

Función de onda hidrogenoide: nueva fórmula para una vieja integral

Antonio Ortiz Castro

Departamento de Física, CINVESTAV, IPN
 Apdo. Post. 14-740, 07000, México D.F. México.

Recibido el 9 de mayo de 2001; aceptado el 13 de mayo de 2002

Presentamos una expresión algebraica para encontrar la integral que nos permite calcular de manera general los valores medios $\langle r^n \rangle$, $n \in \mathbf{Z}$, a partir de la función de onda radial de los átomos hidrogenoides.

Descriptores: Función de onda radial hidrogenoide; polinomios asociados de Laguerre; valores medios $\langle r^n \rangle$; factoriales negativos.

We present a general formula that allows us to calculate the mean value $\langle r^n \rangle$, $n \in \mathbf{Z}$, for the radial wave functions of the hydrogen-like atoms.

Keywords: Hydrogen-like radial wave-function; Laguerre's associated polynomials; mean values $\langle r^n \rangle$; negative factorials.

PACS: 02.30Gp; 02.30Cj.

1. Introducción

Al estudiar las funciones de onda para átomos hidrogenoides los valores medios $\langle r^n \rangle$ cobran especial importancia para conocer, por ejemplo: $\langle r \rangle$, la distancia media entre el electrón y el núcleo [1]; $\langle r^2 \rangle$, que es proporcional a la susceptibilidad diamagnética [5]; $\langle r^{-1} \rangle$ que nos da la energía potencial media [1]; $\langle r^{-3} \rangle$, que está asociado con la energía de la interacción *espín-órbita* [3], etcétera. Mediante la fórmula encontrada podemos calcular sistemáticamente todos estos valores medios.

2. Dedución de la fórmula

La función de onda radial para los átomos hidrogenoides [1–3] es:

$$R_{nl}(r) = -\alpha_n^{3/2+l} N_{nl} r^l e^{-\frac{\alpha_n r}{2}} L_{n+l}^{2l+1}(\alpha_n r), \quad (1)$$

con $\alpha_n = \frac{2Z}{na_0}$ y $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$, queda expresada en términos de los polinomios asociados de Laguerre, que a su vez están definidos mediante la función generadora [4]

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{L_{m+s}^s(\rho)}{(m+s)!} z^m = (-1)^s \frac{e^{-\frac{\rho z}{1-z}}}{(1-z)^{s+1}}, \quad m = t - s, \quad (2)$$

ya que $t = n + l$ y $s = 2l + 1$.

Elevando al cuadrado la función generadora y multiplicándola por $\rho^{s+\lambda} e^{-\rho}$ (recordemos que $\lambda \geq -s$ y $\lambda \in \mathbf{Z}$) obtenemos

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} z^{2m} \int_0^{\infty} \rho^{s+\lambda} e^{-\rho} [L_{m+s}^s(\rho)]^2 d\rho &= \int_0^{\infty} \rho^{s+\lambda} e^{-\rho} \frac{e^{-\frac{2\rho z}{1-z}}}{(1-z)^{2s+2}} d\rho \quad (3) \\ &= \frac{1}{(1-z)^{2s+2}} \int_0^{\infty} \rho^{s+\lambda} e^{-\rho(\frac{1+z}{1-z})} d\rho \\ &= \frac{(s+\lambda)!}{(1-z)^{2s+2}} \frac{(1-z)^{s+\lambda+1}}{(1+z)^{s+\lambda+1}} \\ &= \frac{(s+\lambda)!(1-z)^{2\lambda}}{(1-z^2)^{s+\lambda+1}}. \quad (4) \end{aligned}$$

Los binomios los podemos expandir usando el teorema del binomio de Newton:

$$\frac{1}{(1-z^2)^{s+\lambda+1}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(s+\lambda+k)!}{(s+\lambda)!k!} z^{2k} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} (1-z)^{2\lambda} &= [(1-z)^\lambda]^2 \\ &= \left[\sum_{j=0}^{\lambda} \frac{\lambda!}{j!(\lambda-j)!} (-1)^j z^j \right]^2 \quad (6) \end{aligned}$$

$$= \sum_{j=0}^{\lambda} \left\{ \frac{\lambda!}{j!(\lambda-j)!} z^j \right\}^2. \quad (7)$$

Resulta ser que como en el primer miembro de la Ec. (3) tenemos una serie donde sólo aparecen potencias pares de z , en la Ec. (6) sólo los términos que son de la forma de la Ec. (7) contribuirán a la integral. Los demás términos se sumarán a cero. Así, la Ec. (4) se transforma en

$$\begin{aligned} & \frac{(s + \lambda)!(1 - z)^{2\lambda}}{(1 - z^2)^{s+\lambda+1}} \int_0^\infty r^{2l+\lambda+1} e^{-\alpha_n r} [L_{n+l}^{2l+1}(\alpha_n r)]^2 dr \\ &= (s + \lambda)! \sum_{k=0}^\infty \frac{(s + \lambda + k)!}{(s + \lambda)!k!} z^{2k} \sum_{j=0}^\lambda \left\{ \frac{\lambda!}{j!(\lambda - j)!} \right\}^2 z^{2j} \\ &= \sum_{k=0}^\infty \sum_{j=0}^\lambda \left\{ \frac{\lambda!}{j!(\lambda - j)!} \right\}^2 \frac{(s + \lambda + k)!}{k!} z^{2k+2j} \end{aligned} \tag{8}$$

Esta expresión, Ec. (10), nos permitirá calcular los valores medios $\langle r^n \rangle$.

Igualando coeficientes de potencias iguales en las Ecs. (3) y (8) (tomando $j + k = m$ en (8)) la integral queda como

$$\int_0^\infty \rho^{s+\lambda} e^{-\rho} [\mathcal{L}_{m+s}^s(\rho)]^2 d\rho = \sum_{j=0}^\lambda \left\{ \frac{\lambda!}{j!(\lambda - j)!} \right\}^2 \frac{(s + \lambda + m - j)!}{(m - j)!} \tag{9}$$

Con $\rho = \alpha_n r$ y $\alpha_n = \frac{2Z}{na_0}$, $a_0 =$ radio de Bohr, obtenemos finalmente

3. $\lambda \geq 0$

En estos casos la fórmula se aplica directamente. Los valores medios calculados son los siguientes.

3.1. Constante de normalización

Para calcular la constante de normalización de la función de onda (1), necesitamos el valor $\lambda = 1$:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr &= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \int_0^\infty r^{2l+2} e^{-\alpha_n r} [L_{n+l}^{2l+1}(\alpha_n r)]^2 dr \\ &= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \frac{(n+l)!^2}{\alpha_n^{2l+3}} \sum_{j=0}^{\lambda=1} \left\{ \frac{1!}{j!(1-j)!} \right\}^2 \frac{(n+l-1-j)!}{(n-l-1-j)!} \\ &= N_{nl}^2 (n+l)!^2 \left\{ \frac{(n+l+1)!}{(n-l-1)!} + \frac{(n+l)!}{(n-l-2)!} \right\} \\ &= N_{nl}^2 \frac{(n+l)!^3}{(n-l-1)!} \{(n+l+1) + (n-l-1)\} \end{aligned}$$

y si pedimos que el valor de la integral sea 1, la constante de normalización queda como [1]

$$N_{nl} = \left\{ \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!^3} \right\}^{1/2} \tag{11}$$

3.2. Energía potencial

El valor medio de la energía potencial viene dado por [1]

$$\langle V \rangle = -Ze^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle,$$

donde $Z =$ número atómico, y $e =$ carga electrónica. El valor medio $\langle r^{-1} \rangle$ que necesitamos corresponde a $\lambda = 0$. El cálculo es directo:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle &= \int_0^\infty r^{-1} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \\ &= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \int_0^\infty r^{2l+1} e^{-\alpha_n r} [L_{n+l}^{2l+1}(\alpha_n r)]^2 dr \\ &= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \frac{(n+l)!^2}{\alpha_n^{2l+2}} \sum_{j=0}^{\lambda=0} \left\{ \frac{0!}{j!(0-j)!} \right\}^2 \frac{(n+l-j)!}{(n-l-1-j)!} \\ &= \frac{\alpha_n}{2n}. \end{aligned}$$

Con $\alpha_n = 2Z/na_0$, obtenemos

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{n^2 a_0} \tag{12}$$

3.3. Distancia media

De la misma manera podemos calcular el valor medio $\langle r \rangle$, que es la distancia media entre el electrón y el núcleo [1], y que corresponde a $\lambda = 2$:

$$\begin{aligned}
 \langle r \rangle &= \int_0^\infty r |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \\
 &= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \int_0^\infty r^{2l+3} e^{-\alpha_n r} [L_{n+l}^{2l+1}(\alpha_n r)]^2 dr \\
 &= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \frac{(n+l)!^2}{\alpha_n^{2l+4}} \sum_{j=0}^{\lambda=2} \left\{ \frac{2!}{j!(2-j)!} \right\}^2 \frac{(n+l+2-j)!}{(n-l-1-j)!} \\
 &= \frac{N_{nl}^2}{\alpha_n} (n+l)!^2 2!^2 \left\{ \frac{(n+l+2)!}{0!^2 2!^2 (n-l-1)!} + \frac{(n+l+1)!}{1!^2 1!^2 (n-l-2)!} + \frac{(n+l)!}{2!^2 0!^2 (n-l-3)!} \right\} \\
 &= \frac{1}{n\alpha_n} \{3n^2 - l(l+1)\}
 \end{aligned}$$

Es decir,

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z} \{3n^2 - l(l+1)\} \tag{13}$$

3.4. Susceptibilidad diamagnética

La susceptibilidad diamagnética por gramo mol resulta ser proporcional a $\langle r^2 \rangle$ [5]:

$$\chi = -\frac{Ne^2}{6mc^2} \sum_i \langle r_i^2 \rangle,$$

siendo N = número de Avogadro, e = carga electrónica, m = masa electrónica, c = velocidad de la luz y, la sumatoria la debemos efectuar sobre todos los electrones del átomo [5]. Nótese como χ siempre es negativa y diferente de cero. El valor medio que nos interesa lo encontramos con $\lambda = 3$:

$$\begin{aligned}
 \langle r^2 \rangle &= \int_0^\infty r^2 |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \\
 &= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \int_0^\infty r^{2l+4} e^{-\alpha_n r} [L_{n+l}^{2l+1}(\alpha_n r)]^2 dr \\
 &= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \frac{(n+l)!^3}{\alpha_n^{2l+5}} \sum_{j=0}^{\lambda=3} \left\{ \frac{3!}{j!(3-j)!} \right\}^2 \\
 &\quad \times \frac{(n+l+3-j)!}{(n-l-1-j)!} \\
 &= \frac{n\alpha_0^2}{8Z^2} \{20n^2 - 12nl^2 - 12nl + 4n\}.
 \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2} \{5n^2 - 3l(l+1) + 1\} \tag{14}$$

4. $\lambda \leq -1$

En estos casos es necesario reinterpretar la fórmula de la Ec. (10). De primera instancia la sumatoria se hace infinita, aparecerán factoriales de enteros negativos y tendremos que deducir algunas expresiones para las sumatorias que surgen.

4.1. Binomio de Newton

La bien conocida expresión general para desarrollar un binomio para toda $m \in \mathbf{R}$,

$$(1+z)^m = \sum_{j=0}^\infty \frac{m!}{j!(m-j)!} z^j, \tag{15}$$

nos sugiere que la sumatoria que aparece en (10) también debe extenderse hasta el infinito. Sin embargo, j debe satisfacer la desigualdad $j \leq n-l-1$ para que el factorial que está en el denominador de (10) no se haga negativo, el cual sabemos que diverge. En otras palabras, la sumatoria será finita.

4.2. Factoriales negativos

Nos encontraremos cocientes de factoriales negativos que debemos interpretar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \frac{(-1)!}{(-1)!} &= 1, \\
 \frac{(-1)!}{(-2)!} &= \frac{(-1) \cdot (-2)!}{(-2)!} = -1, \\
 \frac{(-1)!}{(-3)!} &= \frac{(-1)(-2) \cdot (-3)!}{(-3)!} = (-1)(-2), \\
 \frac{(-1)!}{(-4)!} &= \frac{(-1)(-2)(-3) \cdot (-4)!}{(-4)!} = (-1)(-2)(-3),
 \end{aligned}$$

y en general

$$\frac{(-m)!}{(-n)!} = \frac{(n-1)!}{(m-1)!} (-1)^{n-m}. \tag{16}$$

Por ejemplo, para obtener (5) y según el teorema del binomio

$$(1-z^2)^{-s-\lambda-1} = \sum_{k=0}^\infty \frac{(-s-\lambda-1)!}{k!(-s-\lambda-1-k)!} (-1)^k \cdot z^{2k}$$

y los factoriales negativos se simplifican fácilmente:

$$\frac{(-s - \lambda - 1)!}{(-s - \lambda - 1 - k)!} = \frac{[(s + \lambda + 1 + k) - 1]!}{[(s + \lambda + 1) - 1]!} (-1)^k$$

$$= \frac{(s + \lambda + k)!}{(s + \lambda)!} (-1)^k$$

4.3. Sumatorias

4.3.1. Fórmula básica

En el desarrollo de las integrales encontraremos sumatorias del tipo

$$\sum_{m=0}^Q \frac{m^r (P + m)!}{m!}$$

Para $r = 0$ la sumatoria

$$\sum_{m=0}^Q \frac{(P + m)!}{m!},$$

la obtuvimos de la siguiente manera:

$$u_0 = P! = \frac{P! (P + 1)!}{0! (P + 1)!},$$

$$u_0 + u_1 = P! + \frac{(P + 1)!}{1!} = \frac{P! (P + 2)!}{1! (P + 1)!},$$

$$u_0 + \dots + u_2 = P!(P + 2) + \frac{(P + 2)!}{2!} = \frac{P! (P + 3)!}{2! (P + 1)!},$$

$$\vdots$$

$$u_0 + \dots + u_k = \frac{P! (P + k + 1)!}{k! (P + 1)!} = \frac{1}{P + 1} \frac{(P + k + 1)!}{k!}.$$

Por tanto,

$$\sum_{m=0}^Q \frac{(P + m)!}{m!} = \frac{1}{P + 1} \frac{(P + Q + 1)!}{Q!}. \tag{17}$$

4.3.2. Fórmulas derivadas

Para $r = 1$ procedimos como sigue:

$$\sum_{m=0}^Q m \frac{(P + m)!}{m!} = \sum_{m=0}^{Q-1} \frac{(P + 1 + m)!}{m!}$$

$$= \frac{(P + Q + 1)!}{(Q - 1)!} \left\{ \frac{1}{P + 2} \right\} \tag{18}$$

Similantemente para $r = 2$:

$$\sum_{m=0}^Q m^2 \frac{(P + m)!}{m!} = \sum_{m=0}^{Q-1} (m + 1) \frac{(P + 1 + m)!}{m!}$$

$$= \sum_{m=0}^{Q-1} m \frac{(P + 1 + m)!}{m!} + \sum_{m=0}^{Q-1} \frac{(P + 1 + m)!}{m!}$$

$$= \frac{1}{P + 3} \frac{(P + Q + 1)!}{(Q - 2)!} + \frac{1}{P + 2} \frac{(P + Q + 1)!}{(Q - 1)!}$$

$$= \frac{(P + Q + 1)!}{(Q - 1)!} \left\{ \frac{Q - 1}{P + 3} + \frac{1}{P + 2} \right\} \tag{19}$$

Algunas otras sumatorias son

$$\sum_{m=0}^Q m^3 \frac{(P + m)!}{m!} = \frac{(P + Q + 1)!}{(Q - 1)!} \left\{ \frac{(Q - 1)(Q - 2)}{P + 4} + 3 \frac{Q - 1}{P + 3} + \frac{1}{P + 2} \right\}, \tag{20}$$

$$\sum_{m=0}^Q m^4 \frac{(P + m)!}{m!} = \frac{(P + Q + 1)!}{(Q - 1)!} \left\{ \frac{(Q - 1)(Q - 2)(Q - 3)}{P + 5} + 6 \frac{(Q - 1)(Q - 2)}{P + 4} + 7 \frac{Q - 1}{P + 3} + \frac{1}{P + 2} \right\}. \tag{21}$$

4.4. Corrección relativista

En la corrección relativista al átomo hidrogenoide encontramos la expresión [3]

$$\Delta E_r = \left\langle -\frac{p^4}{8m^3c^2} \right\rangle = -\frac{1}{2mc^2} \left\langle \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 \right\rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \langle (E_n - V)^2 \rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} [E_n^2 - 2E_n \langle V \rangle + \langle V^2 \rangle],$$

donde $E_n = -13.6 \text{ eV}/n^2$; $\langle V \rangle$ = valor medio de la energía potencial (que ya evaluamos); y $\langle V^2 \rangle$ que resulta ser pro-

porcional a $\langle r^{-2} \rangle$. Este valor medio lo encontramos al tomar $\lambda = -1$:

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \int_0^\infty r^{-2} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$$

$$= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \int_0^\infty r^{2l} e^{-\alpha_n r} [L_{n+l}^{2l+1}(\alpha_n r)]^2 dr$$

$$= \alpha_n^{2l+3} \frac{(n - l - 1)! (n + l)!}{2n(n + l)!^3} \frac{1}{\alpha_n^{2l+1}} \sum_{j=0}^{\lambda=-1} \left\{ \frac{(-1)!}{j!(-1 - j)!} \right\}^2$$

$$\times \frac{(n + l - 1 - j)!}{(n - l - 1 - j)!}$$

La sumatoria tendrá por límite superior $(n - l - 1)$, y los factoriales negativos los simplificamos usando la Ec. (16):

$$\frac{(-1)!}{j!(-1-j)!} = \frac{[(1+j)-1]!}{j!(1-1)!}(-1)^j = \frac{j!}{j!}(-1)^j$$

para obtener

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{\alpha_n^2}{2n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \sum_{j=0}^{n-l-1} \frac{(n+l-1-j)!}{(n-l-1-j)!}$$

Ahora hacemos $m = n - l - 1 - j$:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle &= \frac{\alpha_n^2}{2n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \sum_{m=0}^{n-l-1} \frac{(2l+m)!}{m!} \\ &= \frac{\alpha_n^2}{2n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \frac{1}{2l+1} \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}, \end{aligned}$$

que obtenemos al aplicar la Ec. (17). Por lo tanto,

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^3 n^3} \frac{1}{l+1/2}. \tag{22}$$

4.5. Interacción espín-órbita.

La energía asociada a la interacción *espín-órbita* es proporcional a $\langle r^{-3} \rangle$ [3]:

$$E_{s-o} = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \langle \vec{\sigma} \cdot \vec{l} \rangle,$$

siendo $\vec{\sigma}$ = operador de espín; \vec{l} = operador de momentum angular; y el valor medio $\langle r^{-3} \rangle$ que buscamos lo podemos obtener haciendo $\lambda = -2$:

$$\begin{aligned} &\sum_{m=0}^{n-l-1} (n-l-m)^2 \frac{(2l+m-1)!}{m!} \\ &= (n-l)^2 \sum_{m=0}^{n-l-1} \frac{(2l-1+m)!}{m!} - 2(n-l) \sum_{m=0}^{n-l-1} m \frac{(2l-1+m)!}{m!} + \sum_{m=0}^{n-l-1} m^2 \frac{(2l-1+m)!}{m!} \\ &= (n-l)^2 \frac{(n+l-1)!}{2l(n-l-1)!} - 2(n-l) \frac{(n+l-1)!}{(2l+1)(n-l-2)!} + \frac{(n+l-1)!}{(n-l-2)!} \frac{(n-l)(2l+1)-2l}{(2l+1)(2l+2)} \\ &= \frac{(n+l-1)!}{(n-l-1)!} \frac{2n(n+l)}{2l(2l+1)(2l+2)}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle &= \int_0^\infty r^{-3} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \\ &= \alpha_n^{2l+3} N_{nl}^2 \int_0^\infty r^{2l-1} e^{-\alpha_n r} [L_{n+l}^{2l+1}(\alpha_n r)]^2 dr \\ &= \alpha_n^{2l+3} \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!^3} \frac{(n+l)!^2}{\alpha_n^{2l}} \\ &\times \sum_{j=0}^{\lambda=-2} \left\{ \frac{(-2)!}{j!(-2-j)!} \right\}^2 \frac{(n+l-2-j)!}{(n-l-1-j)!}. \end{aligned}$$

Aquí nuevamente la sumatoria tiene por límite superior $(n - l - 1)$. Volviendo a aplicar la Ec. (16) para simplificar los factoriales negativos:

$$\frac{(-2)!}{j!(-2-j)!} = \frac{[(2+j)-1]!}{j!(2-1)!}(-1)^j = \frac{(1+j)!}{j!}(-1)^j$$

y nos queda

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{\alpha_n^3}{2n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \sum_{j=1}^{n-l-1} (1+j)^2 \frac{(n+l-2-j)!}{(n-l-1-j)!}.$$

Una vez más hacemos $m = n - l - 1 - j$:

$$\begin{aligned} &= \frac{\alpha_n^3}{2n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \sum_{m=0}^{n-l-1} (n-l-m)^2 \frac{(2l+m)!}{m!} \\ &= \frac{\alpha_n^3}{2n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \frac{(n+l-1)!}{(n-l-1)!} \frac{2n(n+l)}{2l(2l+1)(2l+2)}, \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3} \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)}. \tag{23}$$

El valor de la última sumatoria lo calculamos de la siguiente manera:

que obtenemos tras aplicar las Ecs. (17), (18) y (19) a la primera, segunda y tercera sumatorias, respectivamente.

Agradecimientos

Deseo agradecer al Dr. Heriberto Castilla sus comentarios a la redacción del manuscrito así como sus críticas al contenido de este trabajo.

-
1. L. Pauling, E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, 1935).
 2. L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3a. Edición (McGraw-Hill, 1968).
 3. R. B. Leighton, *Principles of Modern Physics* (McGraw-Hill, 1959).
 4. I. N. Sneddon, *Special Functions of Mathematical Physics and Chemistry*. 3a. Edición (Longman Group Ltd., 1980).
 5. J. H. Van Vleck, *The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities* (Oxford University Press, 1932).