX$$

ANEXO 8

MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE ORDEN 4

Teniendo en cuenta que el método de Euler no es muy útil en problemas prácticos porque requiere un tamaño de paso muy pequeño para precisión razonable y el método de Taylor de orden superior es inaceptable como procedimiento de propósito general debido a la necesidad de obtener derivadas totales de orden alto para $y(x)$.

El método de Runge-Kutta trata de obtener mayor precisión y al mismo tiempo evitan la necesidad de derivadas de orden superior, calculando la función $f(x,y)$ en puntos seleccionados de cada subintervalo.

Así, para la ecuación $y'=f(x,y)$, con $y(x_0) = y_0$ se requieren generar aproximaciones y_n a $y(x_0+nh)$ para un h fijo y para $n = 0,1,2, \dots$ usando la fórmula de recurrencia:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4)$$

donde: $k_1 = hf(x_0,y_0)$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}; y_n + \frac{1}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}; y_n + \frac{1}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = hf(x_n+h; y_n+k_3)$$