DETERMINACION DE ALGUNAS FUNCIONES UTILES EN CALCULOS DE ESTRUCTURA ATOMICA

por

Diógenes Campos*

Resumen

Campos, D.: Determinación de algunas funciones útiles en cálculos de estructura atómica. Rev. Acad. Colomb. Cienc. **21**(79): 97-105, 1997. ISSN 0370-3908.

Se deduce un conjunto de fórmulas analíticas y de relaciones de recurrencia para evaluar algunas integrales útiles en física atómica. Las integrales están relacionadas con la función gamma incompleta.

Palabras claves: Estructura atómica, átomos, valores esperados, función gamma.

Abstract

A set of analytic formulae and recurrence relations are derived to evaluate some integrals used in atomic physics. The integrals are related with the incomplete gamma function.

Key words: Atomic structure, atoms, expectation values, gamma function.

1. Introducción

Para estudiar la estructura atómica se utilizan de manera convencional la teoría de perturbaciones y el método variacional (Brandsden y Joachain 1983). En ausencia de campos externos, el hamiltoniano no relativista del átomo está conformado por la contribución debida a la energía cinética de las partículas y por la energía potencial originada en la interacción de Coulomb entre las partículas cargadas que conforman el átomo (protones y electrones).

Los átomos más sencillos son los hidrogenoides (un electrón) y los pertenecientes a la sucesión isoelectrónica del helio (dos electrones). En estos últimos interviene la repulsión interelectrónica, la cual se puede desarrollar en una serie que incluye contribuciones de la forma

$$\frac{1}{r_1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^{\ell}, \frac{1}{r_2}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{\ell}, \qquad \ell = 0,1,2 \ldots ,$$

* Departamento de Física, Univesidad Nacional de Colombia, Bogotá. E-mail:dcamposr@ciencias.ciencias.unal.edu.co

donde ℓ designa el momentum angular orbital, y r_1 y r_2 son las distancias del electrón 1 y del electrón 2 al núcleo atómico, respectivamente.

Las funciones de onda que describen el estado mecánico cuántico de un átomo se construyen frecuentemente en términos de orbitales con una parte radial $r^k \exp(-a\,r)$, donde k es un número entero, a es un número real y r designa la distancia del electrón al núcleo atómico. Para determinar la estructura electrónica del átomo se necesitan evaluar elementos matriciales de operadores, por ejemplo, los asociados con las potencias (positivas y negativas) de la distancia electrón-núcleo, r^n, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.

El objeto de la presente contribución es deducir algunas relaciones útiles para la evaluación de elementos matriciales en problemas de estructura atómica. Se estudiarán las funciones $K_n(a, x)$ y $J_{r,n}(b, a, x)$ definidas por las siguientes igualdades

$$\int_{\zeta_a \infty}^{x} u^n \exp(-a\,u)\,du := -\exp(-a\,x)\,K_n(a, x), \tag{1}$$

$$\int_{\zeta_a \infty}^{x} \exp(-bu)\,u^r\,K_n(a,u)\,du := -\exp(-bx)\,J_{r,n}(b,a,x), \tag{2}$$

$$a \neq 0, \quad \zeta_{b-a} = \zeta_b = \zeta_a,$$

$$n, r = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots ,$$

donde a y b son parámetros reales, y el signo de un número real (digamos, a) se determina por la relación

$$\zeta_a := \begin{cases} +1 & \text{si } a > 0 \\ \;\;0 & \text{si } a = 0 \\ -1 & \text{si } a < 0 \end{cases} . \tag{3}$$

El límite inferior en (1) y en (2) se ha especificado como $\zeta_a \infty$, de tal modo que las exponenciales $\exp(-a\,u)$ y $\exp(-b\,u)$ en los integrandos garantizan la convergencia de las integrales. Con la elección de $\zeta_a \infty$ como límite inferior se eliminan ambigüedades en la constante aditiva de integración, ya que se establece así, para valores negativos de n, la conexión entre $K_n(a, x)$ y la función integral exponencial $\mathrm{Ei}(-a\,x)$. En el caso de $a = 0$ interpretamos (1) y (2) como integrales indefinidas.

Frecuentemente, en problemas prácticos, es necesario calcular las integrales (1) y (2) con límites diferentes a los indicados en estas relaciones, para lo cual es suficiente aplicar la siguiente identidad a las funciones $K_n(a, x)$ y $J_{r,n}(b, a, x)$:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(u)\,du = \int_{\zeta_a \infty}^{x_1} f(u)\,du - \int_{\zeta_a \infty}^{x_0} f(u)\,du . \tag{4}$$

Nótese que la integral (1) está conectada con la función gamma incompleta (ver apéndice A).

2. Forma explícita de las funciones $K_n(a, x)$, n entero

Para valores positivos de n la definición (1) y la fórmula 2.321.2 de (Gradshteyn y Ryzhik 1965, pg. 92) implican que $K_n(a, x)$ es un polinomio con las siguientes propiedades:

$$K_n(a, x) = \frac{n!}{a^{n+1}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{m!} (a\,x)^m, \quad n \geq 0, \quad a \neq 0 , \tag{5a}$$

$$K_n(a, 0) = \frac{n!}{a^{n+1}}, \quad n \geq 0, \quad a \neq 0 , \tag{5b}$$

$$K_n(0, x) = -\frac{1}{n+1} x^{n+1}, \quad n \geq 0, \quad a = 0 . \tag{5c}$$

En el caso de valores negativos de n hacemos en (1) la substitución $n \to -n$ y para $a \neq 0$ empleamos la fórmula 2.324.2 de (Gradshteyn y Ryzhik 1965, pg. 92). De esta manera obtenemos las siguientes relaciones:

$$K_{-n}(a, x) = \frac{(-a)^{n-1}}{(n-1)!} \left[\sum_{m=1}^{n-1} \frac{(n-1-m)!}{(-a\,x)^{n-m}} - \exp(a\,x)\,\mathrm{Ei}(-a\,x) \right], \quad n \geq 1, \quad a \neq 0 , \tag{6a}$$

$$K_{-1}(0, x) = -\ln x , \tag{6b}$$

$$K_{-n}(0, x) = \frac{1}{n-1} \frac{1}{x^{n-1}} , \quad n \geq 2 . \tag{6c}$$

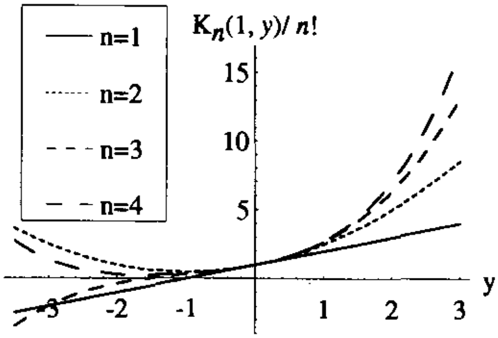

Figura 1. Comportamiento de las funciones $K_n(1, y)$ para algunos valores positivos de n. $K_0(1, y)$ es constante y no se incluye en la gráfica.

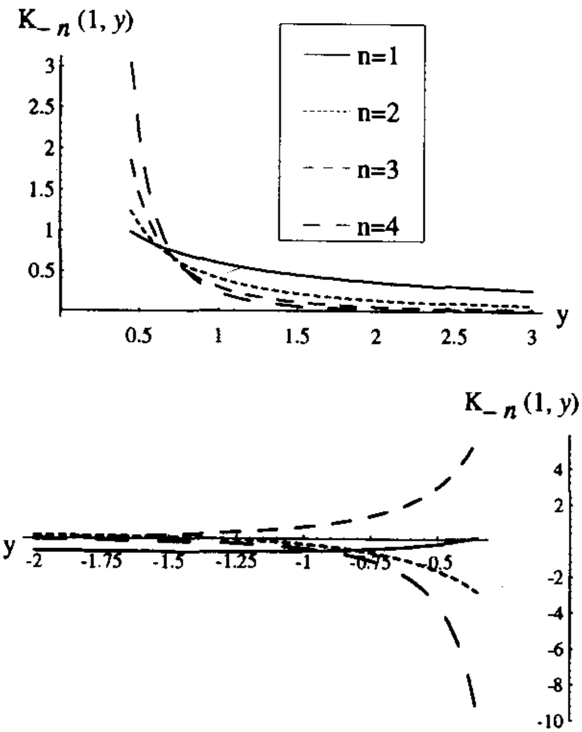

Figura 2. Funciones $K_n(1, y)$ para algunos valores negativos de n. Como las funciones son singulares en $y = 0$, la figura superior muestra el comportamiento para $y > 0$ y la inferior el de $y < 0$.

donde $\mathrm{Ei}(-a\,x)$ es la función integral exponencial. En (6a) se sobreentiende que si el límite superior de la suma es menor que el límite inferior, entonces la suma es cero.

De las relaciones (5) y (6) se deducen las propiedades siguientes:

$$K_n(a, x) = \frac{1}{a^{n+1}} K_n(1, a\,x), \quad n \geq 0, \quad a \neq 0\,, \tag{7a}$$

$$K_{-n}(a, x) = a^{n-1}\, K_{-n}(1, a\,x), \quad n \geq 1, \quad a \neq 0\,. \tag{7b}$$

En el apéndice se indica la forma explícita de las funciones $K_n(1, y)$ para los primeros valores de n y en las figuras 1 y 2 se muestra su comportamiento. Se observa que para $n \leq 1$ las funciones $K_n(1, y)$ son singulares en el origen, $y = 0$.

3. Propiedades de la función $\mathrm{Ei}(-a\,x)$

Para un número complejo z, la función integral exponencial $\mathrm{Ei}(-a\,x)$ se define por la relación (Abramowitz y Stegun 1964; Lebedew 1973; Magnus y otros 1966)

$$\mathrm{Ei}(-z) = -E_1(z)$$

$$:= -\int_z^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t}\, dt, \quad |\mathrm{Arg}(-z)| < \pi, \tag{8a}$$

$$= \gamma + \ln z + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\,k!}(-z)^k, \quad |\mathrm{Arg}(-z)| < \pi\,, \tag{8b}$$

donde la trayectoria de integración en (8a) excluye el origen y no cruza el eje real negativo. El desarrollo (8b) es válido también en cada punto del eje real positivo, $z = x > 0$, esto es,

$$\mathrm{Ei}(-x) = -E_1(x)$$

$$= \gamma + \ln x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\,k!}(-x)^k, \quad \text{si } x > 0 \tag{9}$$

La función $\mathrm{Ei}(-x)$ es univaluada en el plano complejo z con una rama a lo largo del eje real negativo. Continuación analítica conduce a la función

$$\mathrm{Ei}(x) = \mathrm{E}^*(x) \tag{10a}$$

$$:= -\int_{-x}^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t}\,dt, \quad x>0$$

$$= \gamma + \ln x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\,k!}x^k, \quad x>0\,, \tag{10b}$$

donde el integrando en (10a) tiene una singularidad en $t = 0$ y la integral se interpreta como el valor principal de Cauchy (Gradshteyn y Ryzhik 1965, pg. 925; Magnus y otros 1966, pg. 342). En las expresiones anteriores, γ = 0.5772156649015325... es la constante de Euler, Arg z designa el argumento del número complejo z, y son válidas las siguientes relaciones:

$$z = |z|\exp(i\,\phi), \quad \phi = \operatorname{Arg} z, \quad -\pi < \operatorname{Arg} z \le \pi\,,$$

$$\operatorname{Arg} z^* = -\operatorname{Arg} z, \quad \ln z := \ln|z| + i\operatorname{Arg} z, \quad |\operatorname{Arg} z| < \pi\,.$$

El asterisco en z^* significa complejo conjugado, pero en $\mathrm{E}^*(x)$ es una notación que designa el valor principal de Cauchy.

Si elegimos $z = -x \pm i\,0$, $-z = x \mp i\,0$, la función $\mathrm{Ei}(-z) = -\mathrm{E}_1(z)$ toma por encima y por debajo del eje real los valores,

$$\mathrm{Ei}(x \mp i\,0) = -\mathrm{E}_1(-x \pm i\,0) \tag{11}$$

$$= \gamma + \ln(\zeta_x x) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\,k!}x^k + \begin{cases} \pm i\pi & \text{si } x>0 \\ 0, & \text{si } x<0. \end{cases}$$

Por lo tanto, la definición de Ei(z) a lo largo del eje real positivo conduce a las relaciones (Abramowitz y Stegun 1964, 5.1.7, pg. 228; Magnus y otros 1966, pg. 343)

$$\mathrm{Ei}(x \mp i\,0) = -\mathrm{E}_1(-x \pm i\,0) \tag{12}$$

$$= \mathrm{E}^*(x) \pm i\,\pi, \quad \text{si } x>0,$$

$$\mathrm{Ei}(x) = \mathrm{E}^*(x) = -\frac{1}{2}\left[\mathrm{E}_1(-x+i\,0) + \mathrm{E}_1(-x-i\,0)\right]$$

$$= \gamma + \ln x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\,k!}x^k, \quad x>0\,. \tag{13}$$

En este punto es relevante transcribir la fórmula 6.221 de (Gradshteyn y Ryzhik 1965, pg. 641):

$$\int_0^x \mathrm{Ei}(\alpha t)\,dt = x\,\mathrm{Ei}(\alpha x) + \frac{1-\exp(\alpha x)}{\alpha}, \tag{14}$$

Por lo tanto, para cualquier real α, positivo o negativo, se cumplen las siguientes relaciones:

$$\frac{d\mathrm{Ei}(\alpha x)}{dx} = \frac{1}{x}\exp(\alpha x), \quad \frac{d\mathrm{Ei}(\alpha x)}{d\alpha} = \frac{1}{\alpha}\exp(\alpha x)\,. \tag{15}$$

Para terminar esta sección es de anotar que, para valores reales del argumento de la función integral exponencial, las definiciones (8a) y (10a) se pueden agrupar de manera formal en una sola relación como sigue:

$$\mathrm{Ei}(-(\pm y)) = -\int_{\pm y}^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t}\,dt, \quad \text{si } y>0\,. \tag{16}$$

Con base en esta expresión se determina la conexión que existe entre las funciones $\mathrm{Ei}(-ax)$ y $\mathrm{K}_{-1}(a,x)$. Para esto, en (1) hacemos $n = -1$, empleamos el cambio de variables $t = a\,u = \zeta_a|a|u$ y escribimos x en la forma $x = \zeta_x|x|$, de tal manera que la expresión resultante se puede escribir como

$$\exp(-a\,x)\,\mathrm{K}_{-1}(a,x) = \int_{\zeta_a\zeta_x|a||x|}^{\infty} \frac{1}{t}\exp(-t)\,dt\,.$$

Como $\zeta_a\,\zeta_x = \pm 1$, la comparación de la expresión anterior con (16), conduce a la expresión

$$\mathrm{K}_{-1}(a,x) = -\exp(a\,x)\,\mathrm{Ei}(-a\,x), \tag{17a}$$

que concuerda con (6a) y que es válida para números reales arbitrarios a y x ($a \neq 0$, $x \neq 0$). Por otro lado, (17a) y (1) conllevan a la representación

$$\mathrm{Ei}(-a\,x) = \int_{\zeta_a\infty}^{x} \frac{\exp(-a\,u)}{u}\,du\,. \tag{17b}$$

Para finalizar esta sección se anota que, en aplicaciones a problemas de estructura atómica, tanto a como x son cantidades positivas: el parámetro a está asociado con el exponente que acompaña la exponencial en la función de onda, mientras que x es la coordenada radial.

4. Relaciones de recurrencia para $K_n(a, x)$

En diferentes circunstancias, en especial en cálculos numéricos, para determinar las funciones $K_n(a, x)$ es preferible utilizar relaciones de recurrencia, las cuales se obtienen integrando por partes la ecuación (1). Al tener en cuenta los límites de integración y con base en las expresiones (Bronstein y Semendajew 1972)

$$\int u^n \exp(-au)\, du = -\frac{1}{a} u^n \exp(-au) + \frac{n}{a} \int u^{n-1} \exp(-au)\, du, \quad n \geq 1,$$

$$\int u^{-n} \exp(-au)\, du = -\frac{1}{n-1}\left[u^{-(n-1)} \exp(-au) + a \int u^{-(n-1)} \exp(-au)\, du\right], \quad n \geq 2,$$

se obtiene para $a \neq 0$:

$$K_n(a, x) = \frac{1}{a} x^n + \frac{n}{a} K_{n-1}(a, x), \quad n \geq 1\,, \tag{18a}$$

$$K_0(a, x) = \frac{1}{a}\,, \tag{18b}$$

$$K_n(a, x) = -\frac{1}{n+1}\left[x^{n+1} - a\, K_{n+1}(a, x)\right], \quad n \leq -2\,, \tag{19a}$$

$$K_{-1}(a, x) = -\exp(a\,x)\,\mathrm{Ei}(-a\,x). \tag{19b}$$

Las ecuaciones (17a) y (18) conforman dos conjuntos disyuntos de relaciones de recurrencia. Las primeras son válidas para enteros positivos, incluyendo cero, mientras que las segundas se cumplen para enteros negativos.

5. Determinación de las funciones $J_{r,n}(b, a, x)$

Para números enteros r y n, positivos o negativos, y para parámetros reales a y b tales que $\zeta_{b-a} = \zeta_b = \zeta_a$, las funciones $J_{r,n}(b, a, x)$ se definen a través de la relación (2). El objetivo de esta sección es deducir propiedades de estas funciones

En primer lugar es de anotar la validez de la relación

$$J_{r,n}(b, a, x) + J_{n,r}(b, b-a, x) = K_r(b-a, x)\, K_n(a, x). \tag{20}$$

Para demostrar esta identidad se sustituye (1) en (2), se define la función auxiliar

$$g(u, \upsilon) := \exp(-a\,\upsilon)\, \upsilon^n \exp\left(-(b-a)\,u\right) u^r\,, \tag{21}$$

y se obtiene

$$\exp(-b\,x)\, J_{r,n}(b, a, x) = \int_{\zeta_a \infty}^{x} du \int_{\zeta_a \infty}^{u} d\upsilon\, g(u, \upsilon)$$

$$= \int_{\zeta_a \infty}^{x} d\upsilon \int_{\upsilon}^{x} du\, g(u, \upsilon)\,, \tag{22}$$

donde la última igualdad surge de intercambiar el orden de integración. Para que la integración sobre u, al lado derecho de la primera igualdad (22), esté bien definida, es necesario exigir que los signos de los parámetros a y b sean tales que $\zeta_{b-a} = \zeta_a$. La integral sobre u, a la derecha de la última igualdad (22), se realiza de manera inmediata combinando (1) y (4), para originar la relación

$$\int_{\upsilon}^{x} u^r \exp\left(-(b-a)\,u\right) du = -\exp\left(-(b-a)\,x\right) K_r(b-a, x) + \exp\left(-(b-a)\,\upsilon\right) K_r(b-a, \upsilon)$$

La demostración de (20) termina utilizando la definición (2), aplicada ahora a la función $J_{n,r}(b, b-a, x)$.

Si $n \geq 0$, $K_n(a, x)$ es el polinomio (5a), y por lo tanto

$$J_{r,n}(b, a, x) = \frac{n!}{a^{n+1}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{m!}\, a^m\, K_{r+m}(b, x), \quad n \geq 0, \tag{23}$$

para cualquier entero r, positivo o negativo.

Si $n \leq -1$, hacemos en (2) el cambio $n \rightarrow -n$ y sustituimos (6a) en la expresión resultante, para obtener

$$J_{r,-n}(b, a, x) = \frac{(-a)^{n-1-r}}{(n-1)!} \times$$

$$\left[\sum_{m=1}^{n-1} \frac{(n-1-m)!}{(-a)^{n-m-r}} \mathrm{K}_{-(n-m-r)}(b,x) \right. \tag{24}$$

$$\left. + (-a)^r \exp(b\,x)\, \mathrm{Fi}_r(b,a,x) \right], \quad n \geq 1$$

donde introdujimos la función auxiliar

$$\mathrm{Fi}_r(b,a,x) := \int_{\zeta_a \infty}^{x} du\, u^r \exp\left(-(b-a)\,u\right) \mathrm{Ei}\left(-a\,u\right), \tag{25}$$

$$r \text{ entero}, \quad \zeta_{b-a} = \zeta_b = \zeta_a .$$

Al sustituir al lado izquierdo de la ecuación (2) las relaciones de recurrencia (18) y (19) se obtienen fórmulas que relacionan diferentes funciones $\mathrm{J}_{r,n}(b,a,x)$:

$$\mathrm{J}_{r,n}(b,a,x) - \frac{n}{a} \mathrm{J}_{r,n-1}(b,a,x) = \frac{1}{a} \mathrm{K}_{r+n}(b,x), \quad n \geq 1, \tag{26a}$$

$$\mathrm{J}_{r,n}(b,a,x) - \frac{a}{n+1} \mathrm{J}_{r,n+1}(b,a,x) = -\frac{1}{n+1} \mathrm{K}_{r+n+1}(b,x), \quad n \leq -2. \tag{26b}$$

6. Determinación de las funciones $\mathrm{Fi}_r(b,a,x)$

En el caso de $r = 0$, la definición (25) conduce al resultado

$$\mathrm{Fi}_0(b,a,x) = \frac{1}{b-a}\left[\mathrm{Ei}\left(-b\,x\right) - \exp\left(-(b-a)\,x\right) \mathrm{Ei}\left(-a\,x\right)\right], \quad b \neq a \tag{27}$$

donde, para garantizar consistencia entre la definición (25) de la función $\mathrm{Fi}_r(b,a,x)$ y las relaciones de recurrencia que se deducen posteriormente, con relación al resultado que proporciona *Mathematica* y a la fórmula 5.231.2 de (Gradshteyn y Ryzhik 1965, pg. 632), hemos suprimido al lado derecho un sumando $-\ln(b/a)/(b-a)$. Ahora bien, si b=a, por aplicación de la regla de L'Hospital obtenemos

$$\mathrm{Fi}_0(a,a,x) = \int_{\zeta_a \infty}^{x} dx\, \mathrm{Ei}\left(-a\,x\right) = x\, \mathrm{Ei}\left(-a\,x\right) + \frac{1}{a}\exp\left(-a\,x\right), \tag{28}$$

resultado que coincide con la fórmula 6.221 de (Gradshteyn y Ryzhik 1965, pg. 640), excepto por la elección del límite inferior de integración.

En el caso de $r \geq 1$ hacemos directamente en (25) una integración por partes. Si $r \leq -1$, hacemos de manera provisional en (25) el cambio $r \to -r$, efectuamos una integración por partes y finalmente reconstruimos el r original mediante la substitución $r \to -r$. De esta manera, para todo entero r, positivo o negativo, obtenemos

$$\mathrm{Fi}_r(b,a,x) = \mathrm{Gi}_r(b,a,x) - \exp\left(-(b-a)\,x\right) \mathrm{K}_r(b-a,x)\, \mathrm{Ei}\left(-a\,x\right), \tag{29}$$

donde definimos la cantidad auxiliar (r entero, positivo o negativo)

$$\mathrm{Gi}_r(b,a,x) := \int_{\zeta_a \infty}^{x} \frac{1}{u} \mathrm{K}_r(b-a,u) \exp\left(-b\,u\right) du . \tag{30}$$

En particular,

$$\mathrm{Gi}_0(b,a,x) = -\frac{1}{b-a}\exp\left(-b\,x\right) \mathrm{K}_{-1}(b,x) = \frac{1}{b-a}\mathrm{Ei}\left(-b\,x\right), \quad b \neq \mathrm{a}. \tag{31}$$

7. Evaluación de las funciones $\mathrm{Gi}_r(b,a,x)$

Si $r \geq 0$, entonces $\mathrm{K}_r(b-a,x)$ es un polinomio que se deduce de (5a) por la sustitución $a \to b-a$. Al reemplazar $\mathrm{K}_r(b-a,x)$ en (29) se consigue la expresión

$$\mathrm{Gi}_r(b,a,x) = -\exp\left(-b\,x\right) \frac{r!}{(b-a)^{r+1}} \times \sum_{m=0}^{r} \frac{1}{m!}(b-a)^m \mathrm{K}_{m-1}(b,x). \tag{32}$$

Por otro lado, si usamos (18) y la definición (30), deducimos la relación de recurrencia

$$\mathrm{Gi}_r(b,a,x) = -\frac{1}{b-a}\exp(-b\,x)\,\mathrm{K}_{r-1}(b,x) + \frac{r}{b-a}\,\mathrm{Gi}_{r-1}(b,a,x), \quad r \geq 1, \tag{33}$$

que se inicia con

$$\mathrm{Gi}_0(b,a,x) = \frac{1}{b-a}\,\mathrm{Ei}(-b\,x). \tag{34}$$

En el caso de $r \leq -2$, sustituimos la relación (19a) en (30). De esta manera se obtiene la relación de recurrencia

$$\mathrm{Gi}_r(b,a,x) = \frac{1}{r+1}\left[\exp(-b\,x)\,\mathrm{K}_r(b,x) + (b-a)\,\mathrm{Gi}_{r+1}(b,a,x)\right], \quad r \leq -2, \tag{35}$$

que se inicia evaluando la función

$$\mathrm{Gi}_{-1}(b,a,x) := \int_{\zeta_a\infty}^{x} \frac{1}{u}\,\mathrm{K}_{-1}(b-a,u)\exp(-b\,u)\,du = -\int_{\zeta_a\infty}^{x} \frac{1}{u}\exp(-a\,u)\,\mathrm{Ei}(-(b-a)\,u)\,du. \tag{36}$$

Esta integral se estudiará en mayor detalle en la sección 9.

8. Relación de recurrencia para $\mathrm{Fi}_r(b,a,x)$

Se combinan (29), (18a) y (33), al igual que (29), (19a) y (35). Por lo tanto, ara $r \geq 1$ se cumple

$$\mathrm{Fi}_r(b,a,x) = -\frac{1}{b-a}\exp(-b\,x)\times\left[\exp(a\,x)\,x^r\,\mathrm{Ei}(-a\,x) + \mathrm{K}_{r-1}(b,x)\right] + \frac{r}{b-a}\,\mathrm{Fi}_{r-1}(b,a,x), \quad r \geq 1, \tag{37}$$

la cual se inicia con $\mathrm{Fi}_0(b,a,x)$, dada por (27). Para $r \leq -2$, se encuentra

$$\mathrm{Fi}_r(b,a,x) = \exp(-b\,x)\,\frac{1}{r+1}\times\left[\exp(a\,x)\,x^{r+1}\,\mathrm{Ei}(-a\,x) + \mathrm{K}_r(b,x)\right] + \frac{b-a}{r+1}\,\mathrm{Fi}_{r+1}(b,a,x), \quad r \leq -2, \tag{38}$$

la cual se inicia con (ver 25)

$$\mathrm{Fi}_{-1}(b,a,x) = \int_{\zeta_a\infty}^{x} \frac{1}{u}\exp(-(b-a)\,u)\,\mathrm{Ei}(-a\,u)\,du. \tag{39}$$

9. Otras relaciones útiles

De (17a) y (25), con $r = -1$ y $a \to b-a$, obtenemos

$$\mathrm{Fi}_{-1}(b,b-a,x) = -\mathrm{Gi}_{-1}(b,a,x). \tag{40}$$

Similarmente, con ayuda de la identidad que resulta de calcular la derivada con respecto a x del producto de las funciones $\mathrm{Ei}(-(b-a)\,x)\,\mathrm{Ei}(-a\,x)$, se encuentra la siguiente identidad útil para control numérico:

$$\mathrm{Fi}_{-1}(b,a,x) + \mathrm{Fi}_{-1}(b,b-a,x) = \mathrm{Ei}(-(b-a)\,x)\,\mathrm{Ei}(-a\,x). \tag{41}$$

En virtud de las relaciones (40) y (41) la cantidad fundamental que se debe determinar es la integral $\mathrm{Fi}_{-1}(b,a,x)$, definida en (39), la cual se puede realizar numéricamente.

En este punto es de anotar la relación

$$\mathrm{Fi}_{-1}(b,a,x) = \mathrm{Ei}(-(b-a)\,x)\,\mathrm{Ei}(-a\,x) + \mathrm{L}(b,a,x), \tag{42}$$

donde definimos la función auxiliar

$$\mathrm{L}(b,a,x) := \int_{b-a}^{\zeta_{b-a}\infty} \frac{1}{u}\,\mathrm{Ei}(-(u+a)\,x)\,du, \tag{43}$$

que requiere también evaluación numérica. Para demostrar (42) se parte de la ecuación (27) sustituyendo $\mathrm{Fi}_0(b,a,x)$ por la integral (25), con $r = 0$. A lado y lado de la expresión resultante integramos con respecto a $\beta := b-a$ entre los límites inferior y superior β y $\zeta_\beta\infty$, respectivamente. Al tener en cuenta la representación de la función integral exponencial $\mathrm{Ei}(-\beta\,x)$ (ver 16) se obtiene el resultado deseado, (42).

Por comparación de las ecuaciones (41) y (42), al emplear (40), se deduce la igualdad

$$\mathrm{L}(b, a, x) = \mathrm{Gi}_{-1}(b, a, x). \tag{44}$$

Por evaluación numérica de $\mathrm{Fi}_{-1}(b, a, x)$, $\mathrm{Gi}_{-1}(b, a, x)$ y de $\mathrm{L}(b, a, x)$ se verificó la validez de las ecuaciones (42) y (44). La integración numérica se realizó empleado el programa *Mathematica* (Wolfram 1991).

Un desarrollo en series de la función $\mathrm{Gi}_{-1}(b, a, x)$ se deduce combinando la definición (36) con la expresión

$$\begin{aligned}\mathrm{Ei}\left(-(b-a)\,u\right) &= \gamma + \ln\left(\zeta_{b-a}\,(b-a)\,\zeta_u\,u\right)\\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\,k!}\left(-(b-a)\,u\right)^k,\end{aligned} \tag{45}$$

que se obtiene por combinación de las ecuaciones (9) y (13). Por lo tanto, al tener en cuenta (17b) y hacer un cambio de índice de suma, se puede escribir

$$\begin{aligned}&\mathrm{Gi}_{-1}(b, a, x) =\\ &-\left(\gamma + \ln\left(\zeta_{b-a}\,(b-a)\right)\right)\mathrm{Ei}\left(-a\,x\right) + \mathrm{M}(a, x)\\ &+ \exp(-a\,x)\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-(b-a)\right)^{n+1}}{(n+1)^2}\,\frac{1}{n!}\,\mathrm{K}_n(a, x),\end{aligned} \tag{46}$$

donde definimos

$$\mathrm{M}(a, x) := -\int_{\zeta_a\infty}^{x} \frac{1}{u}\exp(-a\,u)\ln\left(\zeta_u\,u\right) du. \tag{47}$$

Al emplear (5a) en (46) e intercambiar el orden de las sumas, empleando la identidad

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{n} \mathrm{A}(n, m) = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{A}(n+m, m),$$

se puede reorganizar la expresión y obtener

$$\begin{aligned}&\mathrm{Gi}_{-1}(b, a, x) =\\ &-\left(\gamma + \ln\left(\zeta_{b-a}\,(b-a)\right)\right)\mathrm{Ei}\left(-a\,x\right) + \mathrm{M}(a, x)\\ &+ \exp(-a\,x)\sum_{m=0}^{\infty} \mathrm{A}_m\left(\frac{b-a}{a}\right)(a\,x)^m,\end{aligned} \tag{48}$$

donde los coeficientes que intervienen en la última suma se definen por la expresión

$$\mathrm{A}_m(\alpha) := \frac{1}{m!}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+m+1)^2}\left(-\alpha\right)^{n+m+1}. \tag{49}$$

La evaluación numérica directa de la función $\mathrm{Gi}_{-1}(b, a, x)$ es más eficiente que el empleo de la relación (48).

10. Conclusión

Las integrales (1) y (2) intervienen en la evaluación de elementos matriciales en problemas de estructura atómica. Hemos deducido expresiones analíticas y de recurrencia que permiten determinar las funciones $\mathrm{K}_n(a,x)$ y $\mathrm{J}_{r,n}(b,a,x)$. La función $\mathrm{Gi}_{-1}(b, a, x)$ admite el desarrollo en series de potencias dado por la ecuación (48), pero es preferible que se calcule numéricamente.

Apéndice A

La función gamma incompleta y su complemento

La función gamma incompleta $\Gamma(\alpha, x)$ y su complemento $\gamma(\alpha, x)$ se definen por las relaciones (Gradshteyn y Ryzhik 1965, fórmula 8.350, pg. 940; Lebedew 1973)

$$\Gamma(\alpha, x) := \int_x^{\infty} t^{\alpha-1}\exp(-t)\,dt, \quad \mathrm{Re}\,\alpha > 0, \tag{A1}$$

$$\gamma(\alpha, x) := \int_0^{x} t^{\alpha-1}\exp(-t)\,dt, \quad \mathrm{Re}\,\alpha > 0, \tag{A2}$$

las cuales están conectadas con la función gamma de Euler, $\Gamma(\alpha)$, como sigue:

$$\begin{aligned}\gamma(\alpha, x) + \Gamma(\alpha, x) &= \Gamma(\alpha)\\ &:= \int_0^{\infty} t^{\alpha-1}\exp(-t)\,dt, \quad \mathrm{Re}\,\alpha > 0,\end{aligned} \tag{A3}$$

$$\gamma(\alpha, \infty) = \Gamma(\alpha, 0) = \Gamma(\alpha). \tag{A4}$$

En particular, se cumple la relación

$$\Gamma(0, x) = -\mathrm{Ei}\left(-x\right). \tag{A5}$$

Apéndice B

Algunas funciones $K_n(1, y)$

$$K_0(1, y) = 1 ,$$

$$K_1(1, y) = 1 + y ,$$

$$K_2(1, y) = 2 + 2\,y + y^2 ,$$

$$K_3(1, y) = 6 + 6\,y + 3\,y^2 + y^3 ,$$

$$K_4(1, y) = 24 + 24\,y + 12\,y^2 + 4\,y^3 + y^4 ,$$

$$K_{-1}(1, y) = -\exp y \,\mathrm{Ei}\,(-y) ,$$

$$K_{-2}(1, y) = \frac{1}{y} + \exp y \,\mathrm{Ei}\,(-y) ,$$

$$K_{-3}(1, y) = \frac{1}{2\,y^2} - \frac{1}{2\,y} - \frac{1}{2} \exp y \,\mathrm{Ei}\,(-y) ,$$

$$K_{-4}(1, y) = \frac{1}{3\,y^3} - \frac{1}{6\,y^2} + \frac{1}{6\,y} + \frac{1}{6} \exp y \,\mathrm{Ei}\,(-y) .$$

Bibliografía

Abramowitz, M. & I.A. Stegun. 1964. Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover.

Brandsden, B.H. & C.J. Joachain. 1983. Physics of Atoms and Molecules. London: Longman.

Bronstein, I. & K. Semendajew. 1972. Taschendbuch der Mathematik. Frankfurt/Main: Verlag Harri Deutsch.

Gradshteyn, I.S. & I.M. Ryzhik. 1965. Table of Integrals, Series, and Products. New York: Academic Press.

Lebedew, N.N. 1973. Spezielle Funktionen und ihre Anwendung. Wien: Wissenschaftsverlag Bibligraphisces Institut.

Magnus, W., F. Oberhettinger, & R.P. Soni. 1966. Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics. New York: Springer.

Wolfram, S. 1991. Mathematica: A System for Doing Mathematics by Computer. Redwood City: Addison-Wesley.