

Índice general

| | |
|--|-----------|
| Resumen | 1 |
| Abstract | 3 |
| Introducción | 7 |
| El problema de dos cuerpos | 15 |
| 1. Consideraciones generales | 15 |
| 2. Solución de sistemas con simetría esférica | 19 |
| 2.1. Separación en coordenadas esféricas | 20 |
| 2.2. Condiciones de borde y asintóticas para la función de onda radial | 22 |
| 2.2.1. Soluciones generales | 24 |
| 2.2.2. Soluciones regulares | 26 |
| 2.3. El problema de autovalores de la energía | 28 |
| 2.3.1. Ortogonalidad y clausura | 29 |
| 2.3.2. Ejemplos | 30 |
| 2.4. El problema de autovalores del potencial central | 36 |
| 2.4.1. Ortogonalidad y clausura | 37 |
| 2.4.2. Ejemplos | 38 |
| 2.5. Expansión de estados ligados y de dispersión estacionarios | 43 |
| 2.5.1. Estados ligados | 43 |
| 2.5.2. Estados de dispersión estacionarios | 44 |
| 2.6. Metodologías numéricas para potenciales arbitrarios | 47 |
| 2.6.1. Condiciones de borde naturales en $r = 0$ y $r = r_c$ | 48 |
| 2.6.2. Condiciones de borde generales en $r = r_c$ | 49 |

| | |
|---|------------|
| 3. Resultados | 52 |
| 3.1. Evaluación numérica de las funciones Sturmianas radiales | 52 |
| 3.1.1. Energías negativas | 53 |
| 3.1.2. Energías positivas: discretización del espectro | 57 |
| 3.1.3. Energías positivas y condiciones de flujo | 58 |
| 3.2. Evaluación de estados ligados | 60 |
| 3.3. Evaluación de estados de dispersión radiales | 63 |
| 4. Síntesis del problema de dos cuerpos | 65 |
| El problema de tres cuerpos | 70 |
| 5. Introducción | 70 |
| 6. Átomos de dos electrones | 73 |
| 6.1. El método de Configuración Interacción para estados ligados | 77 |
| 6.1.1. Expansión del Hamiltoniano en ondas parciales | 77 |
| 6.1.2. Bases de funciones Sturmianas | 82 |
| 6.1.3. Representación matricial de la ecuación de Schrödinger en la base de FS | 90 |
| 6.2. Aplicaciones | 92 |
| 6.2.1. Optimización de la base y errores numéricos | 93 |
| 6.2.2. Estados ligados de helio y ion hidrógeno | 102 |
| 6.2.3. Modelos de confinamiento Atómico | 110 |
| 7. El problema de fragmentación | 121 |
| 7.1. Expansión de los estados de colisión | 128 |
| 7.1.1. Condiciones asintóticas y amplitud de dispersión | 130 |
| 7.1.2. Expansión de la función de scattering en una base de FS | 135 |
| 7.1.3. Representación matricial de la ecuación de Schrödinger | 138 |
| 7.2. Modelos de dispersión de partículas | 139 |
| 7.2.1. Ecuaciones para el modelo de onda s | 140 |
| 8. Síntesis del problema de tres cuerpos | 153 |

| | |
|---|------------|
| Conclusiones y perspectivas | 162 |
| Apéndices | 172 |
| A. Algoritmos para la ecuación radial de dos cuerpos | 172 |
| I. Algoritmo rápido para autovalores de matrices tridiagonales no hermíticas | 172 |
| II. Obtención de autovectores mediante algoritmos de iteración inversa . . . | 175 |
| III. Esquemas de orden superior | 176 |
| B. Cálculo de los elementos de matriz de H y S | 179 |
| C. Cálculo de los elementos del vector φ_{μ_0} | 183 |
| D. Integral angular del elemento de matriz $[r_{12}^{-1}]_{\nu',\nu}$ | 186 |
| E. Integral radial del elemento de matriz $[r_{12}^{-1}]_{\nu',\nu}$ | 188 |