

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PERUGIA
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI
CORSO DI LAUREA IN CHIMICA

Tesi di laurea

COORDINATE ELLITTICHE
PER SISTEMI TRIATOMICI

LAUREANDO

RELATORE

Stefano Tonzani

Prof. Vincenzo Aquilanti

ANNO ACCADEMICO 2000-2001

Indice

Introduzione	4
1 Operatori ed alberi	9
1.1 Introduzione	9
1.2 Sfera S_2	11
1.2.1 Coordinate sferiche	11
1.2.2 Coordinate coniche	12
1.3 Sfera S_3	15
1.4 Definizione delle coordinate	19
1.4.1 Coordinate sferiche	19
1.4.2 Coordinate cilindriche	20
1.4.3 Coordinate sferoellittiche	21
1.5 Coordinate ellittiche cilindriche I	22
1.6 Coordinate ellittiche cilindriche II	23
1.7 Coordinate ellissoidali	24
1.8 Limiti degli operatori	26
1.8.1 Limiti delle coordinate ellissoidali	26
1.9 Riduzione in sottogruppi	27
2 Il metodo ipersferico	33
2.1 Generalita'	33

2.2	Coordinate ipersferiche	36
2.3	Separazione dell' iperraggio	38
2.4	Problemi legati alle parametrizzazioni angolari	41
3	Tre corpi nel piano	45
3.1	Parametrizzazioni	47
3.1.1	Coordinate asimmetriche	49
3.1.2	Coordinate simmetriche	50
3.1.3	Coordinate coniche	50
3.1.4	Connessione tra le basi	52
4	Tre corpi nello spazio	55
4.1	$J = 0$	55
4.1.1	Coordinate asimmetriche	56
4.1.2	Coordinate simmetriche	56
4.1.3	Connessione tra le basi	57
4.1.4	Coordinate ellittiche cilindriche	57
4.2	$J > 0$	57
4.2.1	Partizione dell' Hamiltoniano	57
4.2.2	Distanze	61
4.2.3	Antisimmetrizzazione delle autofunzioni	62
4.3	Altre applicazioni delle coordinate di tipo ellittico	63
4.3.1	Notazioni	66
5	Equazione di Lamé'	69
5.1	Introduzione	69
5.2	Separazione delle variabili sulla sfera S_2	69
5.3	Separazione delle variabili su S_3	71
5.4	Equazione di Lamé': soluzioni	75

	3
5.4.1 Equazione di Lamé' associata	76
5.5 Relazioni di ricorrenza per le coordinate ellissoidali	78
Conclusioni	82
Bibliografia	85

Introduzione

Il problema coulombiano a tre corpi e' fondamentale in meccanica quantistica sia nelle problematiche di stato legato che in quelle relative allo scattering perche' e' il tipo di problema piu' semplice che non puo' essere risolto con tecniche analitiche e quindi consente di sviluppare e verificare nuove metodologie da applicare in seguito a problemi piu' complessi. In questa tesi svilupperemo il nostro lavoro essenzialmente nel quadro dello studio dei processi dinamici, quindi delle reazioni chimiche del tipo atomo + molecola biatomica (A+BC), anche se le metodologie qui proposte presentano applicabilita' anche nei problemi di stato legato, per esempio in connessione con i set di base sturmiani (vedi [55] [44]). Il lavoro di questa tesi e' incentrato sullo studio di coordinate alternative per parametrizzare l'equazione di Schrödinger, coordinate che abbiano proprieta' migliori rispetto a quelle correntemente utilizzate. Si dimostrera' nel seguito come trovare delle coordinate "adatte" per il tipo di problema che stiamo trattando sia cruciale, perche' questo consente di ridurre i tempi di calcolo. In questo quadro piuttosto complesso prendiamo in esame i vari sistemi di coordinate separabili, oltre alle consuete coordinate polari, e ci inoltriamo nell'esame dei set di tipo ellittico che, come faremo vedere, avendo un parametro libero (k^2) in piu' nella loro espressione analitica, consentono maggiore flessibilita' ed adattabilita' al problema fisico in questione, pur al prezzo di una relativa maggiore complessita' nel trattamento analitico. C' e' comunque ancora molto da fare in questo campo, poiche' i tipi di coordinate che qui presentiamo (ed i relativi set di base che emergono dal-

la soluzione dell' equazione di Laplace) sono stati ancora molto poco sfruttati. Si registra pero' negli ultimi anni una grande attenzione da parte della comunita' scientifica internazionale ai temi delle coordinate ellittiche e delle equazioni differenziali che le caratterizzano (cioe' l' equazione di Lamé e le altre ad essa relate) e proprio negli anni piu' recenti e' uscito un notevole numero di lavori molto interessanti su questi argomenti ([1],[4],[42]) da parte di studiosi di fama internazionale ed e' stato per noi molto proficuo il confronto con alcuni di questi gruppi di ricerca, che ci ha arricchito di nuove idee ed esperienze. Tutto questo testimonia come attorno al lavoro esposto in questa tesi ci sia grande attenzione e come la tematica da noi scelta sia molto innovativa e, anche se piuttosto complessa nella comprensione di molti dei suoi aspetti, presenti notevoli prospettive future. Poiche' in questa tesi e' stato svolto il fondamentale lavoro teorico che deve stare a monte, ora si dovranno misurare le effettive possibilita' di questi nuovi strumenti applicandoli a sistemi concreti, e questo sara' chiaramente il prossimo passo da compiere. La struttura di questa tesi e' stata pensata in modo da offrire al lettore nel primo capitolo gli strumenti matematici indispensabili alla comprensione del problema della separazione delle variabili, ed individueremo la connessione dei vari set di coordinate con la riduzione in sottogruppi del gruppo continuo $O(4)$ e le relazioni che intercorrono tra questi set. Nel secondo capitolo si sviluppa una trattazione generale del metodo ipersferico per il problema a tre corpi; e' infatti nell' ambito di questo metodo, molto utilizzato in generale in questo tipo di problematiche perche' offre soluzioni molto buone per quanto riguarda il calcolo, che si inquadra il nostro lavoro di ricerca. Nel terzo e quarto capitolo si espone la parte che piu' riguarda la fisica del problema, andando ad esplorare i vari aspetti del problema a tre corpi sia nel piano che nello spazio. Nell' ultimo capitolo si passano poi ad esaminare concretamente le equazioni che emergono dalla separazione dell' equazione di Laplace in coordinate di tipo ellittico e si studiano in particolare le relazioni che esistono tra le varie equazioni differenzia-

li (e quindi tra i vari set di coordinate) nello spazio euclideo tridimensionale e sulla sfera a quattro dimensioni e si fa vedere come queste relazioni conducano a delle importanti analogie fra set di coordinate definiti su manifold differenti, che potranno essere sfruttate poi per applicare le coordinate di tipo ellittico ad una classe di problemi piu' ampia che puo' essere trattata in modo migliore con l' utilizzo di questo tipo di coordinate. Nell' ultima parte del capitolo si prende in considerazione piu' in dettaglio la risoluzione di queste equazioni differenziali e si mostra come i set di base di tipo ellittico possano essere calcolati in maniera semplice ed efficace.

Capitolo 1

Operatori ed alberi

1.1 Introduzione

La separazione delle variabili nelle equazioni differenziali a derivate parziali e' uno strumento fondamentale per la loro risoluzione analitica. In questo capitolo verranno illustrati gli insiemi di coordinate separabili per l' equazione di Laplace:

$$\hat{\Lambda}^2\psi = 0 \tag{1.1}$$

Questa equazione emerge in fisica in un numero estremamente grande di problemi, ed in particolare verra' fuori nel nostro caso, per il problema a tre corpi, nella soluzione della parte iperangolare dell' equazione di Shrödinger e, come faremo vedere nel seguito (vedi capitolo 4) e' fondamentale utilizzare un insieme di coordinate che si adattino al meglio al problema che si sta esaminando per avere una maggiore efficienza nel calcolo delle osservabili di scattering (sezioni d' urto), che e' lo scopo fondamentale della dinamica molecolare. In particolare tratteremo la separazione delle variabili sulle sfere S_2 (sfera ordinaria tridimensionale) ed S_3 (sfera tetradimensionale) perche' su queste varieta' rispettivamente bidimensionale e tridimensionale sara' definita l' equazione di Laplace per i tre corpi nel piano (S_2) e nello spazio (S_3). Le coordinate separabili in un certo spazio, o, per meglio

dire, in un manifold (varietà) di un gruppo omogeneo di Lie [47], sono in corrispondenza biunivoca con un insieme completo di operatori commutativi dati da combinazioni lineari dei generatori del gruppo [46]. Questi set completi sono detti formalmente “orbite”. In questo capitolo ci proponiamo di osservare le relazioni che intercorrono tra i vari set di coordinate con particolare riferimento alle sfere unitarie S_2 ed S_3 e di analizzarne le proprietà. In questa trattazione sfrutteremo intensivamente il metodo degli alberi [58],[6],[59], molto utile per illustrare graficamente la connessione tra coordinate cartesiane su uno spazio a d dimensioni e la corrispondente parametrizzazione ipersferica (una variabile iperradiale e $d - 1$ iperangoli). Ogni set di coordinate che individua un albero è un set di coordinate ortogonali (cioè non ci sono termini di derivata mista nell’equazione di Laplace, vedi capitolo 2). In questo tipo di schemi le coordinate cartesiane corrispondono alle d “foglie” dell’albero, mentre gli $d - 1$ nodi fra i rami sono occupati dagli iperangoli. Per convenzione si considera il nodo convergente da sinistra (destra) come il coseno (seno) dell’iperangolo associato al nodo. Partendo da una foglia e scendendo verso la radice dell’albero è possibile stabilire una connessione fra le coordinate cartesiane e gli iperangoli. Attraverso il metodo degli alberi e l’algebra dei momenti angolari generalizzati possono essere individuati agevolmente i coefficienti di connessione tra le varie basi che caratterizzano un manifold (si veda ad esempio [24]). In questo capitolo tratteremo in particolare le basi non standard (cioè di tipo ellittico) e le loro relazioni con i set di base standard (di tipo sferico o cilindrico). La trattazione presentata in questo capitolo si fonda sui lavori dei matematici Kalnins, Miller e Winternitz citati nella bibliografia, che hanno iniziato negli anni ’70 lo studio delle coordinate non standard e della separazione delle variabili sulle ipersfere e sugli spazi euclidei n -dimensionali.

1.2 Sfera S_2

Questo manifold e' descritto dal gruppo $O(3)$, il gruppo delle rotazioni fisiche in tre dimensioni (o, se si preferisce, il gruppo i cui elementi sono le matrici ortogonali di rango 3), i cui generatori sono gli operatori:

$$l_{w_1}, l_{w_2}, l_{w_3} \quad (1.2)$$

che sono poi gli operatori di momento angolare rispetto alle tre coordinate w_1, w_2, w_3 . Questi soddisfano le regole di commutazione

$$[l_i, l_k] = ie_{ikl}l_l \quad (1.3)$$

dove e_{ikl} e' il tensore antisimmetrico di rango 3, cioe' una matrice tridimensionale $3 \times 3 \times 3$ i cui elementi fuori diagonale sono tutti nulli mentre quelli sulla diagonale sono ± 1 in modo che per lo scambio degli indici i, k, l il tensore vada in meno se stesso. L' operatore di Casimir, che corrisponde all' operatore di Laplace su una sfera n -dimensionale, corrisponde ad l^2 .

Sulla sfera S_2 la situazione e' abbastanza semplice, a causa del fatto che esistono soltanto due sistemi di coordinate separabili: le coordinate coniche e le tradizionali coordinate sferiche (o polari), queste ultime ottenute per valori limite del parametro k^2 che caratterizza le coordinate coniche.

1.2.1 Coordinate sferiche

Le coordinate sferiche possono essere parametrizzate alternativamente come :

$$\begin{aligned} w_1 &= \sin 2\chi \cos \theta = \cos 2\Theta \sin 2\Phi \\ w_2 &= \sin 2\chi \sin \theta = \sin 2\Theta \\ w_3 &= \cos 2\chi = \cos 2\Theta \cos 2\Phi \end{aligned} \quad (1.4)$$

Nel primo caso la parametrizzazione e' detta simmetrica, nel secondo caso asimmetrica. Una discussione piu' dettagliata su questi due tipi di parametrizzazione

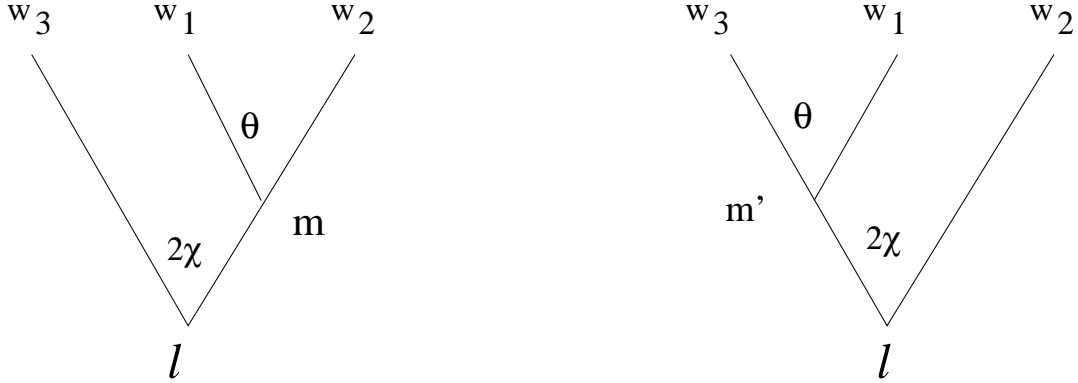


Figura 1.1: Alberi associati alle due parametrizzazioni sferiche di S_2 , rispettivamente asimmetrica (a sinistra) e simmetrica (a destra)

verrà condotta nel capitolo sul problema a tre corpi nel piano (capitolo 3). Queste coordinate corrispondono ai due operatori commutativi:

$$l^2, l_z \quad (1.5)$$

nel caso che l'asse polare sia w_3 (nel caso della prima parametrizzazione in eq. 1.4), oppure

$$l^2, l_y \quad (1.6)$$

nel caso che l'asse di quantizzazione sia invece w_2 (seconda parametrizzazione in eq. 1.4). Ovviamente l^2 corrisponde al quadrato dell'operatore di momento angolare, mentre l_z ed l_y sono le sue proiezioni sugli assi, rispettivamente, z ed y .

1.2.2 Coordinate coniche

Le parametrizzazioni possibili per questo tipo di coordinate sono molteplici (rimandiamo ai testi generali [21], [31]), qui citeremo solamente le due indispensabili per la nostra trattazione.

$$w_1 = \operatorname{sn} \alpha \operatorname{dn} \beta = \cos \psi \sqrt{1 - k'^2 \cos^2 \omega}$$

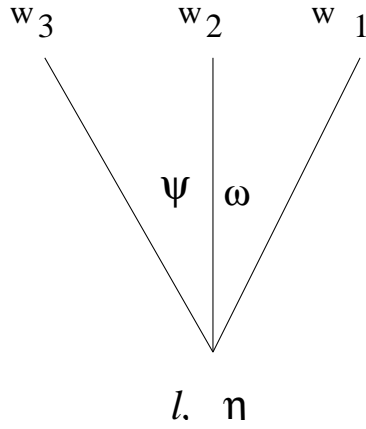


Figura 1.2: Forcella ternaria associata alle coordinate coniche su S_2

$$w_2 = \operatorname{cn}\alpha \operatorname{cn}\beta = \sin \psi \sin \omega \quad (1.7)$$

$$w_3 = \operatorname{dn}\alpha \operatorname{sn}\beta = \cos \omega \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \psi}$$

Queste coordinate individuano i due operatori commutativi:

$$l^2, \eta \quad (1.8)$$

dove

$$\eta = l_y^2 + k^2 l_x^2 \quad (1.9)$$

$$0 \leq k^2 \leq 1 \quad (1.10)$$

$$k^2 + k'^2 = 1 \quad (1.11)$$

Gli argomenti delle funzioni ellittiche di Jacobi sn , cn , dn sono esprimibili in funzione degli integrali ellittici:

$$\alpha = \int_0^\psi \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} \quad (1.12)$$

$$\beta = \int_0^\omega \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k'^2 \sin^2 \theta}} \quad (1.13)$$

mentre i loro intervalli di definizione sono dati da:

$$\begin{aligned} -K &\leq \alpha \leq K \\ -2K' &\leq \beta \leq 2K' \end{aligned} \tag{1.14}$$

dove

$$K = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} \tag{1.15}$$

$$K' = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k'^2 \sin^2 \theta}} \tag{1.16}$$

Le due parametrizzazioni date sono equivalenti ma la seconda ha due vantaggi fondamentali: evita l'uso delle funzioni ellittiche di Jacobi, poco sfruttabili computazionalmente, ed inoltre e' espressa in funzione di variabili il cui intervallo di definizione e' indipendente dal parametro k^2 , infatti i loro intervalli di definizione sono:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \psi \leq \pi \\ 0 &\leq \omega \leq 2\pi \end{aligned} \tag{1.17}$$

che, come si vede non dipendono da k , mentre le funzioni ellittiche di Jacobi ne dipendono, essendo doppiamente periodiche nei due periodi reale $(-K, K)$ ed immaginario $(-iK', iK')$. Per maggiori dettagli riguardo alle funzioni ellittiche di Jacobi si rimanda ai testi generali [30], [46] e [27]. Le situazioni che si verificano al limite dell'intervallo di definizione del parametro k^2 sono descritte in [9] e possono essere visualizzate andando a calcolare il limite dell'operatore η :

$$\begin{aligned} \lim_{k^2 \rightarrow 0} \eta &= l_y \\ \lim_{k^2 \rightarrow 1} \eta &= l_z \end{aligned} \tag{1.18}$$

Come si vede l'asse di quantizzazione nel primo caso diventa w_2 , mentre nel secondo w_3 . Queste trasformazioni non corrispondono a rotazioni, visto che conservano la parita', mentre le rotazioni non la conservano, ma e' comunque possibile

visualizzarle attraverso uno schema come quello in figura 3.1.4, che non coincide ne' con una rotazione ne' con una riflessione attorno a qualche asse particolare.

Va sottolineato come le due variabili (α, β) abbiano due ruoli completamente simmetrici sia nella definizione delle coordinate che nell' espressione analitica delle autofunzioni (queste ultime sono infatti il prodotto di due polinomi di Lamé' identici nelle due variabili ellittiche). Dunque il raddoppio dell' intervallo di definizione di una delle due invece dell' altra e' completamente arbitrario. A questo punto e' chiaro come per parametrizzare la semisfera, che non richiede il raddoppio di uno degli angoli, non saremo costretti a ricorrere a questo artificio, e quindi le operazioni di limite si possono fare senza alcun problema per entrambi i valori estremi di k , mentre sulla sfera intera, pur essendo gli operatori gli stessi, si verificano dei problemi nella definizione degli alberi relativi ai set di base che emergono come limiti delle coordinate coniche. Infatti si avra' in un caso un albero di tipo consueto, in cui l' angolo alla base varia da 0 a π , mentre quello sulla forcina binaria con entrambi i nodi aperti ha un range doppio; nel secondo caso la situazione risultera' invertita: il manifold descritto dal set di coordinate risulta sempre chiaramente l' intera sfera S_2 , ma si deve usare una certa cautela con riferimento al fatto che i range degli angoli sono scambiati.

1.3 Sfera S_3

Molto piu' complicata e' la situazione sulla sfera tetradimensionale. In questo caso il gruppo di Lie che caratterizza questa varieta' e' $O(4)$ e ci sono non due ma sei sistemi di coordinate separabili [25]. I generatori del gruppo $O(4)$ sono

$$\begin{aligned} l_{w_1}, l_{w_2}, l_{w_3} \\ K_{w_1}, K_{w_2}, K_{w_3} \end{aligned} \tag{1.19}$$

e soddisfano le regole di commutazione:

$$\begin{aligned}
 [l_i, l_k] &= ie_{ikl}l_l \\
 [l_i, K_k] &= ie_{ikl}K_l \\
 [K_i, K_k] &= ie_{ikl}l_l
 \end{aligned}
 \tag{1.20}$$

che definiscono l' algebra di Lie $o(4)$ del gruppo $O(4)$. Gli operatori l_{w_i} rappresentano chiaramente operatori di momento angolare. Il senso fisico degli operatori K_{w_i} puo' essere spiegato meglio in un contesto particolare come quello dei problemi di stato legato. In questo caso e' possibile relazionare l' operatore K con il vettore di Runge-Lenz A definito come:

$$\vec{A} = (\vec{l} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{l} + \frac{\vec{r}}{r})
 \tag{1.21}$$

mentre K e' relazionato a questo da

$$K = \frac{A}{2p_0}
 \tag{1.22}$$

nell' espressione di questo operatore la divisione per

$$2p_0 = \sqrt{-2E}
 \tag{1.23}$$

in cui E rappresenta l' energia di uno stato legato e' necessaria per preservare le regole di commutazione che definiscono l' algebra di Lie del gruppo $O(4)$. Si ha anche un' altra relazione molto importante da questa analogia, cioe'

$$\vec{l} \cdot \vec{A} = 0
 \tag{1.24}$$

che mostra come i due vettori (e quindi anche l e K) siano ortogonali.

L' operatore di Casimir puo' essere scritto come:

$$C = l^2 + K^2
 \tag{1.25}$$

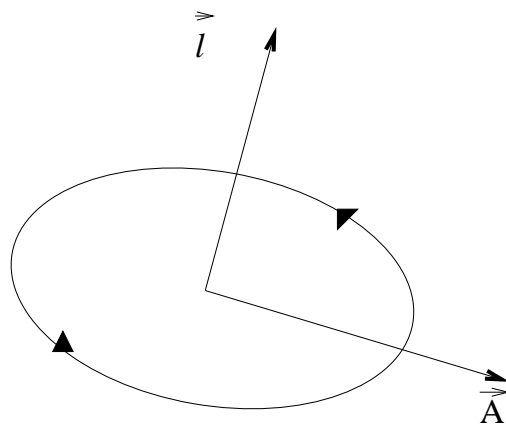


Figura 1.3: Traiettoria classica dell' elettrone (ellisse di Keplero). il momento angolare l e' ovviamente ortogonale all' orbita, mentre il vettore di Runge-Lenz A e' nel piano dell' orbita e proporzionale all' eccentricita' della stessa.

e rappresenta l' operatore del momento iperangolare [24]. Le coordinate separabili

su questo manifold possono essere schematizzate come segue

<i>Coordinate</i>	<i>Operatori</i>
<i>Sferiche</i>	l^2
	l_z
<i>Cilindriche</i>	l_z
	K_z
<i>Sferoellittiche</i>	l^2
	$l_x^2 + k'^2 l_y^2$
<i>Ellittiche cilindriche I</i>	$l^2 + \frac{1}{1-k^2} K_z^2$
	l_z^2
<i>Ellittiche cilindriche II</i>	$l^2 + \frac{1}{1-k^2} K_z^2$
	l_z
<i>Ellissoidali</i>	$F_x G_x + (\frac{a-b-1}{1-a-b}) F_y G_y + (\frac{b-a-1}{1-a-b}) F_z G_z$
	$b(1-a)(F_y^2 + G_y^2) + a(1-b)(F_z^2 + G_z^2) +$
	$+2b(1-a)(\frac{b-a-1}{1-a-b}) F_y G_y + 2a(1-b)(\frac{a-b-1}{1-a-b}) F_z G_z$
	(1.26)

Per l' ultimo set di coordinate sono stati introdotti generatori alternativi per $SO(4)$ definiti come:

$$F_j = -\frac{i}{2}(l_j + K_j) \quad (1.27)$$

$$G_j = -\frac{i}{2}(l_j - K_j) \quad (1.28)$$

Questa forma degli operatori in autostato per il set di coordinate ellissoidali puo'

essere utilizzata in virtu' dell' isomorfismo locale

$$O(4) \supset SU(2) \times SU(2) \quad (1.29)$$

e ne rende la forma leggermente piu' compatta.

1.4 Definizione delle coordinate

Per chiarire meglio le proprieta' dei vari set di coordinate ne daremo le espressioni esplicite, le autofunzioni e le riduzioni a catena di sottogruppi di $O(4)$ che le individuano.

1.4.1 Coordinate sferiche

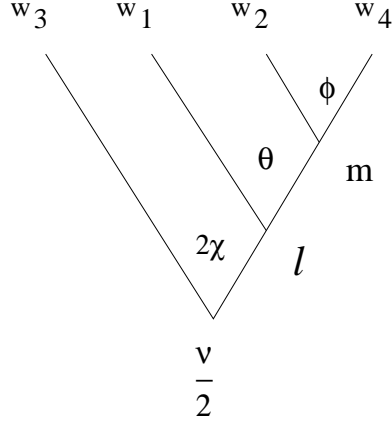
$$\begin{aligned} x &= \sin 2\chi \cos \theta \\ y &= \sin 2\chi \sin \theta \cos \phi \\ z &= \cos 2\chi \\ t &= \sin 2\chi \sin \theta \sin \phi \end{aligned} \quad (1.30)$$

Gli intervalli di definizione delle coordinate sono dati da:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \chi \leq \frac{\pi}{2} \\ 0 &\leq \theta \leq \pi \\ 0 &\leq \phi \leq 2\pi \end{aligned} \quad (1.31)$$

Queste coordinate costituiscono, nel problema a tre corpi la rappresentazione asimmetrica. Le autofunzioni dell' equazione di Laplace espressa in queste coordinate sono date da un polinomio di Gegenbauer per un' armonica sferica:

$$C_{\frac{\lambda}{2}-l}^{l+1}(2\chi)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.32)$$

Figura 1.4: Coordinate sferiche su S_3

1.4.2 Coordinate cilindriche

$$\begin{aligned}
 x &= \cos 2\Theta \sin 2\Phi \\
 y &= \sin 2\Theta \cos \phi \\
 z &= \cos 2\Theta \cos 2\Phi \\
 t &= \sin 2\Theta \sin \phi
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

I range delle variabili sono dati da:

$$\begin{aligned}
 0 &\leq \Theta \leq \frac{\pi}{4} \\
 0 &\leq \Phi \leq \pi \\
 0 &\leq \phi \leq 2\pi
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

Le coordinate cilindriche sono sfruttate nel problema a tre corpi per dare la rappresentazione simmetrica. Le autofunzioni sono in questo caso le funzioni D di Wigner:

$$D_{\frac{\nu}{2} + \frac{\sigma}{4} \quad \frac{m}{2} - \frac{\sigma}{4}}^{\frac{\nu}{4}}(2\Phi, 4\Theta, \phi) = e^{-2i(m + \frac{\sigma}{2})\Phi} d_{\frac{\nu}{2} + \frac{\sigma}{4} \quad \frac{m}{2} - \frac{\sigma}{4}}^{\frac{\nu}{4}}(4\Theta) e^{-i(m - \frac{\sigma}{2})\phi} \tag{1.35}$$

in cui le d sono le funzioni di rotazione ridotte

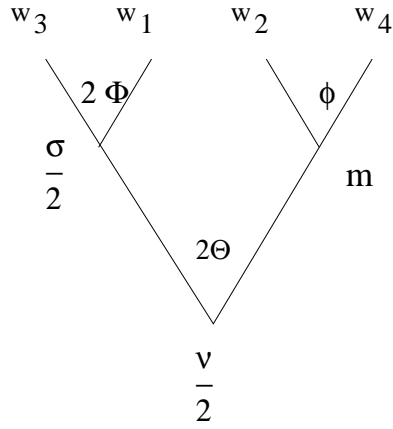


Figura 1.5: Coordinate cilindriche sulla sfera tetradimensionale

1.4.3 Coordinate sferoellittiche

$$\begin{aligned}
 w_1 &= \sin 2\chi \operatorname{dn}(\alpha, k) \operatorname{sn}(\beta, k') \\
 w_2 &= \cos 2\chi \\
 w_3 &= \sin 2\chi \operatorname{sn}(\alpha, k) \operatorname{dn}(\beta, k') \\
 w_4 &= \sin 2\chi \operatorname{cn}(\alpha, k) \operatorname{cn}(\beta, k')
 \end{aligned} \tag{1.36}$$

I limiti delle variabili angolari sono in questo caso:

$$\begin{aligned}
 -K &\leq \alpha \leq K \\
 -2K' &\leq \beta \leq 2K'
 \end{aligned} \tag{1.37}$$

$$0 \leq \chi \leq \frac{\pi}{2} \tag{1.38}$$

Le autofunzioni sono esprimibili come il prodotto di un polinomio di Gegenbauer per due polinomi di Lamé':

$$C_{\frac{l}{2}-l}^{l+1} E_{\eta}^l(\alpha) E_{\eta}^l(\beta) \tag{1.39}$$

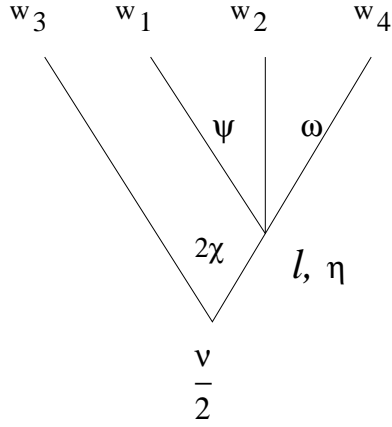


Figura 1.6: Coordinate ellittiche cilindriche su S_3

1.5 Coordinate ellittiche cilindriche I

$$\begin{aligned}
 w_1 &= \operatorname{cn}(\alpha, k)\operatorname{cn}(\beta, k') = \sin \psi \sin \omega \\
 w_2 &= \operatorname{dn}(\alpha, k)\operatorname{sn}(\beta, k') = \cos \omega \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \psi} \cos \phi \\
 w_3 &= \operatorname{sn}(\alpha, k)\operatorname{dn}(\beta, k') = \cos \psi \sqrt{1 - k'^2 \cos^2 \omega} \\
 w_4 &= \operatorname{dn}(\alpha, k)\operatorname{sn}(\beta, k') = \cos \omega \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \psi} \sin \phi
 \end{aligned} \tag{1.40}$$

I limiti delle variabili angolari sono in questo caso:

$$\begin{aligned}
 -K &\leq \alpha \leq K \\
 0 &\leq \beta \leq 2K' \\
 0 &\leq \psi \leq \pi \\
 0 &\leq \omega \leq \pi \\
 0 &\leq \phi \leq 2\pi
 \end{aligned} \tag{1.41}$$

Le autofunzioni sono costituite dal prodotto di due polinomi di Lamé' associati

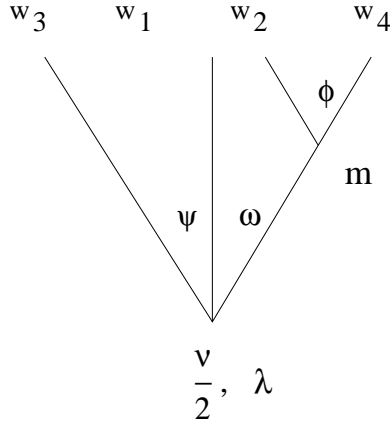


Figura 1.7: Coordinate ellittiche cilindriche di tipo I

per un seno od un coseno dell' angolo ϕ .

$$\mathcal{E}_{\lambda m}^{\frac{\nu}{2}} = E_{\lambda m}^{\frac{\nu}{2}}(\alpha) E_{\lambda m}^{\frac{\nu}{2}}(\beta) \begin{cases} \cos m\phi \\ \sin m\phi \end{cases} \quad (1.42)$$

Il fatto che le autofunzioni dipendano dall' angolo ϕ come un seno od un coseno, anziche' come un esponenziale immaginario e' indice del fatto che in realta' esse sono in autostato per $|m|$, in quanto, come dimostreremo nella sezione 1.9. , esse sono in autostato, fra l' altro, per l' operatore p , la cui equazione di autovalore puo' essere cosi' scritta:

$$\mathcal{E}_{\lambda-m}^{\frac{\nu}{2}} = p \mathcal{E}_{\lambda m}^{\frac{\nu}{2}} \quad (1.43)$$

con $p = \pm$. Questo porta anche, come vedremo quando illustreremo le procedure di risoluzione dell' equazione di Lamé' ad una fattorizzazione ulteriore della matrice di espansione delle armoniche ellissoidali in armoniche sferiche.

1.6 Coordinate ellittiche cilindriche II

$$w_1 = \operatorname{sn}(\alpha, k) \operatorname{dn}(\beta, k') = \rho \cos \psi \sqrt{1 - k'^2 \cos^2 \omega}$$

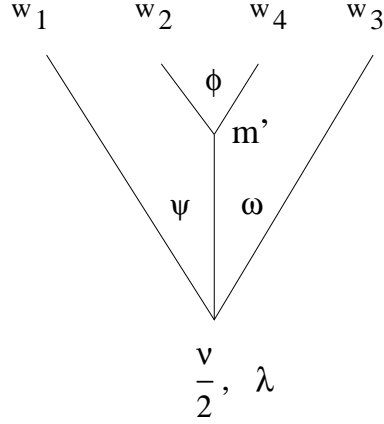


Figura 1.8: Coordinate di tipo ellittico cilindrico di tipo II

$$w_2 = \operatorname{cn}(\alpha, k) \operatorname{cn}(\beta, k') \cos \phi = \rho \sin \psi \sin \omega \cos \phi \quad (1.44)$$

$$w_3 = \operatorname{dn}(\alpha, k) \operatorname{sn}(\beta, k') = \rho \cos \omega \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \psi}$$

$$w_4 = \operatorname{dn}(\alpha, k) \operatorname{sn}(\beta, k') \sin \phi = \rho \sin \psi \sin \omega \sin \phi$$

Le autofunzioni sono dello stesso tipo del caso precedente.

1.7 Coordinate ellissoidali

$$\begin{aligned} w_1^2 &= \frac{(1 - \rho_1)(\rho_2 - 1)(\rho_3 - 1)}{(a - 1)(b - 1)} \\ w_2^2 &= \frac{(a - \rho_1)(\rho_2 - a)(\rho_3 - a)}{a(1 - a)(b - a)} \\ w_3^2 &= \frac{(b - \rho_1)(\rho_2 - b)(\rho_3 - b)}{b(1 - b)(a - b)} \\ w_4^2 &= \frac{\rho_1 \rho_2 \rho_3}{ab} \end{aligned} \quad (1.45)$$

$$0 < \rho_1 < 1 < \rho_2 < b < \rho_3 < a \quad (1.46)$$

La forma algebrica di queste coordinate e' l' unica di cui si dispone. Le autofunzioni sono esprimibili come un prodotto di tre polinomi di Lamé' generalizzati:

$$\mathcal{E}_{x^2 y}^{\frac{\nu}{2}} = E_{x^2 y}^{\frac{\nu}{2}}(\alpha) E_{x^2 y}^{\frac{\nu}{2}}(\beta) E_{x^2 y}^{\frac{\nu}{2}}(\gamma) \quad (1.47)$$

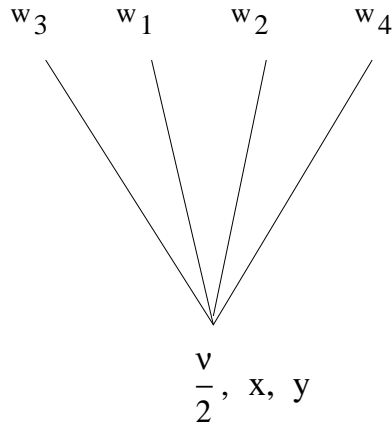


Figura 1.9: Forcella quaternaria rappresentante le coordinate ellissoidali su S_3

dove x e y sono gli autovalori degli operatori in autostato per questo set di coordinate (vedi 1.26). Quest' ultimo set, per la presenza di 2 parametri, si rivela altamente flessibile; purtroppo le sue autofunzioni sono piuttosto complesse da calcolare perche', non essendo disponibili in forma chiusa, come del resto anche quelle degli altri set ellittici, devono essere espanse in serie che illustreremo nel capitolo 5. Vale la pena di soffermarsi su questo set di coordinate, perche' in generale e' stato molto poco studiato, per via della difficolta' sia nell' espressione analitica delle coordinate, che, soprattutto, nella ricerca delle autofunzioni; infatti quasi non esiste letteratura su questo soggetto.

Cominciamo col far notare che se ricerchiamo le posizioni dei fuochi sulla sfera ponendo una variabile uguale a zero (ad esempio ρ_1) otteniamo (ovviamente) la sfera tridimensionale S_2 . In particolare, per $\rho_1 = 0$ si annulla la coordinata t e le coordinate ellissoidali diventano uguali a quelle coniche che abbiamo descritto in precedenza. Poiche' la superficie di S_2 e' un manifold bidimensionale, bastera' (al massimo) un solo parametro per descriverla, si potra' quindi porre:

$$\frac{a-b}{a-1} = k^2 \quad \frac{b-1}{a-1} = k'^2 \quad (1.48)$$

e sfruttare il cambio di variabili utilizzato in [20] per ricondursi ad una delle

due espressioni delle coordinate coniche viste in precedenza. E' chiaro quindi che per sfruttare la caratteristica della presenza di due parametri in questo set di coordinate si deve utilizzare la sfera tetradimensionale in quanto tale, senza possibilita' di ricondursi a casi particolari, come si fa, ad esempio, nel problema a tre corpi per $J = 0$ grazie al lemma dello sfrondamento.

1.8 Limiti degli operatori

In questa sezione presenteremo la derivazione dei limiti delle coordinate ellissoidali ed una schematizzazione generale dei rapporti tra le coordinate separabili sulla sfera S_3 , mentre la derivazione dei limiti degli altri set ellittici puo' essere vista in [9].

1.8.1 Limiti delle coordinate ellissoidali

Partiamo dagli operatori descritti nella tabella precedente:

$$X = F_x G_x + \left(\frac{a-b-1}{1-a-b}\right) F_y G_y + \left(\frac{b-a-1}{1-a-b}\right) F_z G_z \quad (1.49)$$

$$\begin{aligned} Y &= b(1-a)(F_y^2 + G_y^2) + a(1-b)(F_z^2 + G_z^2) + \\ &+ 2b(1-a)\left(\frac{b-a-1}{1-a-b}\right) F_y G_y + 2a(1-b)\left(\frac{a-b-1}{1-a-b}\right) F_z G_z \end{aligned} \quad (1.50)$$

e facciamo il limite per $b \rightarrow 1$

$$\begin{aligned} X &= F_z G_z + \left(\frac{2-a}{a}\right) F_y G_y + F_z G_z \\ &= l^2 - K^2 + \frac{2a-2}{a} F_y G_y \end{aligned} \quad (1.51)$$

$$\begin{aligned} Y &= (1-a)(F_y^2 + G_y^2) + 2(1-a)F_y G_y \\ &= (1-a)(F_y + G_y)^2 \end{aligned} \quad (1.52)$$

Se ora all' operatore X ottenuto in precedenza sommiamo $\frac{2}{a}Y$ e poi l' operatore di Casimir $C = l^2 + K^2$ otteniamo:

$$X' = l^2 + \frac{1-a}{a} K_y^2 \quad (1.53)$$

$$Y' = l_y^2 \quad (1.54)$$

che possono essere trasformati semplicemente in operatori analoghi a quelli delle coordinate ellittiche cilindriche I/II visti in precedenza. L' altro limite e' quello per $a \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} X &= F_x G_x - F_y G_y + F_z G_z \\ &= F_x G_x + F_y G_y + F_z G_z - 2F_y G_y \\ &= l^2 - K^2 - 2(l_y^2 - K_y^2) \end{aligned} \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} Y &= b(1-a)(F_y^2 + G_y^2) + a(1-b)(F_z^2 + G_z^2) + 2b(1-a)F_y G_y + 2a(1-b)F_z G_z \\ &= (1-b)K_z^2 - b(1-a)l_y^2 \end{aligned} \quad (1.56)$$

Quindi sommando ad X l' operatore di Casimir e dividendo per -2 si ottiene:

$$X' = K_x^2 + K_y^2 + l_y^2 \quad (1.57)$$

mentre moltiplicando questo per b e sommandolo ad Y si hanno infine gli operatori:

$$X' = K_x^2 + K_y^2 + l_y^2 \quad (1.58)$$

$$Y' = K_z^2 + bK_x^2 \quad (1.59)$$

che corrispondono ad un set di tipo sferoellittico. Dunque, le coordinate ellissoidali, che contengono due parametri, cioe' il massimo dei parametri possibili per descrivere un manifold tridimensionale, comprendono tutte le altre come casi particolari. Tutti gli altri tipi di coordinate sulla sfera possono essere ottenuti tramite una operazione di limite sugli operatori commutativi che caratterizzano il set di coordinate ellissoidale.

1.9 Riduzione in sottogruppi

Un altro modo per vedere le correlazioni esistenti tra i sistemi di coordinate sulla sfera S_3 e' quello di esaminare le riduzioni a catena del gruppo $O(4)$ rappresentate

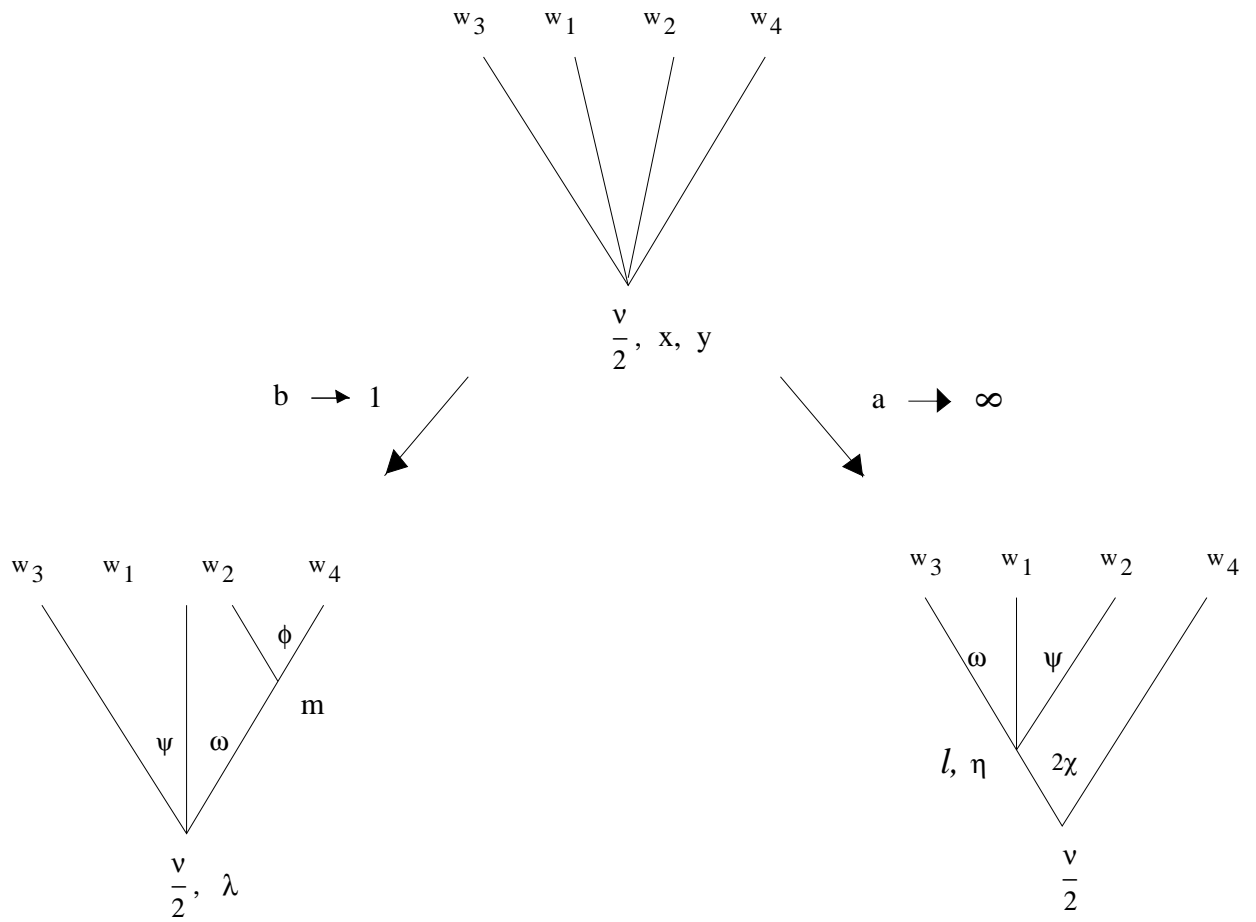


Figura 1.10: Limiti delle coordinate ellissoidali per $b \rightarrow 1$ (ellittiche cilindriche) e per $a \rightarrow \infty$ (sferoellittiche con il metodo degli alberi)

da ogni sistema di coordinate. Per esempio le coordinate che non contengono nessun parametro, cioè quelle sferiche e cilindriche, corrispondono rispettivamente alle riduzioni a catena:

$$O(4) \supset O(3) \supset O(2) \quad (1.60)$$

$$O(4) \supset O(2) \times O(2) \quad (1.61)$$

E' possibile vedere [25] [20] come invece i set di tipo ellittico corrispondano a delle riduzioni che coinvolgono il gruppo discreto D_{2h} . Questo gruppo e' costituito dagli elementi:

$$D_{2h} \equiv \{E, C_2(z), C_2(y), C_2(x), i, \sigma(xy), \sigma(xz), \sigma(yz)\} \quad (1.62)$$

ed ha chiaramente 8 classi e quindi 8 rappresentazioni irriducibili. Questo puo' essere evidenziato notando che le autofunzioni di questi set sono in autostato anche per tre operatori discreti (che quindi le dividono in 8 classi). Questi operatori sono [41]:

$$\hat{C}_2(x) \mathcal{E}_{\lambda,m}^{\frac{\nu}{2}} = \epsilon p \mathcal{E}_{\lambda,m}^{\frac{\nu}{2}} \quad (1.63)$$

$$\hat{C}_2(y) \mathcal{E}_{\lambda,m}^{\frac{\nu}{2}} = \epsilon p s \mathcal{E}_{\lambda,m}^{\frac{\nu}{2}} \quad (1.64)$$

$$\hat{C}_2(z) \mathcal{E}_{\lambda,m}^{\frac{\nu}{2}} = s \mathcal{E}_{\lambda,m}^{\frac{\nu}{2}} \quad (1.65)$$

$$\hat{\Pi} \mathcal{E}_{\lambda,m}^{\frac{\nu}{2}} = \epsilon \mathcal{E}_{\lambda,m}^{\frac{\nu}{2}} \quad (1.66)$$

In queste equazioni si ha che $p = \pm 1$, $s = (-1)^m$ ed ϵ rappresenta l' operatore di parita'.

In generale le forcelle di tipo ternario e quaternario rapresenteranno appunto il sottogruppo D_{2h} di $O(4)$. Il fatto che entrambe i tipi di alberi corrispondano allo stesso sottogruppo non deve sorprendere, in quanto e' noto [30] che le classi delle autofunzioni del set di coordinate ellissoidali sono in numero uguale a quelle dell' equazione di Lamé', cioè otto classi appunto, visto che queste ultime si

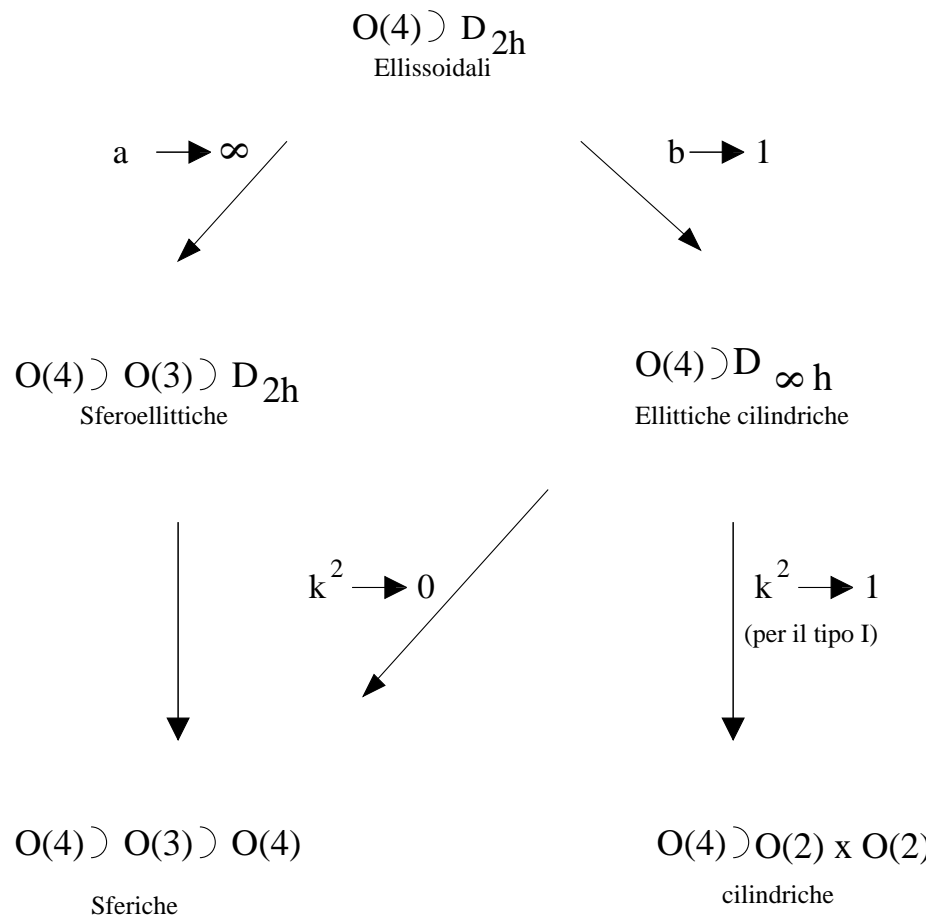


Figura 1.11: Riduzioni a catena di sottogruppi di $O(4)$ che individuano i vari tipi di coordinate sulla sfera S_3

ottengono dalle prime facendo il limite per uno dei due parametri. La situazione puo' essere schematizzata come in figura 1.11:

La relazione fra tutte le coordinate sulla sfera S_3 (escluse quelle ellissoidali) puo' essere riassunta graficamente dalla figura 1.12:

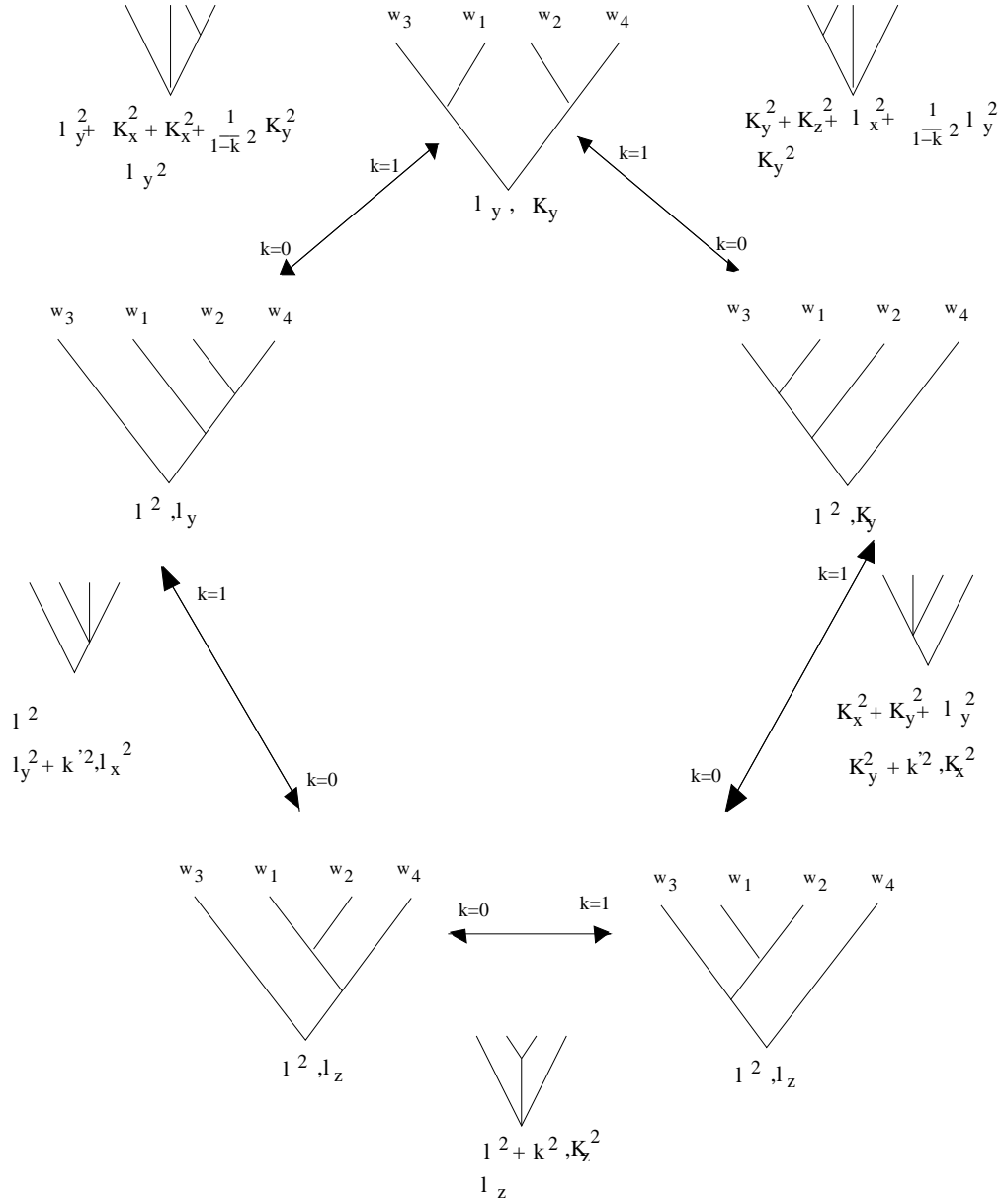


Figura 1.12: Questo pentagono rappresenta le trasformazioni tra le basi standard di $O(4)$, che possono essere scritte come coefficienti di trapianto [24]. Al centro di ogni lato si trovano le basi ellittiche, che fanno da ponte fra le altre.

Capitolo 2

Il metodo ipersferico

2.1 Generalita'

Le tecniche ipersferiche, introdotte in fisica atomica negli anni trenta ed applicate per la prima volta in fisica molecolare (sia per problemi di scattering che di stato legato) all' inizio degli anni sessanta [34], continuano ad essere molto utilizzate in fisica nucleare, mentre negli ultimi venti anni sono state applicate con successo in dinamica molecolare per la trattazione delle reazioni chimiche (ed hanno dato in questo campo degli ottimi risultati, permettendo di calcolare sezioni d' urto reattive stato a stato [29]) e nei problemi di stato legato, in connessione con i set di base sturmiani e gli orbitali policentrici, anche in questo caso con ottimi risultati sia per quanto riguarda la precisione che la velocita' di convergenza (si veda ad es. [55]) Un problema generale riguardante N corpi in D dimensioni (del quale i problemi nel piano e nello spazio che descriveremo in seguito sono dei casi particolari) e' parametrizzabile tramite N vettori D dimensionali, che diventano $N - 1$ dopo la separazione del moto del centro di massa, il quale e' dato dall' equazione del moto di una particella libera in D dimensioni. Quindi il moto interno delle particelle e' funzione di $(N - 1)D$ coordinate cartesiane. La parametrizzazione viene fatta individuando dei set di $N - 1$ vettori D dimensionali

che abbiano delle caratteristiche tali da produrre delle effettive semplificazioni del calcolo. Per questo un set di vettori molto utilizzato a questo scopo e' costituito dai vettori di Jacobi. Nel caso piu' generale (N corpi in D dimensioni) la loro definizione e' data in [6], qui presenteremo per semplificare solo il caso relativo al problema a tre corpi:

$$\vec{X}_{A=\vec{r}_a} = \frac{m_B \vec{r}_b + m_C \vec{r}_c}{m_B + m_C} \quad (2.1)$$

$$\vec{x}_{A=\vec{r}_c} = \vec{r}_c - \vec{r}_b \quad (2.2)$$

in cui il secondo rappresenta una distanza internucleare, mentre il primo e' la distanza tra la terza particella ed il centro di massa delle prime due ed \vec{r}_a , \vec{r}_b , \vec{r}_c sono i vettori posizione delle tre particelle. Sono possibili tre diversi arrangiamenti dei vettori di Jacobi 2.1, legati tra loro dalle rotazioni cinematiche:

$$\begin{bmatrix} \vec{X}_b \\ \vec{x}_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos 2\gamma_{ab} & -\sin 2\gamma_{ab} \\ \sin 2\gamma_{ab} & \cos 2\gamma_{ab} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{X}_a \\ \vec{x}_a \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

Si vede bene come, a differenza delle rotazioni fisiche, in cui ogni vettore subisce il mescolamento delle sue sole componenti, qui sono i due vettori ad essere combinati dalla trasformazione.

La definizione dell' angolo γ e':

$$\tan \gamma = \sqrt{\frac{m_A(m_A + m_B + m_C)}{m_A m_B}} \quad (2.4)$$

con

$$0 \leq \gamma \leq \frac{\pi}{2} \quad (2.5)$$

Questo angolo e' detto angolo di skewing e rappresenta in pratica la separazione tra le configurazioni collineari di due canali di reazione adiacenti. Si avra' che $\gamma \rightarrow 0$ quando $m_C \ll m_A, m_B$ mentre il caso opposto accadrà quando $m_C \gg m_A, m_B$. Il primo caso rappresenta il trasferimento di un atomo leggero tra due atomi pesanti (sistema HLH, cioe' heavy-light-heavy), mentre il secondo sara',

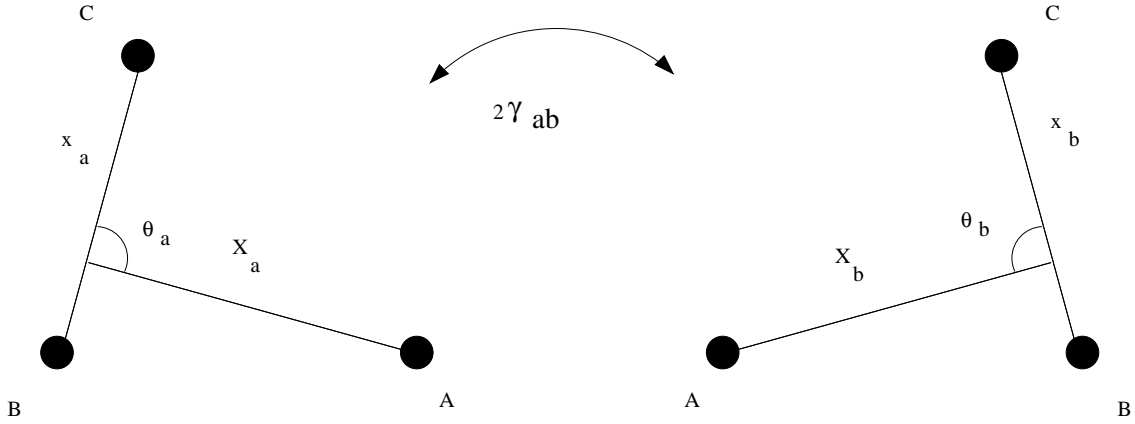


Figura 2.1: Rappresentazione di una rotazione cinematica, passaggio tra due diversi set di vettori di Jacobi (vedi equazione 2.3).

all'opposto un sistema LHL. Vedremo nel capitolo 4 come dal trattamento dei sistemi HLH emergano caratteristiche importanti dei set ellittici. Se i vettori di Jacobi vengono scalati per la massa, ponendo

$$\mu = \sqrt{\frac{m_A m_B m_C}{m_A + m_B + m_C}} \quad (2.6)$$

$$\mu_{AB} = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (2.7)$$

$$\mu_{AB} = \frac{m_A (m_B + m_C)}{m_A + m_B + m_C} \quad (2.8)$$

otteniamo

$$r_A = \left(\frac{\mu_{BC}}{\mu_{A,BC}}\right)^{\frac{1}{4}} x_A \quad (2.9)$$

$$R_A = \left(\frac{\mu_{A,BC}}{\mu_{BC}}\right)^{\frac{1}{4}} X_A$$

Questi costituiscono un set di vettori tale che il tensore metrico è diagonale, e quindi tutti i termini di derivata mista sono nulli: questo consente di esprimere l'hamiltoniano del sistema come:

$$\hat{H} = \hat{T} + V = -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\vec{\nabla}_{R_A}^2 + \vec{\nabla}_{r_A}^2) + V \quad (2.10)$$

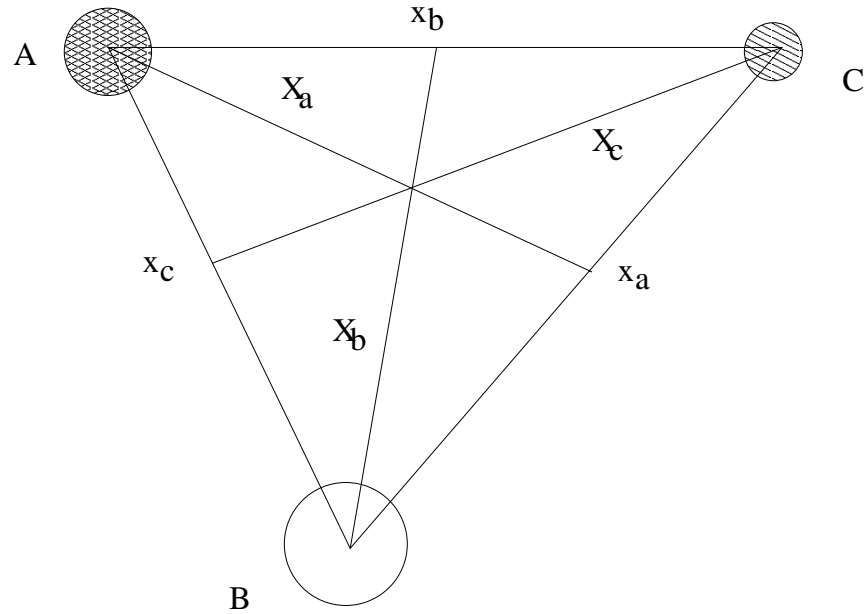


Figura 2.2: I tre set di vettori di Jacobi per una reazione A+BC

che corrisponde a quello di una particella di massa μ che si muove in 4 dimensioni per tre corpi nel piano ed in 6 dimensioni per il problema spaziale (nel caso generale le dimensioni sono ovviamente $(N - 1)D$).

2.2 Coordinate ipersferiche

Il problema puo' pero' essere visto in maniera diversa se definiamo una variabile ρ detta iperraggio come:

$$\rho = \sum_{i=1}^{N-1} \vec{x}_i^2 \quad (2.11)$$

in cui gli \vec{x}_i sono i vettori con cui si parametrizza il problema. La definizione di questa variabile permette di vedere il problema come descritto sempre da un manifold $(N - 1)D$ dimensionale che corrisponde alla superficie di una ipersfera ND dimensionale. La variabile iperradiale ha un ruolo centrale nella trattazione ipersferica per due motivi:

1. permette la separazione del calcolo in due stadi
2. consente di seguire l' evolversi di una reazione da reagenti (ρ grande e, ad esempio per un problema a tre corpi, presenza di un atomo e di una molecola biatomica a distanza infinita) a prodotti (sempre ρ grande, ma diverso arrangiamento dei tre corpi), attraverso una situazione intermedia in cui le N particelle sono molto vicine le une alle altre (che si verifica a $\rho \rightarrow 0$, cioè' al centro dell' ipersfera).

Le rimanenti coordinate saranno quindi costituite dagli $(N - 1)D - 1$ iperangoli necessari a parametrizzare la superficie dell' ipersfera. La scelta del set di iperangoli da utilizzare e' vasta e cio' e' fondamentale, in quanto permette un adattamento del metodo ipersferico alla fisicità' del problema, come vedremo nella sezione 4.4. Il laplaciano, cioè' l' operatore dell' energia cinetica, in queste coordinate puo' essere espresso come:

$$\nabla = -\frac{\hbar^2}{2m}(\rho^{-d-1}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^{d-1}\frac{\partial}{\partial\rho} + \rho^{-2}\hat{\Lambda}(\Omega_{d-1})) \quad (2.12)$$

Per ottenere l'espressione esplicita dell'operatore Laplaciano $\hat{\Lambda}^2(\Omega_{d-1})$, che rappresenta l'energia cinetica sulla sfera d -dimensionale di raggio unitario, ci serviremo del tensore metrico \mathbf{g} .

Gli elementi di \mathbf{g} sono definiti in termini delle derivate delle d coordinate cartesiane x_k rispetto ai $d - 1$ iperangoli ω_i [37]

$$g_{ij} = \sum_{k=1}^d \frac{\partial x_k}{\partial \omega_i} \frac{\partial x_k}{\partial \omega_j} = g_{jj} \quad (2.13)$$

L'operatore di Laplace è definito nel seguente modo:

$$\hat{\Lambda}^2(\Omega_{d-1}) = g^{-1/2} \sum_{i,j=1}^{d-1} \frac{\partial}{\partial \omega_i} g^{1/2} g^{ij} \frac{\partial}{\partial \omega_j} \quad (2.14)$$

dove g^{ij} sono gli elementi della matrice inversa di \mathbf{g}

$$\sum_j g_{ij} g^{jk} = \delta_{ik} \quad (2.15)$$

e

$$g = \det \mathbf{g}. \quad (2.16)$$

Quando x_k e ω_i sono collegati da un albero, si può verificare che gli elementi fuori diagonale del tensore metrico sono nulli e perciò le coordinate sono ortogonali. In questo caso gli elementi diagonali sono identificati con i fattori di scala, $g_{ii} = h_i^2$, e l'operatore di Laplace si semplifica come segue:

$$\hat{\Lambda}^2(\Omega_{d-1}) = \left(\prod_{k=1}^{d-1} h_k \right)^{-1} \sum_{i=1}^{d-1} \frac{\partial}{\partial \omega_i} \left[\frac{\left(\prod_{k=1}^{d-1} h_k \right)}{h_i^2} \right] \frac{\partial}{\partial \omega_i}. \quad (2.17)$$

Questo Laplaciano angolare agisce sullo spazio d dimensionale delle armoniche ipersferiche

$$\hat{\Lambda}^2(\Omega_{d-1}) Y_{\nu\{\mu_{d-2}\}}^d(\Omega_{d-1}) = -\nu(\nu + d - 2) Y_{\nu\{\mu_{d-2}\}}^d(\Omega_{d-1}) \quad (2.18)$$

con autovalori $-\nu(\nu + d - 2)$ dove $d = (N - 1)D$ esprime chiaramente la dimensionalità della sfera. In queste equazioni μ_{d-2} definisce il set dei restanti numeri quantici. A questo punto resta il problema di come parametrizzare la parte iperangolare, e data la complessità dell'argomento, ce ne occuperemo diffusamente nei capitoli 3 e 4.

2.3 Separazione dell' iperraggio

Questo è forse l'aspetto più interessante del metodo ipersferico dal punto di vista del calcolo, perché consente di dividere quest'ultimo in due stadi: 1) sviluppo adiabatico della funzione d'onda rispetto a ρ (problema a ρ fisso) 2) calcolo della parte iperradiale (propagazione delle curve adiabatiche). Possiamo esprimere la soluzione come una serie del tipo:

$$\psi = \rho^{-\frac{5}{2}} \sum_i \Phi_i(\rho, \Omega_d)(f_i(\rho)) \quad (2.19)$$

in cui le ϵ_i sono le costanti di separazione che corrispondono alle curve adiabatiche, cioè alle energie degli stati adiabatici, che poi dovranno essere accoppiati nella seconda parte del calcolo, mentre le $f_i(\rho)$ sono i pesi delle funzioni adiabatiche Φ_i nello sviluppo diabatico che costituisce la seconda parte del calcolo. Le funzioni Φ possono essere ottenute fattorizzando l' hamiltoniano per valori fissi dell' iperraggio come

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\hat{\Lambda}^2(\Omega_d) + V(\bar{\rho}, \Omega_{d-1}) - \epsilon_i(\rho)\right\}\phi_i(\bar{\rho}, \Omega_{d-1}) = 0 \quad (2.20)$$

e quindi sostituendo lo sviluppo visto in precedenza nell' hamiltoniano espresso in coordinate ipersferiche si ottiene:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15}{4} + \epsilon_i(\rho) - E\right)\right\}f_i(\rho) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_i(W_{ii'}\frac{df_i}{d\rho} + Q_{ii'}(\rho)f_{i'}(\rho)) \quad (2.21)$$

in questa equazione i termini

$$W_{ii'} = \langle \Phi_i | \frac{\partial}{\partial \rho} | \Phi_{i'} \rangle \quad (2.22)$$

$$Q_{ii'} = \langle \Phi_i | \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} | \Phi_{i'} \rangle \quad (2.23)$$

esprimono gli accoppiamenti non adiabatici. Vedremo nella sezione 2.4. come il numero di funzioni di base dello sviluppo adiabatico a valori fissi di ρ (e quindi il numero di termini da accoppiare nella propagazione delle curve adiabatiche) dipenda in maniera cruciale dalla parametrizzazione dell' ipersfera, e come quindi sia fondamentale parametrizzare questa correttamente per avere una significativa riduzione del tempo di calcolo per questo tipo di problema.

Il calcolo della soluzione iperradiale si fa dividendo il dominio della variabile iperradiale in settori e utilizzando uno sviluppo diabatico fatto sulle funzioni adiabatiche calcolate al centro del settore. Questo sviluppo conduce quindi ad un set di equazioni differenziali accoppiate che, per ogni settore, può essere scritto come:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d}{d\rho^2} + \frac{15}{8}\frac{\hbar^2}{\mu\rho^2} - E\right)f_i(\rho) + \sum_{i'}\mathcal{I}_{ii'}(\rho)f_{i'}(\rho) \quad (2.24)$$

in questa equazione il termine di accoppiamento $\mathcal{I}_{ii'}$ e' dato dall' integrale in cui compaiono le funzioni adiabatiche calcolate al centro del settore:

$$\mathcal{I}_{ii'} = \langle \Phi_i^{JM}(\bar{\rho}) | \hat{H}^0(\rho) | \Phi_{i'}^{JM}(\bar{\rho}) \rangle \quad (2.25)$$

in cui $\hat{H}^0(\rho)$ e' invece l' hamiltoniano gia' visto per il problema a ρ fisso, ma calcolato ogni volta per un valore di ρ diverso all' interno del settore su cui si sta facendo lo sviluppo. La fase di propagazione delle curve adiabatiche necessita chiaramente delle condizioni di continuita' agli estremi di ogni settore per la soluzione calcolata e per la sua derivata prima. Queste condizioni sono espresse facendo uso delle matrici di sovrapposizione:

$$\mathcal{O}_{ii'} = \langle \Phi_i^{JM}(\bar{\rho}_{s+1}, \Omega_5) | \Phi_{i'}^{JM}(\bar{\rho}_{s+1}, \Omega_5) \rangle \quad (2.26)$$

(dove s e' l' indice del settore) e risultano quindi essere:

$$f_i(\rho, \bar{\rho}_{s+1}), \bar{\rho}_s = \sum_{i'} \mathcal{O}_{ii'}(\bar{\rho}_{s+1}, \bar{\rho}_s) f_{i'}(\rho, \bar{\rho}_s) \quad (2.27)$$

$$\frac{d}{d\rho} f_i(\rho, \bar{\rho}_{s+1}), \bar{\rho}_s = \sum_{i'} \mathcal{O}_{ii'}(\bar{\rho}_{s+1}, \bar{\rho}_s) \frac{d}{d\rho} f_{i'}(\rho, \bar{\rho}_s) \quad (2.28)$$

La grandezza dei settori in cui si divide il dominio dell' iperraggio (e di conseguenza il loro numero) e' un parametro essenziale per l' efficienza del calcolo. Infatti se il settore e' piccolo si ha che la matrice degli accoppiamenti fra le funzioni adiabatiche $\mathcal{I}_{ii'}$ e' diagonalmente dominata perche' il punto di iperraggio ρ sara' molto vicino al centro del settore $\bar{\rho}_s$, punto in cui la matrice e' chiaramente diagonale. Questo pero' produce un aumento del numero dei settori, e quindi del tempo di calcolo necessario per la soluzione della parte angolare.

Gli algoritmi per la soluzione dell' equazione iperradiale sono abbastanza standard perche' sono in pratica identici a quelli, molto ben conosciuti, relativi alla teoria degli urti anelastici, fra questi e' possibile citare il metodo della derivata logaritmica, sviluppato da Johnson [35] e poi modificato da Manolopoulos [36], oppure il metodo che sfrutta la derivata logaritmica a corto raggio, mentre a lungo

raggio utilizza il propagatore di Airy, dovuto a Manolopoulos ed Alexander [38]. Gli algoritmi per la parte angolare sono molto meno standard, ed in particolare il grande numero di variabili (5 angoli) e la difficoltà di trovare una parametrizzazione adeguata a descrivere i vari canali di reazione costituiscono gli ostacoli più pesanti per arrivare ad una soluzione efficiente della parte iperangolare del problema.

2.4 Problemi legati alle parametrizzazioni angolari

Ci sono due questioni fondamentali legate alla scelta delle parametrizzazioni angolari:

1. I set di base nella regione di forte interazione (cioè per valori piccoli della variabile iperradiale) devono descrivere bene tutti e tre i canali di reazione.
2. Da un certo valore di ρ in poi ogni canale è descritto adeguatamente dalle coordinate di Jacobi relative a quell'arrangiamento; queste coordinate sono poi quelle che descrivono bene le situazioni asintotiche (atomo + molecola biatomica a grande distanza), per cui si presenta il problema di dover fare una proiezione tra le coordinate nella regione di interazione e quelle asintotiche.

Le osservabili di un esperimento di scattering (sezioni d'urto totali e differenziali) si ottengono integrando l'equazione di Schrödinger dalla regione di maggiore interazione fino ad uno stato in cui sia reagenti che prodotti sono nelle rispettive regioni asintotiche. Per spiegare meglio quali siano le possibili scelte ed i loro pregi e difetti relativamente alle parametrizzazioni angolari si può considerare un semplice caso monodimensionale, che illustreremo facendo vedere ciò che accade su 2 dei tre canali di una reazione $A+BC$. È possibile sviluppare la funzione d'

onda sugli autostati vibrazionali dei reagenti [45] (perche' non ci sono rotazioni nel caso monodimensionale che stiamo considerando), e quindi in autostati di r_α .

In questo caso il canale α , cioe' quello dei reagenti, sara' descritto bene, ma per descrivere quello dei prodotti (β) sara' necessario un numero molto grande di autostati di r_α , questo perche' e' possibile descrivere una zona in cui r_α e' grande tramite gli autostati vibrazionali dei reagenti solo considerando quelli corrispondenti a numeri quantici molto elevati, (perche' per l' anarmonicita' questi tendono ad avere distanze di equilibrio piu' lunghe rispetto a quelli piu' bassi, ma questo spostamento e' molto piccolo, quindi servono molti autostati.

Un identico problema si presenta descrivendo i canali di reazione con le coordinate ipersferiche asimmetriche relative ad uno dei canali. Queste vanno bene appunto per descrivere quel canale particolare, ma sono del tutto inadatte per gli altri due.

Per utilizzare coordinate di questo tipo si e' costretti a fare uso di set sovracompleti, che portano ad alcuni problemi nelle regioni di forte interazione, in cui si ha un notevole overlap tra i vari canali di reazione. Le coordinate asimmetriche hanno pero' il vantaggio di non dover essere proiettate sugli stati finali dei prodotti perche', per un determinato canale, li descrivono gia' bene.

Le coordinate asimmetriche sono quindi evidentemente, come era facile prevedere esaminando le configurazioni dei tre corpi a ρ grande (atomo + molecola biatomica separati), piu' adatte a descrivere il problema per grandi valori di ρ .

La situazione opposta si verifica invece per le coordinate simmetriche: queste sono molto adatte per valori piccoli dell' iperraggio, in cui le tre particelle sono molto prossime l'una all'altra: in questo caso tutti e tre i canali sono ben descritti dalle superfici curvilinee delle coordinate simmetriche, che tagliano tutte le buche di potenziale dei vari canali allo stesso modo. All' aumentare di ρ , pero', aumenta il numero degli stati necessari a descrivere i tre canali, perche' questi tendono sempre di piu' verso i prodotti, e diventa quindi necessario proiettare le coordinate

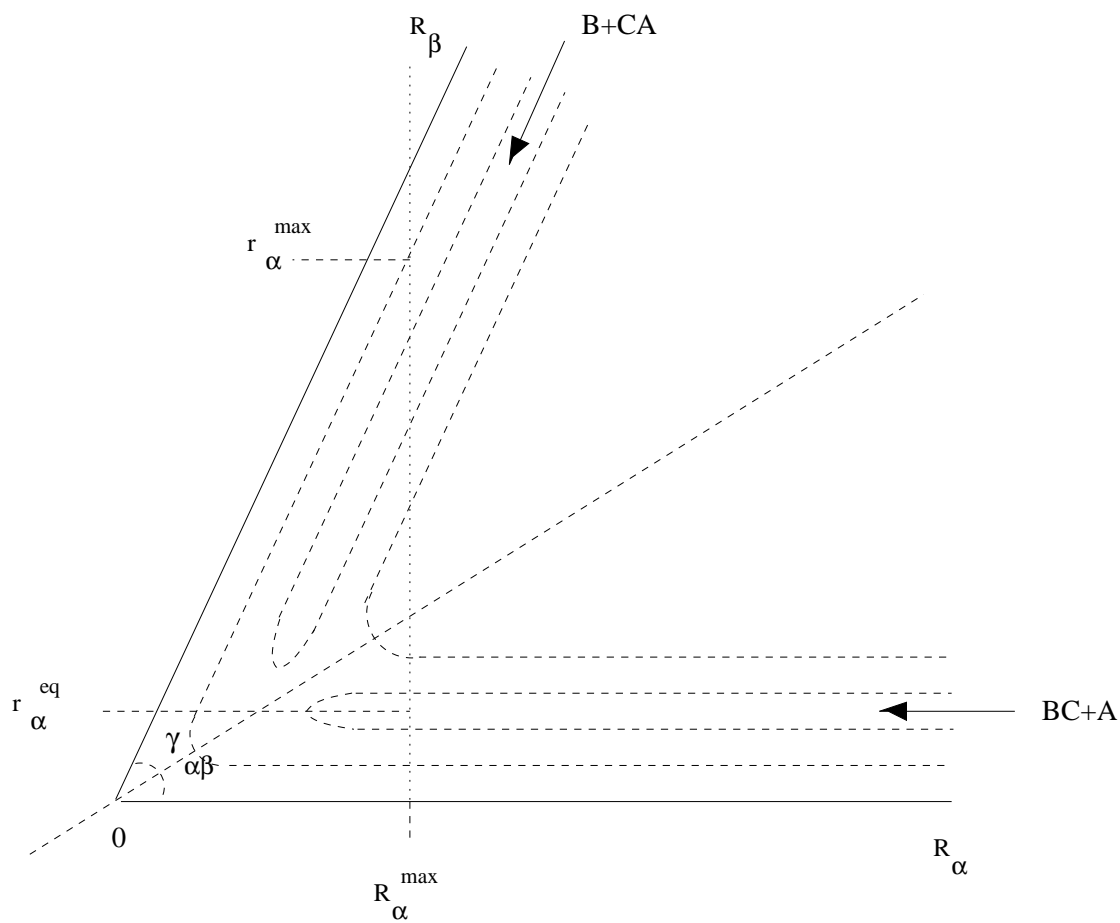


Figura 2.3: Schema della superficie di energia potenziale per la reazione collineare $A + BC$ in funzione dei vettori di Jacobi. I due canali sono separati dall'angolo di skewing $\gamma_{\alpha\beta}$. In figura R_α^{\max} e' il massimo valore di R_α che si deve raggiungere integrando l'equazione di Schrödinger per ottenere le osservabili di scattering, mentre r_α rappresenta la distanza di equilibrio dei vari stati vibrazionali dei reagenti.

simmetriche sui vettori di Jacobi di ogni canale. Le coordinate di tipo ellittico cilindrico I che noi qui proponiamo consentono di evitare proprio questo problema: pur rimanendo nell'ambito delle coordinate asimmetriche (a ρ molto grande funzionano bene per un solo canale) infatti, consentono di eliminare il problema della proiezione sulle coordinate di Jacobi perché, per la presenza di un parametro aggiuntivo k^2 consentono un passaggio graduale da coordinate simmetriche (per $k^2 \rightarrow 1$) a coordinate asimmetriche (per $k^2 \rightarrow 0$). Molti altri esempi di tentativi di risoluzione del problema del passaggio da coordinate simmetriche ad asimmetriche si trovano in letteratura, si veda ad esempio [48] in cui si utilizza un approccio differente, che fa riferimento a coordinate tangenti alle simmetriche per passare in modo continuo alle coordinate di Jacobi.

Capitolo 3

Tre corpi nel piano

Il caso relativo ai tre corpi nel piano presenta forti analogie sia ovviamente con l'atomo d'idrogeno che con un corpo immerso in un campo magnetico creato da un monopolo magnetico (si veda [10] per una discussione dettagliata dell'argomento basata sui potenziali di gauge, dove si dimostra come sia possibile esprimere le armoniche che emergono per i tre corpi nel piano in funzione di quelle del monopolo magnetico). Il problema planare può essere parametrizzato tramite due vettori bidimensionali r_i , R_i dipendenti chiaramente dall'arrangiamento, che appare come indice. Questi vettori individuano quindi uno spazio tetradimensionale esprimibile con l'uso di quattro coordinate cartesiane oppure, secondo il metodo ipersferico, attraverso un iperraggio e gli iperangoli che descrivono la superficie di una ipersfera S_3 in quattro dimensioni. Questo spazio tetradimensionale è detto spazio delle configurazioni [10]. La sfera S_3 come abbiamo visto può essere parametrizzata in diversi modi, se riprendiamo il set di coordinate che in precedenza abbiamo definito cilindrico potremo rappresentarlo attraverso il metodo degli alberi come in figura 1.5

Se a questo punto poniamo $J = 0$, cioè momento angolare totale nullo, questo corrisponderà ad avere $m_2 = -m_1$, ed a questo punto sarà possibile applicare il lemma dello sfrondamento [5] che porta alla riduzione della dimensionalità della

sfera da S_3 ad S_2 , e su quest' ultima potremo definire un nuovo set di coordinate w_1, w_2, w_3 che puo' essere parametrizzato in 2 modi differenti:

$$\begin{aligned} w_1 &= \sin 2\chi \cos \theta = \cos 2\Theta \sin 2\Phi \\ w_2 &= \sin 2\chi \sin \theta = \sin 2\Theta \\ w_3 &= \cos 2\chi = \cos 2\Theta \cos 2\Phi \end{aligned} \quad (3.1)$$

rappresentati dagli alberi in figura 1.2.1

E' necessario analizzare pero' le definizioni delle coordinate angolari. Se poniamo:

$$\vec{\eta} = \frac{1}{2}(\vec{r} \times \vec{R}) \quad (3.2)$$

questo vettore ha modulo pari all' area del triangolo formato dalle tre particelle ed e' invariante rispetto all' arrangiamento dei tre atomi, al pari dell' iperraggio.

Ora definendo

$$|\vec{\eta}| = \frac{\rho^2 \sin 2\Theta}{4} = \frac{w_2^2}{4} \quad (3.3)$$

abbiamo subito che la coordinata w_2 e la variabile angolare Θ sono indipendenti dalle rotazioni cinematiche, che infatti agiscono sul piano $w_1 - w_3$.

E' possibile poi in modo simile definire le altre variabili, relative alla parametrizzazione asimmetrica:

$$\tan \chi = \frac{X_i}{x_i} \quad (3.4)$$

$$\cos \theta = \frac{x_i \cdot X_i}{|x_i X_i|} \quad (3.5)$$

queste ovviamente dipendono dall' arrangiamento, a differenza di Θ . Le coordinate w_1, w_2, w_3 caratterizzano in definitiva un manifold tridimensionale che denomineremo spazio interno (o "shape space" [10]). I ranges di questi angoli sullo shape space, o meglio sulla sfera S_2 che e' coperta per intero, saranno

$$\begin{aligned} 0 &\leq \chi \leq \frac{\pi}{2} \\ 0 &\leq \theta \leq 2\pi \end{aligned} \quad (3.6)$$

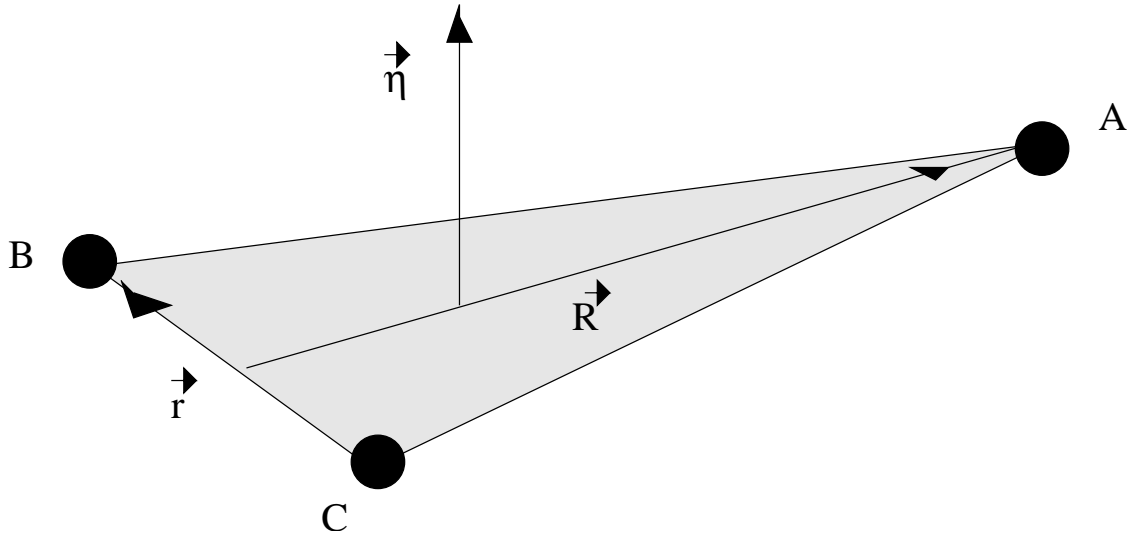


Figura 3.1: Il vettore $\vec{\eta}$ in 3.3 e' ortogonale al triangolo formato dalle tre particelle e in modulo uguale all' area di questo triangolo (regione ombreggiata)

$$0 \leq \Theta \leq \frac{\pi}{4}$$

$$0 \leq \Phi \leq \pi$$

Ad ogni punto nello spazio interno $P_0 \equiv \{w_{10}, w_{20}, w_{30}\}$ corrisponde nello spazio delle configurazioni un insieme di punti, legati fra loro da matrici di rotazione bidimensionali (cioe' le matrici di trasformazione sono elementi di $SO(2)$). Gli elementi di questo insieme rappresentano le diverse orientazioni spaziali che il triangolo individuato dai tre corpi puo' assumere. Questo puo' essere visto molto bene in [10] e [32] in cui, in base alla teoria dei fiber-bundles ed ai potenziali di gauge vengono correlati i sistemi di riferimento e spiegati i dettagli di teoria dei gruppi che qui omettiamo.

3.1 Parametrizzazioni

Le parametrizzazioni generalmente piu' utilizzate sono essenzialmente due: la simmetrica e la asimmetrica, mentre le estensioni ellittiche vengono da noi intro-

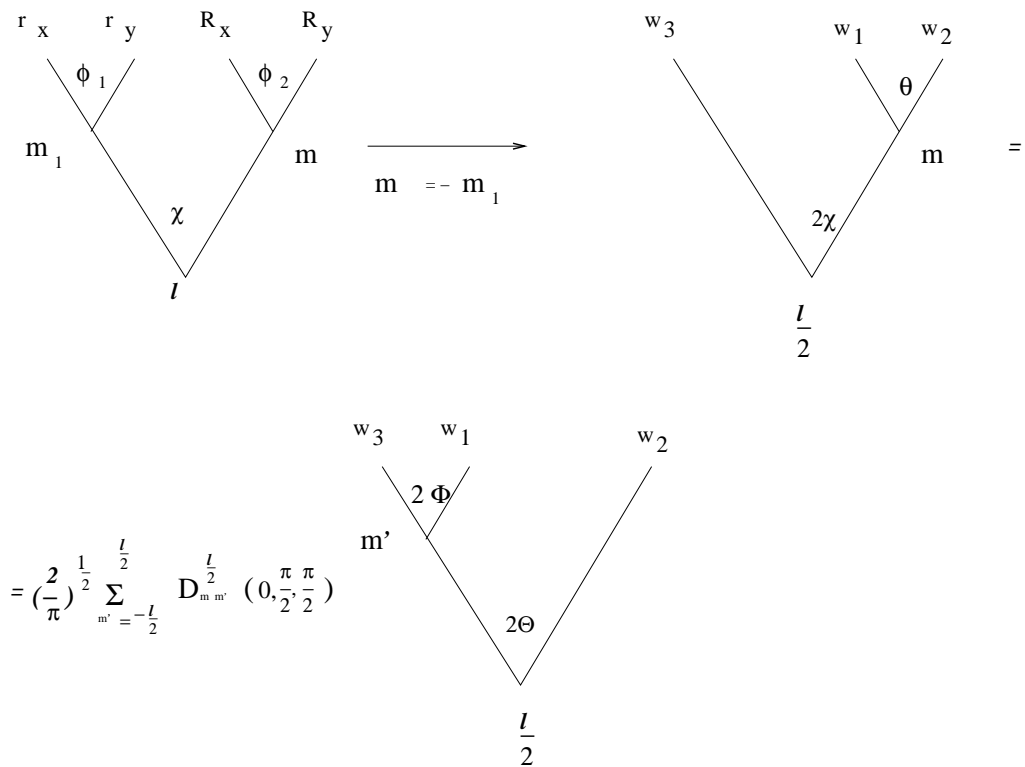


Figura 3.2: Rappresentazione grafica del lemma dello sfrondamento degli alberi simmetrici per tre corpi nel piano [6] e connessione tra le due basi asimmetrica (in alto) e simmetrica (in basso) per il problema a $J = 0$. Nel passaggio dal primo al secondo albero si ha anche che $2\Phi = \phi_2 - \phi_1$

dotte utilizzando le coordinate coniche mostrate precedentemente.

3.1.1 Coordinate asimmetriche

In questo caso le coordinate sono quelle rappresentate dal primo sistema mostrato sopra, dove l'asse di quantizzazione e' w_3 . Le singolarita' stanno ovviamente sull' asse polare (Si veda [49] per una discussione dettagliata sulle singolarita' nei sistemi di riferimento per i problemi a tre corpi). Queste coordinate sono individuate in letteratura anche come coordinate di Fock, che fu il primo ad introdurle [33]. Sono dette asimmetriche perche' le variabili dipendono fortemente dal canale di reazione, per cui facendo una rotazione cinematica si trova un nuovo sistema di coordinate, non facilmente correlabile al precedente. La forma del laplaciano e' chiaramente identica a quella dell' atomo di idrogeno :

$$\hat{\Lambda}^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \quad (3.7)$$

Le autofunzioni del laplaciano sulla sfera S_2 sono le armoniche sferiche:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3.8)$$

Effettuando una rotazione cinematica

$$\begin{bmatrix} w_{1k} \\ w_{1k} \\ w_{1k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos 2\gamma_{jk} & 0 & -\sin 2\gamma_{jk} \\ 0 & 1 & \\ \sin 2\gamma_{jk} & 0 & \cos 2\gamma_{jk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{1j} \\ w_{1j} \\ w_{1j} \end{bmatrix}$$

l' effetto che si ha sulle autofunzioni puo' essere descritto [5] come segue:

$$Y_{\frac{l}{2}, m}(2\chi_k, \phi_k) = \sum_{m'} Y_{\frac{l}{2}, m'}(2\chi_j, \phi) d_{m', m}^{\frac{l}{2}}(2\gamma_{jk}) \quad (3.9)$$

dove le $d_{m', m}^{\frac{l}{2}}(2\gamma)$ rappresentano le funzioni di rotazione ridotte di Wigner.

3.1.2 Coordinate simmetriche

Queste sono rappresentate dal secondo sistema sopra menzionato, in questo caso l'asse di quantizzazione e' w_1 . Le coordinate simmetriche furono utilizzate per la prima volta da Smith e Whitten [34] e sono cosi' chiamate perche' sotto l'azione di una rotazione cinematica una delle variabili resta inalterata, mentre all'altra si somma semplicemente l'angolo di skewing tra i due canali, per cui le autofunzioni

$$Y_{\frac{l}{2}m}(2\Theta, 2\Phi) \quad (3.10)$$

subiscono soltanto un phase shift a seguito di questa trasformazione:

$$Y_{\frac{l}{2}m}(2\Theta, 2\Phi_k) = Y_{\frac{l}{2}m}(2\Theta, 2\Phi_j)e^{-2im\gamma_{jk}} \quad (3.11)$$

3.1.3 Coordinate coniche

La loro espressione analitica e' stata data in precedenza nel capitolo sulla separazione delle variabili. Chiaramente l'aspetto principale di queste coordinate e' la presenza di un parametro aggiuntivo k^2 che da' flessibilita' al sistema. Il laplaciano e' esprimibile come:

$$\hat{\Lambda}^2 = \frac{\sqrt{(1 - k^2 \cos^2 \psi)(1 - k'^2 \cos^2 \omega)}}{k^2 \sin^2 \psi + k'^2 \sin^2 \omega} \left[\frac{\partial}{\partial \psi} \sqrt{\frac{1 - k^2 \cos^2 \psi}{1 - k'^2 \cos^2 \omega}} \frac{\partial}{\partial \psi} + \right] \quad (3.12)$$

$$+ \left[\frac{\partial}{\partial \omega} \sqrt{\frac{1 - k'^2 \cos^2 \omega}{1 - k^2 \cos^2 \psi}} \frac{\partial}{\partial \omega} \right]$$

mentre le autofunzioni

$$E_{l\eta}(\alpha)E_{l\eta}(\beta) \quad (3.13)$$

sono prodotti di polinomi di Lamé' (armoniche ellissoidali), espandibili in armoniche sferiche come:

$$E_{l\eta}(\alpha)E_{l\eta}(\beta) = \sum_{m'=-l}^l c_{\eta m'}^l Y_{lm'}(2\Theta, 2\Phi) \quad (3.14)$$

$$E_{l\eta}(\alpha)E_{l\eta}(\beta) = \sum_{m=-l}^l d_{\eta m}^l Y_{lm}(2\chi, 2\theta) \quad (3.15)$$

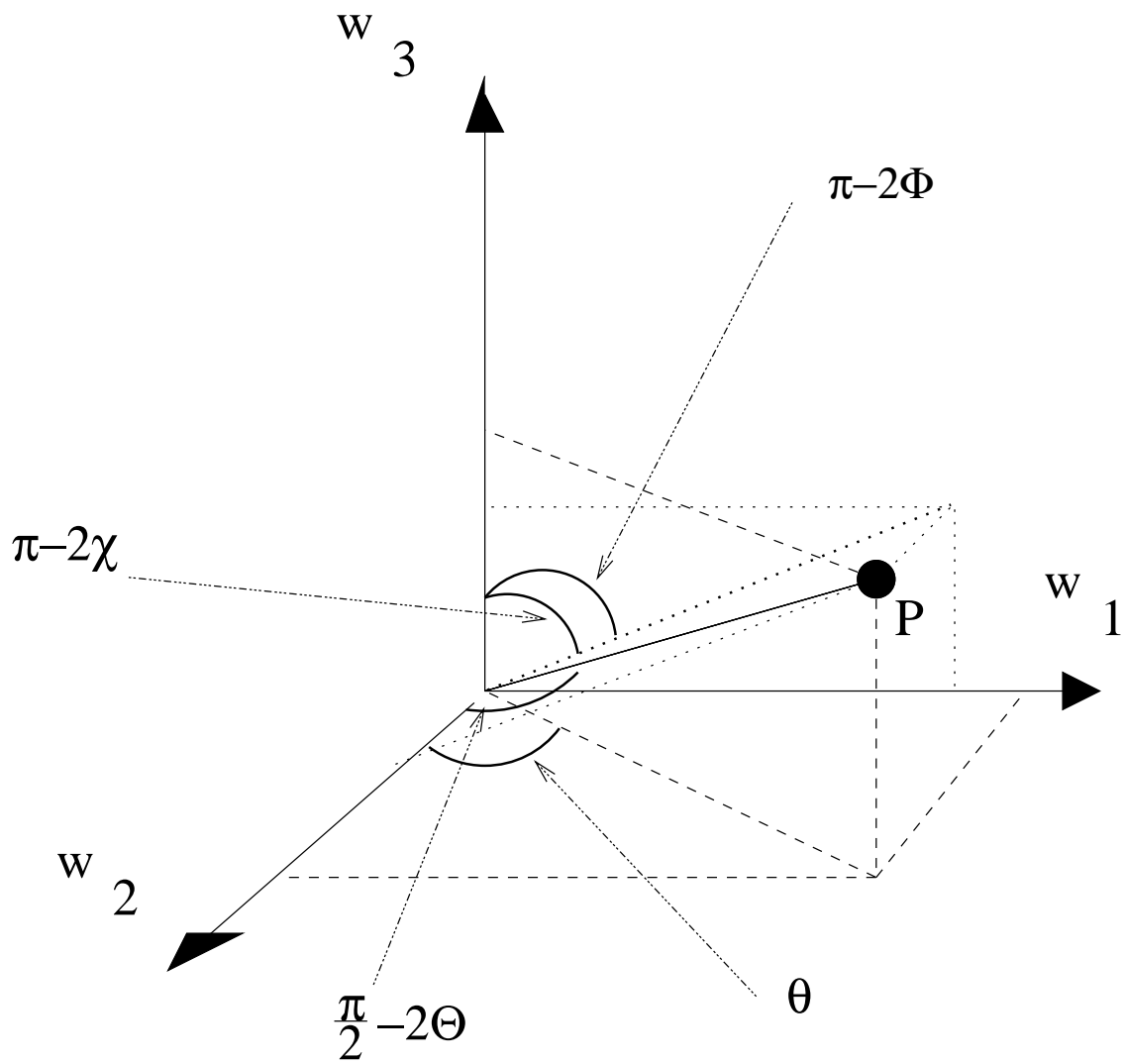


Figura 3.3: Coordinate per le parametrizzazioni simmetrica (Θ, Φ) ed asimmetrica (χ, θ) per il problema a tre corpi.

Le matrici tridiagonali dei coefficienti $c_{\eta m'}^l$ e $d_{\eta m}^l$ possono essere ottenute diagonalizzando l'operatore della base conica sulle armoniche simmetriche o asimmetriche e la loro forma analitica e' data in [9]

Sotto una rotazione cinematica le armoniche ellissoidali si comportano nel seguente modo:

$$E_{l\eta}(\alpha)E_{l\eta}(\beta) = \sum_{m'=-l}^l Y_{lm'}(2\Theta, 2\Phi) c_{\eta m}^l e^{-2i\gamma\Phi} d_{m',m}^{\frac{l}{2}}(2\gamma) \quad (3.16)$$

$$E_{l\eta}(\alpha)E_{l\eta}(\beta) = \sum_{m=-l}^l \sum_{m'=-l}^l Y_{lm}(2\chi, \theta) d_{\eta m}^l d_{m,m'}^{\frac{l}{2}}(2\gamma) \quad (3.17)$$

a seconda che le si espanda in armoniche simmetriche od asimmetriche.

3.1.4 Connessione tra le basi

Come si puo' vedere in modo piu' approfondito in [6] [24] la trasformazione tra le 2 basi sferiche di $O(3)$ (le coordinate simmetriche ed asimmetriche) non sono altro che delle matrici di rotazione di Wigner, che rappresentano i coefficienti di trapianto tra i due alberi che schematizzano le coordinate. Questa trasformazione puo' essere scritta come

$$Y_{\frac{l}{2}m}(2\chi, \theta) = Y_{\frac{l}{2},m'}(2\Theta, 2\Phi) \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{m'=-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} D_{m,m'}^l(0, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}) \quad (3.18)$$

La connessione con la base conica e' gia' individuata dalla espansione in armoniche sferiche dei polinomi di Lamé': e' chiaro poi che ai limiti dell'intervallo di definizione di k^2 la matrice dei coefficienti $b_{\eta m}^l$ assume dei valori particolari:

$$d_{\eta m}^l \xrightarrow{k^2 \rightarrow 0} \text{diagonale} \quad (3.19)$$

$$d_{\eta m}^l \xrightarrow{k^2 \rightarrow 1} D_{m,m'}^{\frac{l}{2}}\left(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}, 0\right) \quad (3.20)$$

Questi limiti sono invertiti per la matrice dei coefficienti $c_{\eta m'}^l$. Si vede quindi come lo sviluppo delle armoniche ellissoidali in armoniche sferiche ordinarie sia convergente per entrambi i valori limite del parametro k^2 .

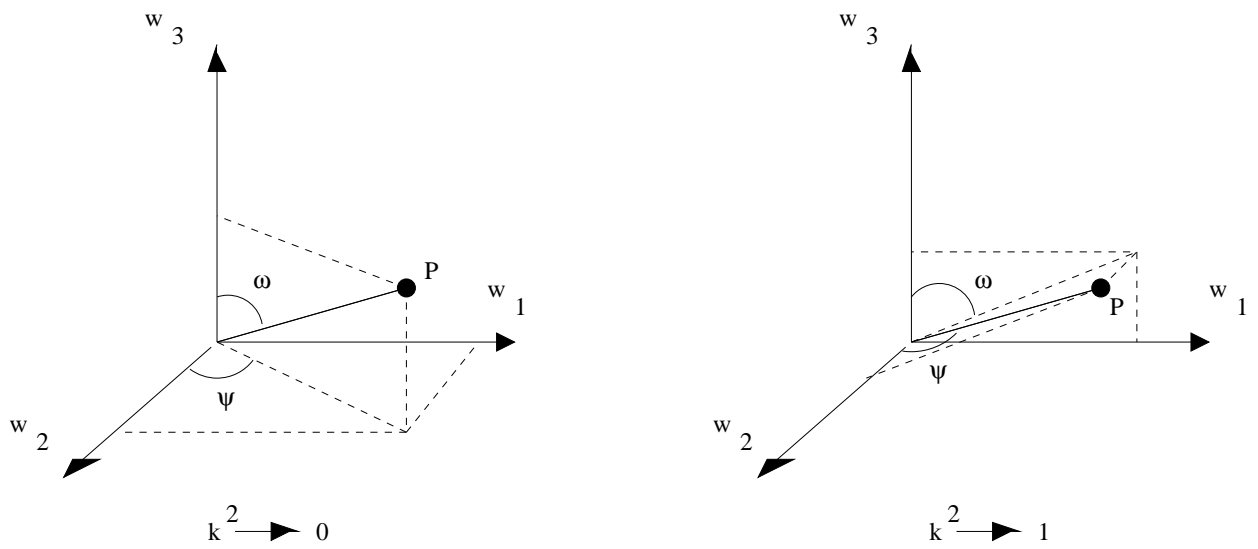


Figura 3.4: Rappresentazione asimmetrica (a sinistra, in cui l'asse di quantizzazione è w_3) e simmetrica (a destra, con asse di quantizzazione w_2). Le due rappresentazioni vengono individuate come i casi limite di quella in coordinate coniche rispettivamente per valori del parametro $k^2 = 0$ e $k^2 = 1$. Dalla figura si può notare come varino gli angoli ψ e ω al variare di k^2 , mentre i loro intervalli di definizione non dipendono dal parametro (vedi eq. 1.17).

Capitolo 4

Tre corpi nello spazio

Il problema relativo allo spazio tridimensionale si discosta abbastanza da quello nel piano prima di tutto per la dimensionalita' che ovviamente aumenta, ma anche per altre particolarita' che noteremo in seguito, specie nel caso $J = 0$.

4.1 $J = 0$

Nel caso generale $J \neq 0$ questo problema puo' essere descritto da due vettori tridimensionali (ad esempio i vettori di Jacobi descritti nel capitolo precedente), ed attraverso l' utilizzo di coordinate di tipo ipersferico si possono rappresentare le coordinate di questi vettori come un iperraggio e cinque iperangoli, cioe' una sfera S_5 , le cui parametrizzazioni saranno le orbite del gruppo delle rotazioni in sei dimensioni $O(6)$. Quando il momento angolare totale e' nullo pero', si puo' ancora una volta sfruttare lo sfrondamento degli alberi simmetrici, ed in questo caso avremo che il problema risultera' ristretto alla meta' della sfera S_2 (il motivo della differenza con il caso planare lo abbiamo gia' descritto nel capitolo scorso) o, in maniera piu' rigorosa, possiamo dire che il manifold descritto dall' albero in figura 4.1 e' una sfera S_3 in cui una coordinata (t) e' stata posta uguale a zero.

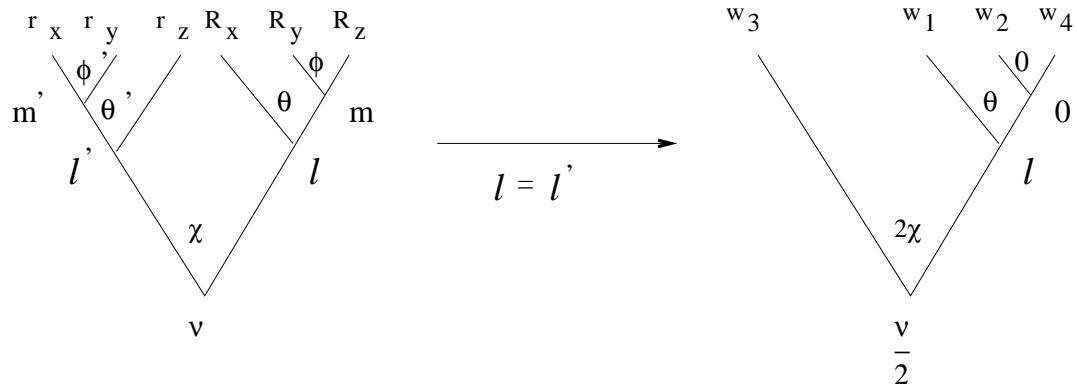


Figura 4.1: Lemma dello sfondamento per tre corpi nello spazio.

Le due parametrizzazioni alternative utilizzate di solito per questo problema sono la simmetrica e la asimmetrica.

4.1.1 Coordinate asimmetriche

Sono le armoniche di S_3 che derivano dalle coordinate sferiche (come illustrato nel capitolo 1) e la loro espressione analitica e' data da:

$$Y_{\nu j l}(\Omega_5) = Y_{\frac{\nu}{2} l}(2\chi, \theta, 0) \quad (4.1)$$

4.1.2 Coordinate simmetriche

Queste emergono invece dalle coordinate di tipo cilindrico e le autofunzioni sono le funzioni D di Wigner:

$$Y_{\nu j l}(\Omega_5) = D_{\frac{\nu}{4} \frac{\sigma}{4}}^{\frac{\nu}{4}}(4\Theta, 2\Phi, 0) \quad (4.2)$$

4.1.3 Connessione tra le basi

Possono essere calcolate in base ai coefficienti di *timber* dei vari alberi, ed il risultato finale sara' [24]

$$Y_{\frac{\nu}{2}, l, m}(2\chi, \theta, \phi) = \sum_{\frac{\sigma}{2}=-l}^l (-)^{\frac{\nu}{2}-m+\frac{\sigma}{2}} (i)^{l+m} \left\langle \frac{\nu}{4}, \frac{m-\frac{\sigma}{4}}{2}; \frac{\nu}{4}, \frac{m+\frac{\sigma}{4}}{2} \mid lm \right\rangle \times \quad (4.3)$$

$$\times (-)^{\frac{\sigma}{2}} \left(\frac{\frac{\nu}{2}+1}{2\pi^2} \right)^{\frac{1}{2}} D_{\frac{\nu}{4}+\frac{m}{2}, \frac{\sigma}{4}+\frac{m}{2}}^{\frac{\nu}{4}}(-2\Phi - \phi, 4\Theta, 2\Phi - \phi)$$

4.1.4 Coordinate ellittiche cilindriche

Il Laplaciano sulla sfera puo' anche essere espresso in coordinate ellittiche cilindriche (I o II) ed in questo caso le sue autofunzioni saranno delle armoniche ellissoidali:

$$Y_{\nu j l}(\Omega_5) = \mathcal{E}_{\lambda 0}^{\nu}(\psi, \omega, 0) \quad (4.4)$$

come descritto nel capitolo 1

4.2 $J > 0$

4.2.1 Partizione dell' Hamiltoniano

Nel caso in cui si scelga di utilizzare la parametrizzazione simmetrica per la descrizione del problema, abbiamo un operatore di Casimir dipendente dai tre angoli di Eulero α_I, β_I e γ_I , che individuano la posizione del sistema ruotante qui adottato, e dagli angoli interni Θ e Φ . In forma esplicita [56]

$$\hat{\Lambda}^2(\Omega_5) = -\frac{1}{\sin 4\Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \sin 4\Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} - \frac{1}{\cos^2 2\Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} + \frac{4\hat{J}_z^2}{\sin^2 2\Theta}$$

$$- \frac{2i \sin 2\Theta}{\cos^2 2\Theta} \hat{J}_y \frac{\partial}{\partial \Phi} + \frac{\hat{J}_y^2}{\cos^2 2\Theta} + \frac{\hat{J}_x^2 - \hat{J}_x^2}{\cos^2 \Theta} \quad (4.5)$$

dove \hat{J}_x, \hat{J}_y e \hat{J}_z sono le proiezioni del momento angolare nucleare totale nel sistema degli Assi Principali d'Inerzia (con z asse di minima inerzia), e dipendono quindi dagli angoli di Eulero.

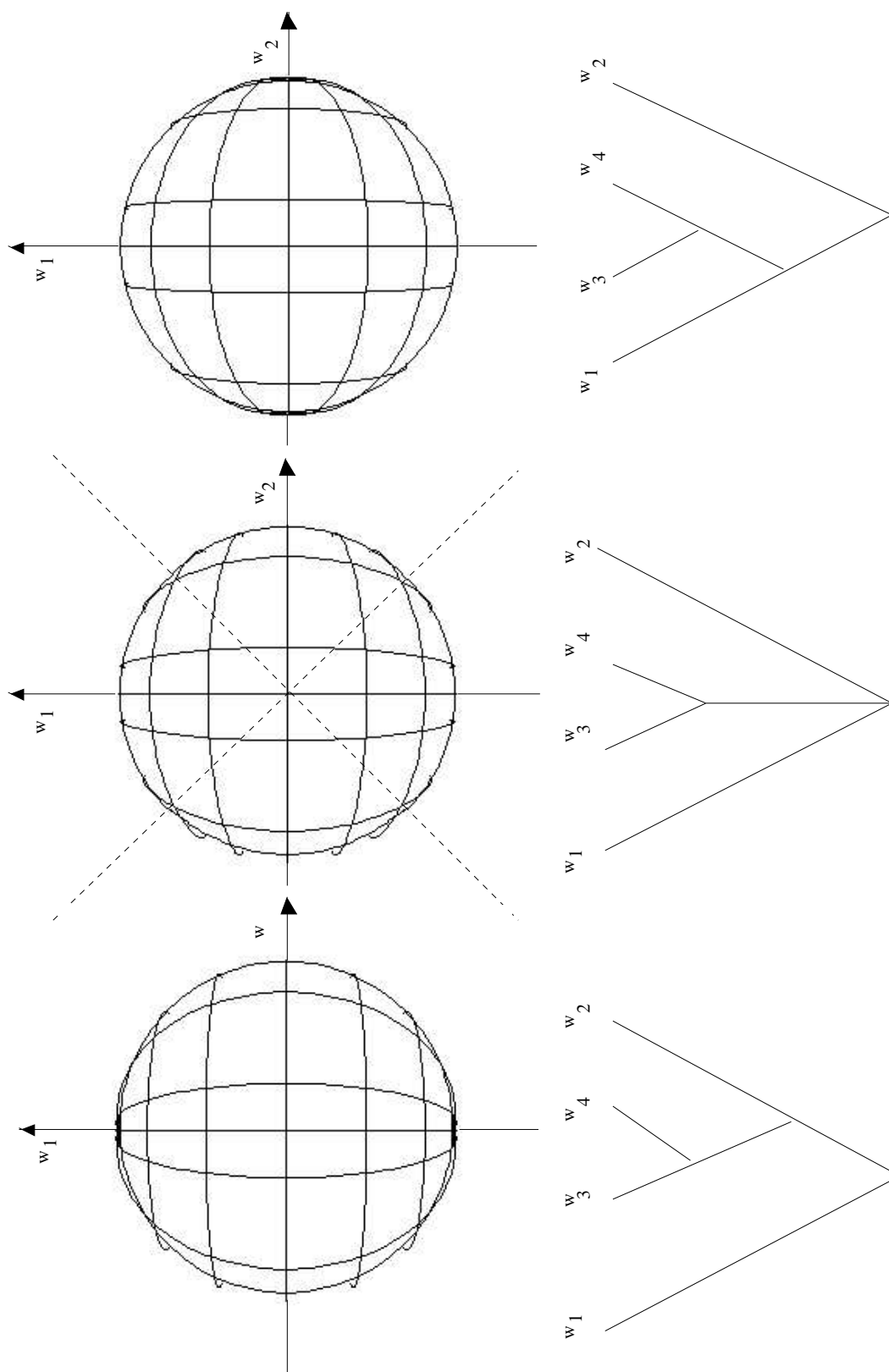


Figura 4.2: Rappresentazione delle coordinate ellittiche II per $J = 0$ (sulla semisfera di S_2) per differenti valori del parametro k^2

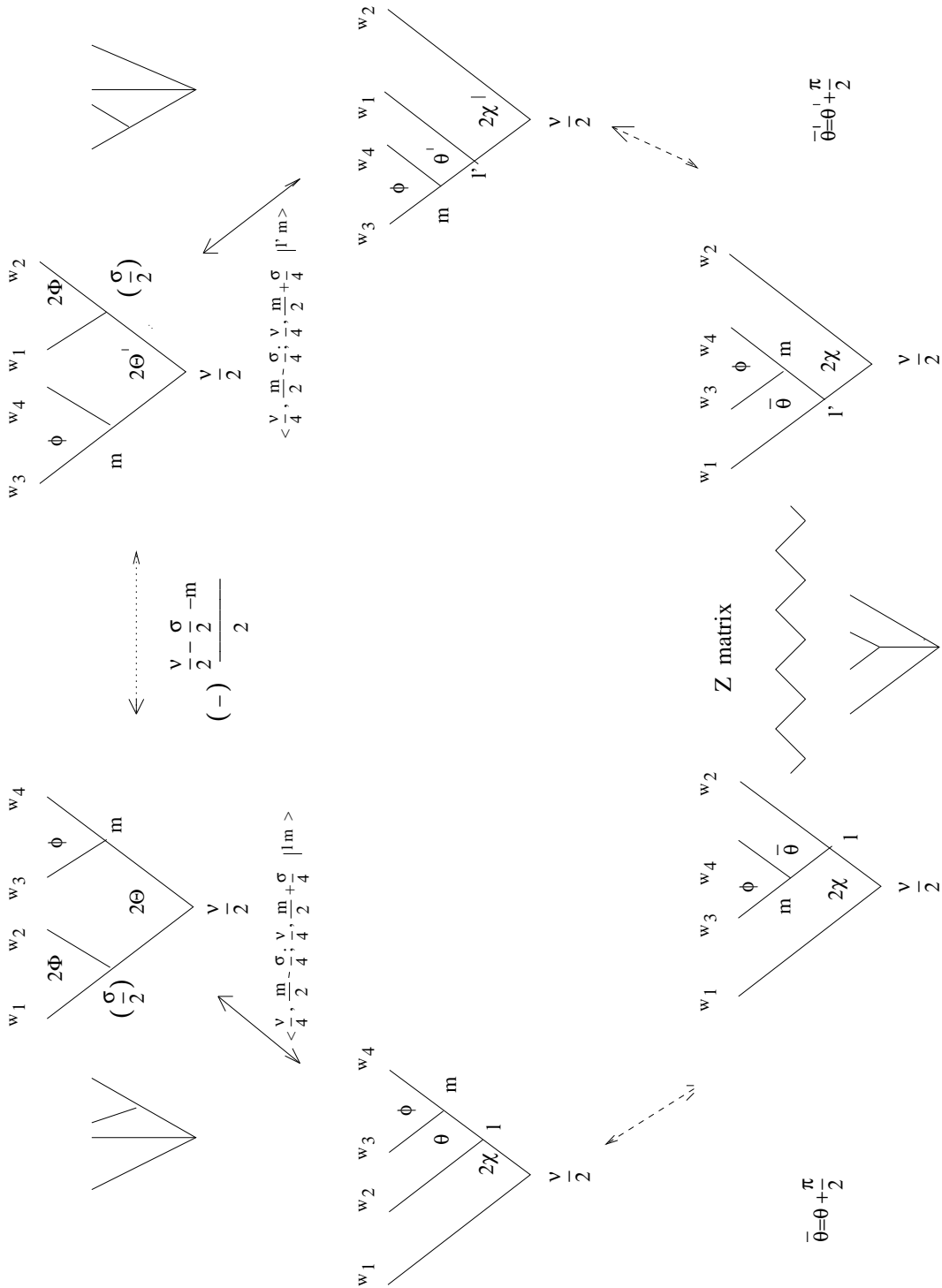


Figura 4.3: Rappresentazione alternativa delle relazioni tra le coordinate su S_3 e coefficienti di timber che esprimono il passaggio da una base all' altra. Questi sono coefficienti di Clebsch-Gordan (in alto) che relazionano le coordinate sferiche e cilindriche e la matrice Z [24] che rappresenta il passaggio tra i due alberi di tipo sferico in basso. La linea punteggiata esprime una fase, mentre quelle tratteggiate evidenziano come ci sia identita' fra i due alberi che da esse sono congiunti

L'operatore di Casimir si può scrivere nella forma[28]

$$\hat{\Lambda}^2(\Omega_5) = \hat{\Lambda}_0(\Omega_3) + \hat{\mathcal{R}} \quad (4.6)$$

dove $\hat{\Lambda}_0(\Omega_3)$ è un operatore di momento iperangolare sulla sfera tetradimensionale S^3 , e raccoglie i primi due termini in Θ e Φ e il quadrato della sola componente z del \hat{J} ; il resto $\hat{\mathcal{R}}$, invece, contiene il termine di Coriolis, che accoppia i moti rotazionali con Φ , e i restanti termini rotazionali. Le autofunzioni dell' operatore

$$\hat{\Lambda}_0(\Omega_3) \quad (4.7)$$

sono le funzioni

$$D^{\frac{\nu}{2} - \frac{\sigma}{4} \frac{m}{2} + \frac{\sigma}{4}}(2\Phi, 4\Theta, 2\gamma_I) \quad (4.8)$$

In cui m rappresenta la proiezione di J nel sistema degli assi principali d' inerzia. E' possibile poi sviluppare la funzione d' onda su questa base. L' Hamiltoniano viene diagonalizzato con i soli termini relativi a $\hat{\Lambda}_0(\Omega_3)$, mentre gli accoppiamenti vengono trasferiti in fase di propagazione.

La stessa cosa si può fare in coordinate ellittiche cilindriche, anche se la forma dell' hamiltoniano risulterà un po' piu' complicata. Utilizzando lo stesso tipo di partizione si avrà che l' espressione di $\hat{\Lambda}_0^2$ potrà essere scritta nei due sistemi di coordinate ellittiche cilindriche nei modi seguenti.

In coordinate ellittiche cilindriche I il Laplaciano sulla sfera S_3 può essere espresso come:

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}^2 = & \frac{1}{\cos \omega} \frac{1 - k'^2 \cos^2 \omega}{k^2 \sin^2 \psi + k'^2 \sin^2 \omega} \left[\frac{\partial}{\partial \psi} \cos \omega \frac{1 - k^2 \cos^2 \psi}{\sqrt{1 - k'^2 \cos^2 \omega}} \frac{\partial}{\partial \psi} + \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial \omega} \cos \omega \sqrt{1 - k'^2 \cos^2 \omega} \frac{\partial}{\partial \omega} \right] + \frac{1}{\cos^2 \omega^2 (1 - k^2 \cos^2 \psi)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned} \quad (4.9)$$

L' elemento di volume risulta invece:

$$\cos \omega \frac{k^2 \sin^2 \psi + k'^2 \sin^2 \omega}{\sqrt{1 - k'^2 \cos^2 \omega}} d\psi d\omega d\phi \quad (4.10)$$

Calcolando queste due grandezze in coordinate ellittiche cilindriche II si ha che

$$\hat{\Lambda}^2 = \frac{1}{\sin \psi \sin \omega} \frac{\sqrt{(1 - k^2 \cos^2 \psi)(1 - k'^2 \cos^2 \omega)}}{k^2 \sin^2 \psi + k'^2 \sin^2 \omega} \left[\frac{\partial}{\partial \psi} \sin \psi \sin \omega \sqrt{\frac{1 - k^2 \cos^2 \psi}{1 - k'^2 \cos^2 \omega}} \frac{\partial}{\partial \psi} + \frac{\partial}{\partial \omega} \sin \psi \sin \omega \sqrt{\frac{1 - k'^2 \cos^2 \omega}{1 - k^2 \cos^2 \psi}} \frac{\partial}{\partial \omega} \right] + \frac{1}{(\sin \psi \sin \omega)^2} \frac{\partial^2}{\phi^2} \quad (4.11)$$

mentre l' elemento di volume e':

$$\sin \psi \sin \omega \frac{k^2 \sin^2 \psi + k'^2 \sin^2 \omega}{\sqrt{(1 - k^2 \cos^2 \psi)(1 - k'^2 \cos^2 \omega)}} d\psi d\omega d\phi \quad (4.12)$$

L'operatore $\hat{\mathcal{R}}$ risultera' invece, in entrambe le coordinate:

$$-\frac{\sin \psi \sin \omega}{1 - \sin^2 \psi \sin^2 \omega} \left[\frac{\partial}{\partial \psi} \cos^{-1} \left(\frac{\cos \psi \sqrt{1 - k'^2 \cos^2 \omega}}{\sqrt{1 - \sin^2 \psi \sin^2 \omega}} \frac{\partial}{\partial \gamma} + \frac{\partial}{\partial \omega} \cos^{-1} \left(\frac{\cos \psi \sqrt{1 - k'^2 \cos^2 \omega}}{\sqrt{1 - \sin^2 \psi \sin^2 \omega}} \frac{\partial}{\partial \gamma} \right) \right] + \frac{\hat{J}_x}{\sin^2 \psi \sin^2 \omega} + \frac{\hat{J}_x}{1 - \sin^2 \psi \sin^2 \omega} \quad (4.13)$$

In cui il primo termine che contiene le derivate miste in ψ, γ ed in ω, γ e' il termine di Coriolis, mentre gli altri due sono i rimanenti termini rotazionali, funzione degli altri angoli di Eulero α, β . E' da sottolineare il fatto che, espandendo le armoniche ellissoidali sulle funzioni D di Wigner (autofunzioni della parametrizzazione simmetrica), e' possibile lasciare il termine di Coriolis in funzione di Φ , con conseguente semplificazione nell' espressione dell' hamiltoniano e, soprattutto, analiticita' delle derivate prime rispetto alla variabile Φ .

4.2.2 Distanze

Le formule delle distanze tra le tre particelle, ricavate in [3]

$$\begin{aligned} r_{AB} &= \frac{d\rho}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{w_3}{\rho}} \\ r_{AC} &= \frac{\rho}{d\sqrt{2}} \sqrt{1 + B^2} \sqrt{1 + \frac{w_3(B^2 - 1)}{\rho(B^2 + 1)} + \frac{w_1(2B)}{\rho(B^2 + 1)}} \\ r_{AC} &= \frac{\rho}{d\sqrt{2}} \sqrt{1 + A^2} \sqrt{1 + \frac{w_3(A^2 - 1)}{\rho(A^2 + 1)} + \frac{w_1(2A)}{\rho(A^2 + 1)}} \end{aligned} \quad (4.14)$$

possono essere scritte in funzione dei polinomi di Lamé' con $\frac{\nu}{2} = 1$ e gli altri due numeri quantici nulli, con la stessa procedura usata in [5] :

$$\begin{aligned}
r_{AB} &= \frac{d\rho}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{dE_{00}^1(\alpha) sE_{00}^1(\beta)}{\rho}} & (4.15) \\
r_{AC} &= \frac{\rho}{d\sqrt{2}} \sqrt{1 + B^2} \sqrt{1 + \frac{dE_{00}^1(\alpha) sE_{00}^1(\beta)(B^2 - 1)}{\rho(B^2 + 1)} + \frac{sE_{00}^1(\alpha) dE_{00}^1(\beta)(2B)}{\rho(B^2 + 1)}} \\
r_{AC} &= \frac{\rho}{d\sqrt{2}} \sqrt{1 + A^2} \sqrt{1 + \frac{dE_{00}^1(\alpha) sE_{00}^1(\beta)(A^2 - 1)}{\rho(A^2 + 1)} + \frac{sE_{00}^1(\alpha) dE_{00}^1(\beta)(2A)}{\rho(A^2 + 1)}}
\end{aligned}$$

In queste formule si ha che $d = \sqrt{\frac{\mu_{k,ii}}{\mu}}$ e' un fattore di scala. Si e' utilizzata qui la notazione in [30] per esprimere i polinomi di Lamé'.

4.2.3 Antisimmetrizzazione delle autofunzioni

E' possibile ricavare la dipendenza delle nostre autofunzioni dalle permutazioni in modo agevole, poiche', non essendoci dipendenza degli angoli di Eulero dalle permutazioni binarie , gli unici effetti si hanno sugli angoli dello spazio interno. Andando ad esaminare piu' in dettaglio l' effetto di questo operatore di permutazione sulle armoniche ellissoidali si trova che:

$$\Pi | \psi \omega \phi \rangle \rightarrow \pm | \psi \omega + \pi \phi \rangle \quad (4.16)$$

La dipendenza dall' angolo ω che abbiamo ricavato rende pero' problematico ricavare quali sono le autofunzioni simmetriche ed antisimmetriche, perche' la dipendenza della simmetria delle armoniche dal numero quantico λ non e' elementare. E' possibile comunque evitare questo problema perche' per il calcolo delle autofunzioni noi non faremo altro che sviluppare le armoniche ellissoidali in armoniche ipersferiche (vedi capitolo 5). In particolare, se l' espansione viene condotta sulle funzioni D di Wigner sara' possibile sfruttare la semplicita' con cui queste possono essere antisimmetrizzate [57] dato che l' operatore di parita'

vi agisce nel seguente modo:

$$\hat{\Pi} | \Theta \Phi \phi \rangle \rightarrow \pm | \Theta - \Phi \phi \rangle \quad (4.17)$$

A questo punto e' chiaro che la dipendenza delle D da Φ e' come un esponenziale immaginario. Si dovrebbero dunque combinare linearmente quelle con valori opposti di $\frac{\sigma}{2}$. E' possibile dimostrare [9] che l' autofunzione simmetrica si ottiene sommando due funzioni di Wigner con $\frac{\sigma}{2}$ opposto, mentre quella antisimmetrica si ottiene sottraendole.

4.3 Altre applicazioni delle coordinate di tipo ellittico

Coordinate di questo tipo sono state applicate da Tolstikhin *et al* (si vedano Ref.[4]-[18]). Consideriamo la loro notazione definendo

$$\begin{aligned} \xi_i &= \chi_{i+1} + \chi_{i+2} \\ \eta_i &= \chi_{i+1} - \chi_{i+2} \\ 2\gamma &\leq \xi \leq 2\pi - 2\gamma \\ -2\gamma &\leq \eta \leq 2\gamma \end{aligned} \quad (4.18)$$

(si veda [4])

$$\begin{aligned} x &= x(\xi_i, \eta_i) \\ y &= y(\xi_i, \eta_i) \\ z &= z(\xi_i, \eta_i) \end{aligned} \quad (4.19)$$

Possiamo dimostrare l' equivalenza del nostro sistema di coordinate e di quello utilizzato in [4]-[18] nel modo seguente:

$$\begin{aligned} z_{i+1} &= \cos \chi_{i+1} = \cos \frac{\xi_i + \eta_i}{2} \\ z_{i+2} &= \cos \chi_{i+2} = \cos \frac{\xi_i - \eta_i}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} z_{i+2} \\ x_{i+2} \\ y_{i+2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos 2\gamma & -\sin 2\gamma & 0 \\ \sin 2\gamma & \cos 2\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{i+1} \\ x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} z_{i+2} &= z_{i+1} \cos 2\gamma + x_{i+1} \sin 2\gamma = \cos 2\gamma \cos \frac{\xi_i + \eta_i}{2} + x_{i+1} \sin 2\gamma \\ x_{i+2} &= \frac{1}{\sin 2\gamma} \left[\cos \frac{\xi_i - \eta_i}{2} - \cos 2\gamma \cos \frac{\xi_i + \eta_i}{2} \right] \end{aligned}$$

Se poniamo l'asse z a meta' tra i due canali di reazione a e b (in questo modo compiamo una rotazione di un angolo γ in senso antiorario partendo da z_{i+1})

$$\begin{bmatrix} z \\ x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{i+1} \\ x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

$$z = \frac{\cos \frac{\xi_i + \eta_i}{2} + \cos \frac{\xi_i - \eta_i}{2}}{2 \cos \gamma} = \frac{\cos \frac{\xi}{2} \cos \frac{\eta}{2}}{\cos \gamma}$$

$$x = \frac{\cos \frac{\xi_i - \eta_i}{2} - \cos \frac{\xi_i + \eta_i}{2}}{2 \cos \gamma} = \frac{\sin \frac{\xi}{2} \sin \frac{\eta}{2}}{\sin \gamma}$$

I risultati finali sono

$$\begin{aligned} x &= \frac{\sin \frac{\xi}{2} \sin \frac{\eta}{2}}{\sin \gamma} \\ y &= \frac{\sqrt{(\cos^2 \gamma - \cos^2 \frac{\xi}{2})(\sin^2 \gamma - \sin^2 \frac{\eta}{2})}}{\cos \gamma \sin \gamma} \\ z &= \frac{\cos \frac{\xi}{2} \cos \frac{\eta}{2}}{\cos \gamma} \end{aligned}$$

Oppure, utilizzando gli angoli interi :

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{2k'} \sqrt{(1 - \cos \xi)(1 - \cos \eta)} \\ y &= \frac{1}{2kk'} \sqrt{(2k^2 - 1 - \cos \xi)(1 + \cos \eta - 2k^2)} \\ z &= \frac{1}{2k} \sqrt{(1 + \cos \xi)(1 + \cos \eta)} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Le formule di equivalenza tra i due set di coordinate sono quindi:

$$\begin{aligned}\cos \gamma &= k \\ \cos \xi &= 2k^2 \sin^2 \psi - 1 \\ \cos \eta &= 1 - 2k'^2 \sin^2 \omega\end{aligned}\tag{4.23}$$

L' ottima idea che sta alla base dei lavori del gruppo Tolstikhin [4] consiste nell' aver posto il parametro k in modo tale che questo potesse essere identificato con il coseno dell' angolo di skewing. Questa scelta si e' rivelata molto utile [11]-[18] sotto diversi punti di vista; ad esempio si ottiene in questo modo una quasi separabilita' tra le due variabili angolari sulla sfera (ξ, η) per $\gamma \rightarrow 0$ in modo da poter utilizzare una approssimazione di tipo adiabatico .

Questo fatto emerge anche in un altro tipo di problema, quello dell' atomo di idrogeno immerso in un campo magnetico debole [22],[23]; in questo vediamo emergere ancora una volta la stretta relazione che c' e' tra i due problemi [24]. Quando si separa l' equazione di Schrödinger per l' atomo d' idrogeno in campo magnetico debole in coordinate ellittiche-cilindriche I (la separazione tra le due variabili e' valida fino al secondo ordine della teoria delle perturbazioni) si ha la comparsa di due tipi di moto per le due variabili: uno che possiamo definire vibrazionale e l' altro rotazionale, che avvengono in differenti regioni dello spazio e l' emergere di una nuova costante del moto [54] , ed e' appunto questa caratteristica che permette la separabilita' approssimata sfruttata in [14]. C' e' pero', nella definizione delle coordinate date dal gruppo Tolstikhin, una difficolta' che emerge agli estremi dell' intervallo di definizione del parametro, cioe' quando $\gamma = 0$, $\gamma = \frac{\pi}{2}$, perche' in questi due casi l' intervallo di definizione delle due variabili ξ ed η degenera. Cio' non si verifica con la nostra definizione delle coordinate, valida anche agli estremi dell' intervallo di definizione di γ , perche' ψ, ω non dipendono dal parametro. La stessa cosa si verifica per le espansioni in armoniche ipersferiche che daremo nel capitolo 5.

4.3.1 Notazioni

Possiamo notare che lo scalaggio dei vettori di Jacobi e' lo stesso nei due lavori, ed e' definito come

$$\mu = \sqrt{\frac{m_A m_B m_C}{m_A + m_B + m_C}} \quad (4.24)$$

Nella tabella seguente facciamo un breve sommario delle notazioni utilizzate nei lavori di Aquilanti *et al.* e di Tolstikhin *et al.*, segnalando le differenze, ove necessario

Aquilanti et al.[3] – [6] *Tolstikhin et al.*[4]

<i>Vettori di Jacobi</i>	X_k	x_k
	x_k	y_k
<i>Definizione di χ</i>	$\tan \chi' = \frac{X_k}{x_k}$	$\tan \frac{\chi}{2} = \frac{y_k}{x_k}$
<i>Altri simboli</i>	$d = \sqrt{\frac{\mu_{k,ij}}{\mu}}$	
	A, B [6]	p_i^+, p_i^- [4]
	$\chi' = \frac{\pi}{2} + \frac{\chi}{2}$	
<i>Iperraggio</i>	$\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \neq 1$	1

Possiamo dimostrare l'equivalenza delle formule delle distanze

$$\begin{aligned}
r_{AB} &= \frac{d\rho}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{z_i}{\rho}} \\
r_{AC} &= \frac{\rho}{d\sqrt{2}} \sqrt{1 + B^2} \sqrt{1 + \frac{z(B^2 - 1)}{\rho(B^2 + 1)} + \frac{x(2B)}{\rho(B^2 + 1)}} \\
r_{AC} &= \frac{\rho}{d\sqrt{2}} \sqrt{1 + A^2} \sqrt{1 + \frac{z(A^2 - 1)}{\rho(A^2 + 1)} + \frac{x(2A)}{\rho(A^2 + 1)}}
\end{aligned}$$

(questa e' la notazione da noi utilizzata in [3]) e

$$\begin{aligned}
r_{23} &= \frac{R}{\sqrt{\mu_1}} \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \\
r_{31} &= \frac{R}{\sqrt{\mu_2}} \sin\left(\frac{\xi - \eta}{4}\right) \\
r_{12} &= \frac{R}{\sqrt{2\mu_3}} \sqrt{1 + p^+ \cos(\eta/2) \cos(\xi/2) - p^- \sin(\eta/2) \sin(\xi/2)}
\end{aligned} \tag{4.25}$$

(questa seconda notazione appartiene al gruppo Tolstikhin *et al.* [4]) Utilizzando i tre diversi possibili arrangiamenti della reazione, cioe' ruotando il sistema di riferimento prima di $2\gamma_1$ e poi di $2\gamma_2$ possiamo mettere le tre distanze tutte nella stessa forma

$$\begin{aligned}
r_{AB} &= \frac{d\rho}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{z_i}{\rho}} \\
r_{AC} &= \frac{d\rho}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{z_{i+1}}{\rho}} = \rho \sqrt{\frac{1 + \cos 2\chi'_{i+1}}{2}} = \rho \sqrt{\frac{1 - \cos \chi_{i+1}}{2}} = \rho \sin \frac{\chi_{i+1}}{2} = \rho \sin \frac{\xi_i + \eta_i}{4} \\
r_{AC} &= \frac{d\rho}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{z_{i+2}}{\rho}} = \rho \sqrt{\frac{1 + \cos 2\chi'_{i+2}}{2}} = \rho \sqrt{\frac{1 - \cos \chi_{i+2}}{2}} = \rho \sin \frac{\chi_{i+2}}{2} = \rho \sin \frac{\xi_i - \eta_i}{4}
\end{aligned}$$

dove abbiamo fatto uso di alcune delle differenze nelle notazioni illustrate precedentemente e del fatto che con il nostro scalaggio $\frac{1}{d}$ dei vettori di Jacobi $x_k = \frac{1}{d}r_k$ (si veda [3]) possiamo semplificare il parametro d .

Capitolo 5

Equazione di Lamé'

5.1 Introduzione

L'equazione di Lamé' emerge in fisica matematica quando si separa l'equazione di Laplace

$$\hat{\Delta}^2 \psi = 0 \tag{5.1}$$

in coordinate coniche nello spazio euclideo tridimensionale R^3 ed e' esprimibile in molti modi, fra cui quello forse piu' compatto si ottiene utilizzando le funzioni ellittiche di Jacobi

$$\frac{d^2 w}{dz^2} + [h - l(l+1)k^2 \operatorname{sn}^2 z]w = 0 \tag{5.2}$$

la caratteristica saliente di questa equazione e' quella di avere coefficienti periodici, per la precisione doppiamente periodici (le funzioni di Jacobi appunto, e questo si ripercuoterà' ovviamente sulle soluzioni, di cui parleremo nella sezione 5.4.).

5.2 Separazione delle variabili sulla sfera S_2

Questa equazione deriva dall'equazione di Heun quando si pongono le differenze degli esponenti caratteristici nei punti di singolarita' finita uguali ad $\frac{1}{2}$ (in realta'

gran parte delle equazioni importanti in fisica matematica sono casi particolari di equazioni piu' generali, ottenute facendo questa posizione [2]). Pur essendo molto meno studiata, ad esempio, rispetto alle equazioni di tipo ipergeometrico, questa equazione emerge in molte branche della fisica [1] ed ha ricevuto negli ultimi anni una grande attenzione da parte di fisici teorici e matematici [42]. Questo e' in parte dovuto anche al fatto che l' eq. di Lamé emerge come una generalizzazione diretta dell' equazione ipergeometrica di Gauss e (in un modo che vedremo in seguito) dell' equazione d' onda sferoidale.

Infatti l' equazione di Lamé presenta quattro singolarita' regolari: tre finite ed una per $z \rightarrow \infty$ e puo' essere classificata, secondo la notazione di Ince [2], come $\{3,1,0\}$, dove il primo numero indica il numero di punti di singolarita' regolare in cui la differenza degli esponenti caratteristici e' pari ad $\frac{1}{2}$, il secondo gli altri punti di singolarita' regolare, ed il terzo quelli di singolarita' irregolare. L' equazione ipergeometrica

$$z(1-z)\frac{d^2w}{dz^2} + \{c - (a+b+1)z\}\frac{dw}{dz} \quad (5.3)$$

deriva da quella di Lamé per confluenza di due singolarita' finite, e puo' essere descritta come $\{1,2,0\}$. Effettuando nell' ultima equazione una sostituzione di variabili $t^2 = z$ si ottiene l' equazione associata di Legendre

$$\frac{dw}{dt}(1-t^2)\frac{dw}{dt} + n(n+1) - \frac{m^2}{1-t^2} \quad (5.4)$$

ed e' semplice verificare come, nel limite $k^2 \rightarrow 1$ ponendo $h = n(n+1)k^2 - m^2$ si ottiene immediatamente l' equazione sopra descritta, mentre per l' altra variabile sara' $k'^2 \rightarrow 0$, facendo il limite della forma ellittica dell' eq. di Lamé si ottiene $\text{sn}(z) = \sin z$

$$\frac{d^2w}{dz^2} + hw = 0 \quad (5.5)$$

Il prodotto delle soluzioni delle due e' chiaramente un' armonica sferica.

Questo non puo' ovviamente sorprendere, visto che il limite delle coordinate coniche, sia per $k^2 \rightarrow 1$ che per $k^2 \rightarrow 0$ sono le coordinate sferiche, che si ottengono

quando i due assi che contengono i fuochi delle coordinate coniche sulla sfera confluiscono a dare l'asse polare (w_1 o w_3 a seconda che $k^2 \rightarrow 0$ oppure $k^2 \rightarrow 1$), unica singolarita' delle coordinate di tipo sferico.

5.3 Separazione delle variabili su S_3

Il caso che si verifica separando l'equazione di Laplace sulla sfera tetradimensionale e' ancora piu' interessante, e permette di fare considerazioni aggiuntive sui limiti dei vari sistemi di coordinate. Su S_3 l'equazione di Laplace si puo' scrivere come:

$$\hat{\Lambda}^2 \psi = -\frac{\nu}{2} \left(\frac{\nu}{2} + 4 \right) \psi \quad (5.6)$$

dove $-\frac{\nu}{2}(\frac{\nu}{2} + 4)$ e' l'autovalore dell'operatore di Casimir

In coordinate ellittiche cilindriche di tipo I l'espressione del Laplaciano e' quella di eq. 4.9:

mentre le equazioni separate per le due variabili non banali, cioe' quelle che individuano la forcilla ternaria, diventano, sempre in coordinate ellittiche cilindriche I:

$$\frac{d^2 E(\alpha)}{d\alpha^2} + \frac{\text{sn}(\alpha)\text{dn}(\alpha)}{\text{cn}(\alpha)} \frac{dw}{\alpha} + \left(-\frac{\nu}{2} \left(\frac{\nu}{2} + 4 \right) k^2 \text{sn}^2(\alpha) - \frac{m^2}{\text{sn}^2(\alpha)} \right) E(\alpha) = 0 \quad (5.7)$$

$$\frac{d^2 E(\beta)}{d\beta^2} + \frac{k'^2 \text{sn}(\beta)\text{cn}(\beta)}{\text{dn}(\beta)} \frac{dw}{\beta} + \left(-\frac{\nu}{2} \left(\frac{\nu}{2} + 4 \right) \text{dn}^2(\beta) - \frac{k^2 m^2}{\text{dn}^2(\beta)} \right) E(\beta) = 0 \quad (5.8)$$

oppure, esprimendole nelle coordinate ψ, ω da noi definite in precedenza, cioe' applicando la sostituzione

$$\text{sn}(\alpha) = \sin \psi \quad (5.9)$$

ed operando allo stesso modo nella seconda equazione, si ottiene:

$$\left\{ \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \psi} \frac{d}{d\psi} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \psi} \frac{d}{d\psi} + \tan \psi (1 - k^2 \sin^2 \psi) \frac{d}{d\psi} + \right.$$

$$-\frac{\nu}{2}\left(\frac{\nu}{2} + 4\right)k^2 \sin^2 \psi - \frac{m^2}{\sin^2 \psi} + b\}u = 0 \quad (5.10)$$

$$\left\{\sqrt{1 - k'^2 \sin^2 \omega} \frac{d}{d\omega} \sqrt{1 - k'^2 \sin^2 \omega} \frac{d}{d\omega} - k'^2 \sin \omega \cos \omega \frac{d}{d\omega} + \right. \\ \left. + \frac{\nu}{2}\left(\frac{\nu}{2} + 4\right)(1 - k'^2 \sin^2 \omega) + \frac{k^2 m^2}{1 - k'^2 \sin^2 \omega} + b\right\}v = 0 \quad (5.11)$$

mentre quelle in coordinate ellittiche cilindriche II possono essere ricondotte a queste attraverso un semplice cambiamento di variabile:

$$k \operatorname{sn}(\alpha) \rightarrow \operatorname{cn}(\alpha) \quad (5.12)$$

$$\operatorname{dn}(\beta) \rightarrow -\frac{ik'}{k} \operatorname{cn}(\beta) \quad (5.13)$$

Queste equazioni sono denominate in letteratura [25] equazioni associate di Lamé' e sono descrivibili, secondo la notazione di Ince, come $\{4,0,1\}$ perché hanno quattro singolarità finite ed una regolare quando la variabile va ad infinito. Le forme limite delle coordinate ellittiche cilindriche al variare del parametro k sono state già discusse. È possibile dimostrare come [4] [18], introducendo delle variabili locali di forma molto simile a quelle che si utilizzano nella costruzione delle coordinate sferoidali, al tendere della curvatura della sfera ad infinito in realtà l'equazione associata di Lamé' si riduca alla equazione d'onda sferoidale, che emerge appunto nella separazione dell'equazione di Laplace in coordinate sferoidali nello spazio euclideo tridimensionale E^3 . Ciò è avvalorato anche dal fatto che i due tipi di coordinate (ellittiche cilindriche in questo caso di tipo I e sferoidali) interpolano tra sistemi di coordinate dello stesso tipo [9] ed a loro volta sono ottenute facendo il limite di coordinate dello stesso tipo, cioè le coordinate ellissoidali, cosa che è stata dimostrata sulla sfera S_3 tramite gli operatori nel capitolo scorso ed è possibile dimostrare qui per le coordinate sferoidali riferendosi alla forma algebrica dell'eq. di Lamé' generalizzata, che emerge quando si separa in coordinate ellissoidali in E^3 (utilizzate ad esempio in [43] nello scattering da potenziale separabile in queste coordinate) l'eq. di Laplace :

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} - (a + bk^2 \operatorname{sn}^2(z) + qk^4 \operatorname{sn}^4(z))\psi = 0 \quad (5.14)$$

oppure esprimendola in forma algebrica analogamente a quanto si e' fatto in precedenza per l' equazione di Lamé' ed in tal caso, applicando ai parametri a, b, q alcune manipolazioni algebriche, passando al limite per $k^2 \rightarrow 1$ si ottiene l' equazione d' onda sferoidale. Si vede dunque che i due tipi di coordinate hanno sostanzialmente un ruolo analogo in due spazi differenti (uno nello spazio euclideo convenzionale, l' altro sulla sfera tetradimensionale) e cio' rende conto del fatto che gli operatori sono molto simili. E' possibile dimostrare questo in maniera piu' formale ricorrendo alle contrazioni dell' algebra di Lie. In [39] Kalnins *et al.* hanno dimostrato come sia possibile ottenere le coordinate ellissoidali su E_3 partendo dalle coordinate ellissoidali sulla sfera tetradimensionale S_3 , facendo il limite, per il raggio della sfera che tende ad infinito dei generatori del gruppo $O(4)$ dati in eq. 1.20.

Se poniamo questi nella forma generale:

$$L_{kj} = X_k \frac{\partial}{\partial X_j} - X_j \frac{\partial}{\partial X_k} \quad k, j = 1, 2, 3, 4 \quad (5.15)$$

dove le X_i rappresentano le coordinate cartesiane, espresse come:

$$X_i^2 = \frac{\prod_{k=1}^3 (e_i - u_k)}{\prod_{k \neq i} (e_i - e_k)} \quad (5.16)$$

In questa equazione i parametri e_i sono i parametri delle coordinate ellissoidali (a, b, c, d in eq. 1.45) su S_3 , mentre con u_k abbiamo etichettato le coordinate sulla sfera. I set di operatori commutativi che caratterizzano questa base (la piu' generale di tutte) possono essere scritti nella forma:

$$I_l^{(S)} = \sum_{i>j} S_l L_{ij}^2 \quad (5.17)$$

dove gli S_l sono polinomi di ordine l nelle variabili e_l . Ora se introduciamo delle nuove coordinate (come in [39]):

$$x_i^2 = Rc^2 \frac{X_i^2}{X_4^2} \quad i = 1, 2, 3 \quad x_N = 1 \quad (5.18)$$

e facciamo il limite per $e_N = R \rightarrow \infty$ avremo che gli operatori L_{ij} si trasformano in:

$$\begin{aligned} L_{Nj} &= \frac{\partial}{\partial x_s} \\ L_{ij} \quad i \neq N \end{aligned} \quad (5.19)$$

questi sono i generatori del gruppo E_3 . Gli operatori commutativi di un set di coordinate in E_3 possono essere scritti come:

$$I^{(E)} = \sum_{i>j} S_{l-2} L_{ij}^2 + c^2 \sum_{i=0}^2 P_j^2 \quad (5.20)$$

Se facciamo il limite delle coordinate ellissoidali su S_3 per ottenere le coordinate ellittiche cilindriche (per esempio facendo tendere $e_2 = b \rightarrow 1$) otterremo solo un cambiamento dei coefficienti S_k nella definizione degli operatori commutativi. Questo non e' influenzato dall' operazione di limite sul raggio della sfera, visto che gli S_{l-1} polinomi che rimangono nell' espressione degli operatori in E_3 non contengono il parametro e_N (come si puo' vedere dalla loro espressione data in [39]). Quindi e' facile comprendere come le operazioni di limite condotte sulle coordinate ellissoidali su S_3 ed E_3 per ottenere rispettivamente le coordinate ellittiche cilindriche e quelle sferoidali corrispondano in realta' alla stessa operazione (perche' gli operatori mantengono la loro identita'). Possiamo spiegare il fatto che gli operatori

$$I^{(E)} = l^2 + 2qK_z, \quad I^{(S)} = l^2 + k^2 K_z^2 \quad (5.21)$$

(in cui abbiamo preso i generatori di S_3 nella forma 1.19 mentre per E_3 abbiamo posto $P_i^2 = K_i^2$) sono leggermente differenti per le coordinate ellittiche cilindriche e per quelle sferoidali notando che l' operatore K e' del primo ordine su S_3 , mentre e' del secondo ordine (cioe' coinvolge una derivata seconda) in E_3

Questo puo' aprire la strada in futuro ad un utilizzo dei due sistemi per analoghi tipi di problemi (si puo' pensare ad esempio ad un uso di set ellittici cilindrici

per un problema risolvibile tipicamente in coordinate sferoidali come lo ione H_2^+ , con il vantaggio che la curvatura della sfera puo' tenere conto della finitezza delle masse [4]). D' altra parte, essendo le soluzioni dell' equazione associata di Lamé' molto piu' semplici rispetto a quelle dell' equazione d' onda sferoidale (sono infatti dei polinomi, mentre le funzioni d' onda sferoidali non lo sono), e' possibile immaginare uno sfruttamento piu' massiccio di questo sistema di coordinate anche per problemi che coinvolgono piu' di tre corpi, come ad esempio applicazioni in connessione con i set di base sturmiani in problemi molecolari [44], [55]

5.4 Equazione di Lamé': soluzioni

Le soluzioni dell' equazione di Lamé' possono essere di due tipi, in funzione del parametro l visto in precedenza. In particolare se n e' un intero le soluzioni saranno dei polinomi, i cosiddetti polinomi di Lamé', che sono, come del resto i coefficienti dell' equazione, doppiamente periodici. Se questo non avviene le soluzioni saranno le funzioni di Lamé' non-meromorfe (o trascendenti) (vedi [30]), che chiaramente non sono dei polinomi, non sono doppiamente periodiche e sono piu' complicate da calcolare e soprattutto molto meno interessanti. Infatti l' eq. di Lamé' che emerge dalla separazione dell' eq. di Laplace ha l sicuramente intero, perche' questo e' l' autovalore dell' operatore di momento angolare l^2 e quindi le soluzioni che andremo a prendere in considerazione sono sicuramente dei polinomi. La riduzione a catena di sottogruppi $SO(3) \supset D_{2h}$ che conduce alle coordinate coniche sulla sfera S_2 porta al fatto che le soluzioni dell' equazione di Lamé' siano suddivise in 8 classi, corrispondenti alle 8 rappresentazioni irriducibili del gruppo di punto D_{2h} . Le autofunzioni possono essere etichettate sulla base dei numeri quantici che caratterizzano questo set di base [9]:

$$l^2|l\eta\rangle = l(l+1)|l\eta\rangle \tag{5.22}$$

$$\hat{\eta}l_x^2 + k^2l_y^2|l\eta\rangle = \eta|l\eta\rangle$$

Le autofunzioni dell' equazione di Laplace in questo set di coordinate saranno dunque esprimibili come

$$|l\eta\rangle = E_l^\eta(\alpha)E_l^\eta(\beta) \quad (5.23)$$

dove il simbolo $E_l^\eta(\alpha)$ rappresenta un polinomio di Lamé' di numeri quantici η, l nella variabile α , mentre il prodotto di due polinomi di Lamé' identici viene indicato come armonica ellissoidale (vedi[30],[46], [19]) ed emerge come generalizzazione delle armoniche sferiche che si ottengono da queste ai limiti dell' intervallo di definizione del parametro k^2 . I polinomi di Lamé', espressi con le funzioni ellittiche di Jacobi, hanno una struttura del tipo:

$$\text{sn}^r(\alpha)\text{cn}^s(\alpha)\text{dn}^t(\alpha)F_p(\text{sn}^2(\alpha)) \quad (5.24)$$

dove

$$r, s, t = 0, 1 \quad r + s + t + 2p = l \quad (5.25)$$

Le soluzioni non sono esprimibili in forma chiusa, ma si possono ricavare da relazioni di ricorrenza a tre termini date in [20]. E' possibile ricavarle anche da una espansione in armoniche sferiche, che si ottiene diagonalizzando l' operatore $\hat{h} = l_x^2 + k^2 l_y^2$: il risultato e' riportato in [9].

5.4.1 Equazione di Lamé' associata

Questo e' il caso di maggior interesse per noi, poiche' i polinomi associati di Lamé' possono essere utilizzati per i problemi relativi ai tre corpi nel piano per $J = 0$ e per il problema in tre dimensioni sia per $J = 0$ che per $J > 0$. Le forme dell' equazione associata di Lamé' nelle coordinate ellittiche cilindriche I e II sono state date in precedenza, e la loro soluzione si ottiene in modo assolutamente analogo a quanto abbiamo detto in precedenza per la sfera S_2 . Le equazioni separate per le due variabili ellittiche hanno come soluzioni funzioni simili a quelle descritte in precedenza ed esprimibili come:

$$E_{\lambda m}^{\frac{k}{2}}(\alpha) = \text{sn}^m(\alpha)\mathcal{A}(\alpha) \quad (5.26)$$

$E_{\lambda m}^{\nu/2}(\alpha)$ deve essere una funzione pari di α perche' per avere una soluzione unica sulla sfera si deve avere che sotto le operazione simultanee $\alpha \rightarrow -\alpha$, $\phi \rightarrow \pi + \phi$ la funzione deve rimanere invariata. La forma esplicita dei polinomi puo' inoltre essere determinata attraverso uno sviluppo di ciascun polinomio in serie delle funzioni ellittiche di Jacobi (tramite una trasformazione di variabili si puo' ricondurre questa serie ad una di seni e coseni, ma funzione del parametro k), oppure sviluppando in serie di polinomi di Chebichev, con un procedimento del tutto analogo, descritto in [30] . Una seconda possibilita' e', come descritto in precedenza, l' espansione delle armoniche ellissoidali (cioe' il prodotto di due polinomi di Lamé') in armoniche sferiche. Questo secondo metodo e' molto piu' conveniente, poiche' il nostro interesse si concentra sulle autofunzioni del laplaciano sulla sfera, e non sui singoli polinomi in una sola variabile . La relazione di ricorrenza a tre termini che da' i coefficienti di questa espansione puo' essere trovata facendo agire l' operatore $l^2 + \frac{1}{1-k^2}K_z^2$ sulle armoniche di $O(4)$. Lo sviluppo si puo' fare sia sulle armoniche derivanti dalla parametrizzazione asimmetrica che sulle funzioni D di Wigner, che emergono dalla parametrizzazione simmetrica. Per le coordinate ellittiche cilindriche di tipo I nel primo caso si ottiene [9]:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{1-k^2} \sqrt{\frac{[\nu^2 - (l-1)^2][(l-1)^2 - m^2][\nu^2 - l^2][l^2 - m^2]}{(2l-3)(2l-1)^2(2l+1)}} b_{\lambda l-2}^{\nu m} + \\
& + \{l(l+1) + \frac{1}{1-k^2} \frac{[(l+1)^2 - m^2][\nu^2 - (l+1)^2]}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{1}{1-k^2} \frac{[l^2 - m^2][\nu^2 - l^2]}{(2l-1)(2l+1)} - \lambda\} b_{\lambda l}^{\nu m} + \\
& \frac{1}{1-k^2} \sqrt{\frac{[\nu^2 - (l+2)^2][(l+2)^2 - m^2][\nu^2 - (l+1)^2][(l+1)^2 - m^2]}{(2l+1)(2l+3)^2(2l+5)}} b_{\lambda l+2}^{\nu m} = 0
\end{aligned} \tag{5.27}$$

Mentre nel secondo [9] :

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4} \sqrt{[\nu^2 - (m+\mu-1)^2][\nu^2 - (m-\mu+1)^2]} a_{\lambda, (\frac{\sigma}{2}-2)}^{\nu m \epsilon} + \\
& \left[\frac{1}{2}(\nu^2 - 1) + \frac{1}{2}(m^2 - \frac{\sigma^2}{2}) + \left(\frac{1}{1-k^2} \right) \mu^2 - \lambda \right] a_{\lambda \frac{\sigma}{2}}^{\nu m \epsilon} +
\end{aligned}$$

$$\frac{1}{4} \sqrt{\left[\nu^2 - \left(m + \frac{\sigma}{2} + 1 \right)^2 \right] \left[\nu^2 - \left(m - \frac{\sigma}{2} - 1 \right)^2 \right]} a_{\lambda, \left(\frac{\sigma}{2} + 2 \right)^2}^{\nu m \epsilon} = 0 \quad (5.28)$$

per ottenere le relazioni di ricorrenza per le coordinate ellittiche cilindriche II basta sostituire k^2 a $\frac{1}{1-k^2}$. I valori di queste matrici sono, nei due limiti estremi di k^2 :

$$b_{\lambda l}^{\nu m} \xrightarrow{k^2 \rightarrow 0} \text{diagonale} \quad (5.29)$$

$$b_{\lambda l}^{\nu m} \xrightarrow{k^2 \rightarrow 1} \text{matrice } Z \text{ [24]} \quad (5.30)$$

$$a_{\lambda \frac{\sigma}{2}}^{\nu m \epsilon} \xrightarrow{k^2 \rightarrow 1} \text{diagonale} \quad (5.31)$$

$$a_{\lambda \frac{\sigma}{2}}^{\nu m \epsilon} \xrightarrow{k^2 \rightarrow 0} \left\langle \frac{\nu}{4}, \frac{m - \frac{\sigma}{4}}{2}; \frac{\nu}{4}, \frac{m + \frac{\sigma}{4}}{2} \mid lm \right\rangle \quad (5.32)$$

Dalle relazioni di ricorrenza mostrate sopra possiamo vedere come le armoniche ellissoidali siano di parita' definita, poiche' le relazioni di ricorrenza vanno di due in due. Questo e' dovuto al fatto che, come detto nel capitolo 1, le coordinate ellittiche cilindriche corrispondono ad una riduzione in sottogruppi di $O(4)$ che coinvolge il gruppo D_{2h} . Se si combinano le autofunzioni con m opposti si avra' che la matrice dei coefficienti dello sviluppo e' gia' fattorizzata in 8 blocchi corrispondenti alle 8 rappresentazioni irriducibili di D_{2h}

5.5 Relazioni di ricorrenza per le coordinate ellissoidali

La forma degli operatori per le coordinate ellissoidali data in 1.26 e' poco comprensibile, perche' gli operatori F e G non hanno un immediato significato fisico. Si puo' pero' risostituire al posto di F e G la coppia di generatori l e K , nel qual caso, dopo alcune manipolazioni algebriche, sara' possibile ricavare degli

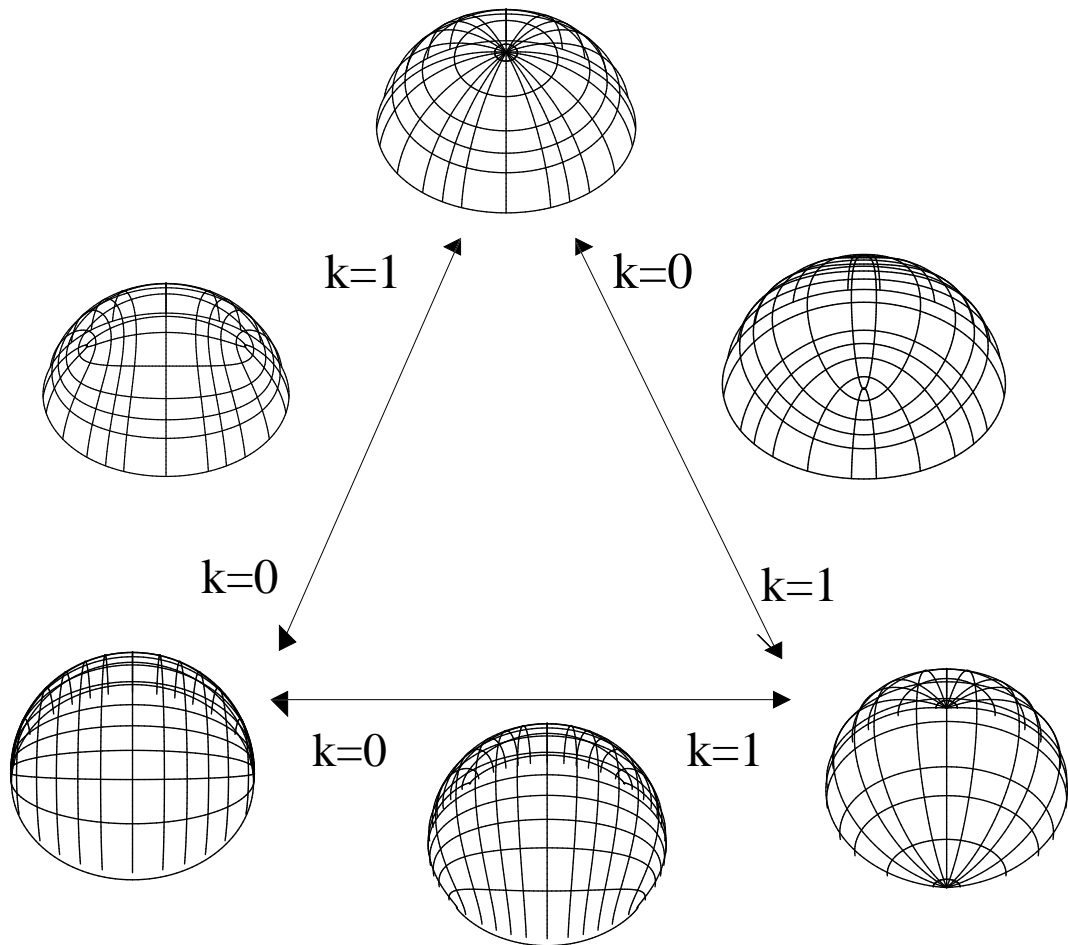


Figura 5.1: Illustrazione delle variazioni delle linee delle coordinate dei set ellittici (per il problema spaziale con $J = 0$) da una situazione dimmetrica (in alto) a quelle asimmetriche (ai vertici del triangolo in basso). Le figure al centro dei lati sono state ricavate per un valore di $k^2 = 0.5$. Di queste quella in basso rappresenta coordinate ellittiche cilindriche di tipo II, mentre le altre due sono di tipo I.

operatori nella forma:

$$\begin{aligned}
X &= -C + 2l^2 + \frac{2-2a}{1-a-b}(l_y^2 - K_y^2) + \frac{b-a-1}{1-a-b}(l_z^2 - K_z^2) \\
Y &= b(1-a)(l_y^2 + K_y^2) + a(1-b)(l_z^2 + K_z^2) + 2b(1-a)\left(\frac{b-a-1}{1-a-b}\right)(l_y - K_y) + \\
&\quad + 2a(1-b)\left(\frac{a-b-1}{1-a-b}\right)(l_z - K_z)
\end{aligned}$$

Possiamo calcolare le autofunzioni della base ellissoidale diagonalizzando l'operatore X visto sopra su una base, ad esempio, di funzioni D di Wigner (autofunzioni della parametrizzazione simmetrica) ed otterremo una relazione del tipo:

$$\mathcal{E}_{x^{\frac{\nu}{2}}y} = \frac{\nu}{2}\left(\frac{\nu}{2} + 4\right) + \sum_{\frac{\sigma}{4} = -(\frac{\nu}{2} - |m| - 1)}^{(\frac{\nu}{2} - |m| - 1)} b_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}} + \sum_{m = -(\frac{\nu}{2} - |\frac{\sigma}{4}| - 1)}^{(\frac{\nu}{2} - |\frac{\sigma}{4}| - 1)} a_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}}$$

e le relazioni di ricorrenza per i coefficienti $a_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}}$ possono essere scritti come:

$$\begin{aligned}
b_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}}|_{\frac{\sigma}{4}+2} &= \frac{1}{4} \left\{ \frac{2-2a}{2(1-a-b)} \sqrt{[J(J+1) - \frac{\sigma}{4}(\frac{\sigma}{4} + 1)][J(J+1) - (\frac{\sigma}{4} + 1)(\frac{\sigma}{4} + 2)]} + \right. \\
&\quad \left. - 2\sqrt{[J^2 - (m + \frac{\sigma}{4} + 1)^2][J^2 - (m - \frac{\sigma}{4} + 1)^2]} \right\} \\
b_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}}|_{\frac{\sigma}{4}} &= -\frac{1}{8} \frac{2-2a}{1-a-b} [J(J+1) - \frac{\sigma}{4}(\frac{\sigma}{4} - 1) + J(J+1) - \frac{\sigma}{4}(\frac{\sigma}{4} + 1)] + \\
&\quad - \frac{1}{2} [(J^2 - 1) + \frac{1}{2}(J^2 - \frac{\sigma^2}{4})] - \frac{2b}{1-a-b} (\frac{\sigma}{4})^2 \\
b_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}}|_{\frac{\sigma}{4}-2} &= \frac{1}{4} \left\{ \frac{2-2a}{2(1-a-b)} \sqrt{[J(J+1) - \frac{\sigma}{4}(\frac{\sigma}{4} - 1)][J(J+1) - (\frac{\sigma}{4} - 1)(\frac{\sigma}{4} - 2)]} + \right. \\
&\quad \left. - 2\sqrt{[J^2 - (m + \frac{\sigma}{4} + 1)^2][J^2 - (m - \frac{\sigma}{4} + 1)^2]} \right\}
\end{aligned}$$

e per i coefficienti $a_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}}$

$$\begin{aligned}
a_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}}|_{|m+2|} &= \frac{1}{4} \left\{ -\frac{2-2a}{2(1-a-b)} \sqrt{[J(J+1) - m(m+1)][J(J+1) - (m+1)(m+2)]} \right\} \\
a_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}}|_{|m|} &= \frac{1}{8} \frac{2-2a}{1-a-b} [J(J+1) - m(m-1) + J(J+1) - m(m+1)] + \frac{2b}{1-a-b} m^2 \\
a_{x^{\frac{\nu}{2}}y}^{\frac{\nu}{2}}|_{|m-2|} &= \frac{1}{4} \left\{ -\frac{2-2a}{2(1-a-b)} \sqrt{[J(J+1) - m(m-1)][J(J+1) - (m-1)(m-2)]} \right\}
\end{aligned}$$

Naturalmente le autofunzioni che emergono dalla diagonalizzazione di queste matrici non sono in autostato per l'operatore Y , ma questo non è importante per i nostri scopi. Infatti abbiamo ottenuto un set di base dipendente da due parametri, quindi molto flessibile e, poiché le matrici dei coefficienti presentati sopra sono comunque fattorizzate a blocchi (perché le funzioni su cui espandiamo il set ellissoidale sono già in autostato per gli operatori di D_2h) e quindi la loro diagonalizzazione è anche computazionalmente agevole.

Conclusioni

I risultati maggiori ottenuti in questo lavoro di tesi possono essere inquadrati nell'aver esteso la trattazione del problema a tre corpi attraverso l'uso dei set ellittici. Questi ultimi ci hanno portato ad una generalizzazione delle relazioni tra i vari set di coordinate sui diversi manifold e ad un inquadramento delle loro proprietà di simmetria in base alla teoria dei gruppi. Abbiamo proposto un nuovo sistema di coordinate, le ellittiche cilindriche, molto promettenti per le applicazioni sia ai problemi dinamici che di stato legato. A questo proposito, nonostante la difficoltà di aver a che fare con le armoniche ellissoidali, si è dimostrato come sia facile calcolare queste ultime espandendole in armoniche ipersferiche: da questi sviluppi si ricavano matrici tridiagonali che convergono in entrambi gli estremi dell'intervallo di definizione del parametro k^2 . Abbiamo quindi dimostrato l'identità tra le coordinate sferoidali su R_3 e quelle ellittiche cilindriche su S_3 , facendo ricorso alle contrazioni dell'algebra di Lie. Questo punto può risultare molto interessante quando si va ad esaminare la difficoltà di trattare le funzioni d'onda sferoidali e la relativa semplicità, invece, di utilizzare le armoniche ellissoidali (che sono dei polinomi, mentre le armoniche sferoidali non lo sono): nel testo abbiamo accennato alle possibili implicazioni e (di conseguenza) applicazioni di ciò. Infine abbiamo trattato un argomento di cui in letteratura ci sono pochi riferimenti perché piuttosto ostico: le coordinate ellissoidali. Abbiamo individuato per questo set, come per gli altri, le principali caratteristiche, legate alla presenza di due parametri variabili, e le abbiamo inserite nella cornice della

teoria piu' generale del capitolo 1, mentre nel capitolo 5 abbiamo razionalizzato la forma degli operatori commutativi che caratterizzano questo set e trovato le autofunzioni diagonalizzandone gli operatori. Il lavoro di questa tesi e' stato presentato nella poster session del MOLBEAM a Roma nello scorso giugno.

Bibliografia

- [1] H. Li, D. Kuznetsov and F. Iachello *J. Phys. A* 33 6413-6429 (2000)
- [2] E. L. Ince Ordinary differential equations, Dover 1956
- [3] V.Aquilanti, S.Cavalli, G.Grossi, R.W.Anderson *Faraday Trans.* 86 (10) 1681-1687 (1990)
- [4] O.I. Tolstikhin, H.Nakamura *J.Chem. Phys* 108 (21) 8899-8921 (1998)
- [5] V.Aquilanti,S. Cavalli, G. Grossi *J. Chem. Phys* 85 (3) 1357 (1986)
- [6] V.Aquilanti, S.Cavalli, G.Grossi *J.Chem. Phys* 85 (3) 1362-1355 (1986)
- [7] V. Aquilanti, S. Cavalli, C.Coletti *Phys. Rev. Lett.* 80 (15) 3209 (1998)
- [8] V. Aquilanti, G. Grossi, and A. Lagana' *J.Chem. Phys* 76 (3) 1587 (1982)
- [9] Andrea Caligiana *Tesi di laurea*, Perugia, Luglio 2000
- [10] K. A. Mitchell, R.G. Littlejohn *Phy. Rev. A* 56 (1) 83 (1997)
- [11] O. I. Tolstikhin, V. N. Ostrovsky and H. Nakamura *Phys. Rev. Lett.* 80 41 (1998)
- [12] O. I. Tolstikhin, I. Yu. Tolstikhina, and C. Namba *Phys. Rev. A* 60 4673 (1999)
- [13] O. I. Tolstikhin and C. Namba *Phys. Rev. A* 60 5111 (1999)

- [14] K.Nobusada, O. I. Tolstikhin, and H.Nakamura *J.Chem. Phys.* 108 8922 (1998)
- [15] K.Nobusada, O. I. Tolstikhin, and H.Nakamura *J.Phys. Chem. A* 102 9445 (1998)
- [16] K.Nobusada, O. I. Tolstikhin, and H.Nakamura *J. Mol. Struct. Theo. Chem.* 461-2 137 (1999)
- [17] G. V. Mil'nikov, O. I. Tolstikhin, K. Nobusada and H. Nakamura *Phys. Chem. Chem. Phys.* 1 1159 (1999)
- [18] O. I. Tolstikhin, M. Matsuzawa *Phys. Rev. A* 63 (2000)
- [19] Whittaker and Watson *A course of modern analysis*, Cambridge U. P., 1943
- [20] J. Patera and P. Winternitz *J. Math. Phys* 14 1130 (1973)
- [21] P.M. Morse and H. Feshbach *Methods of theoretical physics*, Mc Graw - Hill, New York,1953
- [22] D. Delande *These de Doctorat*, Ecole Normale, Paris, 154 (1988)
- [23] E. A. Solov'ev *J.E.T.P.* 55 1017 (1982)
- [24] C.Coletti *Tesi di Dottorato*, Universita' di Perugia (1997)
- [25] E. G. Kalnins, W. Miller Jr. and P. Winternitz *S.I.A.M. J.Appl. Math* 30 669 (1976)
- [26] R. C. Whitten, F. T. Smith *J. Math. Phys.* 9 1103 (1968)
- [27] M.Abramowitz, I.A. Stegun *Handbook of mathematical functions*, Dover, New York
- [28] J.M. Launay and M. Ledourneuf *Chem. Phys. Lett.* 163 178 (1989)

- [29] J. M. Launay and M. Le Dourneuf *Chem. Phys. Lett.* (1990), 169, 473
- [30] F. M. Arscott *Periodic differential equations* Pergamon Press, 1964
- [31] Murphy, Murgenuau *The mathematics of physics and chemistry*
- [32] R. G. Littlejohn, M. Reinsch *Rev. Mod. Phys.* 69 213 (1997)
- [33] V. Fock *Kgl. Norske Videnskab. Selkabs. Forh.*, 31 138 (1958)
- [34] F.T. Smith *J. Math. Phys.* 3 735 (1962); R.C. Whitten, F. T. Smith *ibid* 9 1103 (1968)
- [35] B. R. Johnson *J. Comp. Phys.* 76 1588 (1982)
- [36] D.E. Manolopoulos *J. Chem. Phys.* 85 6425 (1986)
- [37] C. Müller, *Spherical Harmonics, lecture notes on mathematics 17* Springer, Berlin; 1964
- [38] D.E. Manolopoulos and M.H. Alexander *J. Chem. Phys.* 86, 2044 (1987)
- [39] Kalnins, Miller and Pogosyan *J. Phys. A* 32, 4709 (1997)
- [40] V. Aquilanti, A. Caligiana, S. Cavalli *Int. J. Quant. Chem.* submitted
- [41] V. Aquilanti, A. Caligiana, S. Cavalli and C. Coletti *Int. J. Quant. Chem.* submitted
- [42] F. Finkel, A. González-Lopez and M. A. Rodriguez *J. Phys. A* 33 (2000) 1519
- [43] Levitina, T., Brandas, E.J. *International journal of quantum chemistry*, 1997, vol. 65, no. 5, pp. 601
- [44] V. Aquilanti, S. Cavalli, C. Coletti, D. Di Domenico and G. Grossi *Int. Rev. of Phys. Chem.* 2001 in press

- [45] D. De Fazio *Tesi di Dottorato* Universita' di Perugia, 1996
- [46] W. Miller Jr. *Symmetry and separation of variables* Encyclopedia of mathematics and its applications vol. 4, Addyson- Wesley, 1977
- [47] B. G. Wybourne *Classical Groups for Physicists*, J. Wiley & Sons, 1974
- [48] G. A. Parker, M. Keil, M. A. Morrison and S. Crocchianti *J. Chem. Phys.* 113 (3) 957 (2000)
- [49] R. G. Littlejohn, K. A. Mitchell, V. Aquilanti and S. Cavalli *Phys. Rev. A* 58 (5) 3705 (1998)
- [50] D. A. Varshalovich, A.N. Moskalev and V. K. Khersonskii *Quantum Theory of Angular Momentum* World Scientific, Singapore, 1988
- [51] B. R. Judd *Angular Momentum Theory for Diatomic Molecules* Academic Press, New York, 1975
- [52] R. D. Spence *Am. J. Phys.* 329 (1959)
- [53] O. I. Tolstikhin and M. Matsuzawa *Phys. Rev. A* 63 (3) 032510/1-032510/8 (2001)
- [54] O. I. Tolstikhin and M. Matsuzawa *Phys. Rev. A* 63 (6) 062705/1-062705/23
- [55] J. Avery *Hyperspherical harmonics and generalized sturmians* Kluwer Academic publishers 2000
- [56] A. Volpi *Tesi di Laurea* Perugia 1997
- [57] J.G. Frey, B. J. Howard *Chem. Phys.* 99 415 (1985)
- [58] A. F. Nikiforov, S. K. Suslov, V. B. Uvarov *Classical Ortogonal Polynomials of a Discrete Variable*, Springer-Verlag, Berlin, 1991

- [59] V. Aquilanti, S.Cavalli, C. Coletti, D. De Fazio and G. Grossi, in *New Methods in Quantum Theory*; C.A. Tsipis, V. S. Popov, D. R. Hersbach, J. S. Avery Ed. Kluwer (1996), pp. 233-250