



CUADRATURAS GAUSSIANAS PARA TRANSFORMADAS DE HANKEL: APLICACIONES AL HIDRÓGENO Y AL OSCILADOR ARMÓNICO EN 2D

Saúl Salazar¹ y Robin Sagar²

¹Departamento de Química, UAM-Iztapalapa; México

²Departamento de Química, UAM-Iztapalapa; México
e-mail: sssjcarlos84@gmail.com

En este trabajo se presenta una evaluación de un método para el cálculo de integrales involucrando funciones de Bessel de primer tipo por medio de cuadraturas Gaussianas no estándares [1]. Este método utiliza cuadraturas Gaussianas cuyas funciones de peso son funciones de Bessel del tercer tipo, transformadas al plano complejo. En la primera parte del trabajo se calculan las cuadraturas. La segunda parte del trabajo consiste en evaluar el método a través del cálculo de la transformación de Fourier al espacio de momentos del átomo de hidrógeno y del oscilador armónico, ambos en dos dimensiones. Esta transformación está relacionada con la transformada de Hankel de orden 0, 1, 2, 3 para orbitales s, p, d, f, respectivamente.

Nuestros resultados numéricos se comparan con resultados analíticos y se hace un análisis de la convergencia del método con respecto al orden de la cuadratura. Los resultados demuestran que el método da buenos resultados para argumentos grandes de la transformada obtenida, que son las regiones donde los métodos tradicionales fallan. Hay diferencias entre los resultados obtenidos para el átomo de hidrógeno (comportamiento exponencial) y el oscilador (comportamiento gaussiano).

En el caso del oscilador, los resultados para argumentos pequeños no son tan buenos como para argumentos grandes. Esto es válido también para el átomo de hidrógeno, pero en algunos casos los resultados más precisos pueden ser obtenidos por medio de cuadraturas de órdenes más altos.

[1] Wong R. Quadrature Formulas for Oscillatory Integral Transforms. *Numer. Math.* **1982**, 39, 351-360.