UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS

EFEITO ZEEMAN QUADRÁTICO EM ÁTOMOS HIDROGENÓIDES

TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE "MESTRE EM CIÊNCIAS"

PAULO CESAR RECH

FLORIANÓPOLIS
SANTA CATARINA - BRASIL
NOVEMBRO - 1986.

EFEITO ZEEMAN QUADRÁTICO EM ÁTOMOS HIDROGENÓIDES

Paulo Cesar Rech

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE

"MESTRE EM CIÊNCIAS"

ESPECIALIZAÇÃO FÍSICO-QUÍMICA E APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO.

Prof. Dr. JASON ALFREDO C. GALLAS
ORIENTADOR

Prof. Dr. HÉDIO JOSÉ MÜLLER
COORDENADOR

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. JASON ALFREDO C. GALLAS

Prof. Dr. FERNANDO CABRAL

Prof. Dr. HUMBERTO SIQUEIRA BRANDI

RESUMO

Utilizando o método variacional, investigamos o espectro não relativístico de energias do estado fundamental do átomo de hidrogênio na presença de campos magnéticos de intensidades arbitrárias. Nossos resultados representam o "estado da arte" no cálculo do efeito Zeeman quadrático. A função tentativa utilizada dá uma indicação da simetria do estado fundamental do átomo de hidrogênio em campos magnéticos intensos. Todos os cálculos algébricos necessários para o presente trabalho foram efetuados em um computador IBM 4341, sendo para tal utilizadas rotinas REDUCE por nós desenvolvidas.

ABSTRACT

The non-relativistic energy spectrum of the ground state of the hydrogen atom in a magnetic field of arbitrary strength is investigated using the variational method. Our results represent "the state of the art" in calculation of the quadratic Zeeman effect. The trial function utilized gives us an indication of the symmetry of the ground state of the hydrogen atom in high magnetic fields. All necessary algebraic calculations were performed on an IBM 4341 computer with REDUCE routines that we developed.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO

O aspecto fundamental do problema de átomos em campos magnéticos está relacionado com o que acontece ao elétron quando submetido à ação conjunta de forças dos tipos Coulombiana e diamagnética. O interesse em tal problema surge, antes de tudo, pelo fato de ser um dos problemas mais básicos da física teórica, mais precisamente da Mecânica Quântica não-relativística, bem como o caso mais simples de uma equação de Schrödinger com potencial vetorial. É um problema não separável em qualquer dos sistemas de coordenadas conhecido, com duas forças de diferentes simetrias e de intensidades comparáveis atuando sobre o elétron. É, até o presente momento, um problema aberto uma vez que não existe procedimento para quantização de problemas não-separáveis. Em termos conceituais, a importância do problema está no fato que os dois casos limites são duas das poucas situações separáveis (e consequentemente solucionáveis analiticamente) conhecidas em Mecânica Quântica. Estas situações limites são os conhecidos problemas de Coulomb (para o qual $B \rightarrow 0$) e de Landau (para o qual $Z \rightarrow 0$). O de Coulomb trata exatamente do átomo de hidrogênio livre (isto é, não sujeito a campo magnético), sendo um problema que apresenta simetria esférica. O de Landau, por sua vez, trata do elétron sujeito à ação de um campo magnético, o que faz com que a simetria apresentada seja cilíndrica, com o eixo do cilindro sendo definido pela direção do campo. Outro fato que desperta o interesse para o problema é o de que todas as questões ligadas ao diamagnetismo atômico tem larga aplicação em vários domínios da Física. Por exemplo, em Física do Estado Sólido de Sistemas de excitons e em Astrofísica, apesar de que no caso deste último não ser ainda possível gerar em laboratório campos magnéticos típicos de pulsars (10^{15} G) e anãs brancas (10^{8} G). Tais campos, no entanto, podem ser simulados pelo estu do de estados altamente excitados (chamados estados de Rydberg) que já podem ser criados com relativa facilidade em laboratório.

Nosso objetivo com este trabalho foi basicamente estudar a função de onda do estado fundamental de um átomo hidrogenóide colocado num campo magnético uniforme. Explorando um certo tipo específico de função tentativa (a ser discutida em detalhes no capítulo II), pretendemos responder duas questões fundamentais:

a) Qual a eficiência da função de onda estudada em gerar autovalores para campos magnéticos arbitrários?

b) Qual a expansão em série da função de onda exata (certamente não separável), ou seja, qual o tipo de simetria que sobrevive à aplicação do campo magnético?

Não nos propomos a fazer apenas "mais um cálculo do espectro Zeeman em hidrogênio", mas sim, utilizando uma função tentativa simples e escolhida de modo a conter o maior número possível de características do problema, determinar " the state of the art" no cálculo do espectro, obtendo como consequência uma excelente função de onda que sirva para indicar possíveis soluções não separáveis para o problema.

No capítulo I, apresentamos uma pequena revisão do problema de átomos hidrogenóides (isto é, átomos que contém um elétron orbitando em torno de um núcleo com carga igual a Ze) em campos magnéticos uniformes. No capítulo II, discorremos sobre a técnica a ser por nós utilizada, qual seja a do Método Variacional, bem como introduzimos também a função de onda tentativa, realçando as suas virtudes. À partir dai, procuramos mostrar em detalhes todos os procedimentos necessários à obtenção da expressão para a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio no campo magnético uniforme. No último capítulo, o que fazemos é comparar nossos resultados, bem como o método, com vários outros resultados (obtidos pelos mais diversos métodos e mesmo pelo variacional) dos mais precisos encontrados na literatura. Finalizamos, então , justificando as aproximações realizadas (problema do modelo utilizado ser não relativístico e da massa infinita do próton), bem como deixando clara nossa intenção de, tendo já conseguido este bom resultado, partir agora para o estudo dos estados excitados, ou seja, testar a base aqui utilizada para o estado fundamental também para os estados excitados do átomo de hidrogênio no campo magnético uniforme.

CAPÍTULO I

REVISÃO DO EFEITO ZEEMAN EM ÁTOMOS

I-0 - Introdução

Neste capítulo, vamos rever o problema de átomos hidrogenóides em campos magnéticos uniformes. Começaremos relembrando o caso do átomo hidrogenóide livre.

I-1 - Átomos Livres

O hamiltoniano não relativístico para um átomo hidrogenóide livre de carga nuclear Ze é dado por

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} - \frac{Ze^2}{r} . \qquad \text{I-1}$$

A equação de Schrödinger corrspondente é

$$\left(- \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{r}\right) \psi = E \, \psi , \qquad \text{I-2}$$

onde $\vec{\nabla}^2$ é o operador laplaciano e E e ψ são, respectivamente, a auto-energia e autofunção atômicas.

Como sabido, a equação I-2 pode ser separada em quatro diferentes sistemas de coordenadas[1]. Dentre estes, os mais conhecidos são o sistema de coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) e o de coordenadas parabólicas (ξ, η, ϕ) (ver apêndice A).

No caso de coordenadas esféricas, fatorando-se a função de onda como

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \; \Theta (\theta) \; \Phi(\phi) \qquad \text{I-3}$$

pode-se facilmente separar a equação de Schrödinger do problema, bem como resolvê-la analiticamente. Nestas coordenadas, as auto funções são produtos de polinômios associados de Laguerre por harmônicos esféricos, com o espectro de energia dado por[2]

$$E_n = - \frac{Zme^4}{2\hbar^2 n^2} , \qquad \text{I-4}$$

onde n é o chamado número quântico principal. No caso parabólico, a separação, com consequente solução analítica, é conseguida com a hipótese seguinte para as auto funções

$$\psi(\xi, \eta, u) = \Xi (\xi) \,\P\, (\eta) \,\Phi\, (\phi) . \qquad \text{I-5}$$

O resultado para o problema, neste sistema de coordenadas, será o produto de funções exponenciais por polinômios associados de Laguerre nas variáveis ξ e η. Nessas coordenadas, o número quântico principal é $n = n_1 + n_2 + m + 1$, onde n_1 e n_2 são chamados números quânticos parabólicos[2].

Coloquemos agora o átomo descrito por I-2 num campo magnético uniforme e estudemos a modificação no seu espectro de energia.

I-2 - Átomos em Campos Magnéticos

Se o átomo descrito pela eq. I-1 for colocado numa região de campo magnético $\vec{B}$, então I-1 transforma-se em

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 - \frac{Ze^2}{r} , \qquad \text{I-6}$$

onde o campo magnético está representado pelo potencial vetor $\vec{A}$. Para um campo magnético caracterizado pelo vetor indução magnética

$\vec{B}$ orientado ao longo da direção z $\left[\vec{B} = (0,0,B)\right]$, e com a escolha do gauge simétrico $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$, teremos, em unidades atômicas ($\hbar = m = e = 1$)

$$H = H_o + H_{mag} = H_o + \frac{1}{2}\gamma L_z + \frac{1}{8}\gamma^2 r^2 \operatorname{sen}^2\theta \qquad \text{I-7}$$

onde

$$H_o = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 - \frac{Z}{r} \qquad \text{I-8}$$

é o hamiltoniano do átomo livre, L_z é a componente z do Momentum Angular e $\gamma = eB/(mc)$. Daqui para a frente, estaremos usando exclusivamente unidades atômicas, a menos que outro sistema seja citado.

Neste sistema de unidades, γ é igual à frequência de cíclotron, que é a frequência com que um elétron livre oscilaria se colocado no campo magnético $\vec{B}$. A constante γ pode ser pensada como uma medida da intensidade do campo magnético em unidades de $2{,}35 \times 10^9$ Gauss. Em coordenadas parabólicas, I-7 transforma-se em

$$H = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 - \frac{Z}{r} + \frac{1}{2}\gamma L_z + \frac{1}{8}\gamma^2 r^2 \operatorname{sen}^2\theta$$

$$= -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 - \frac{2Z}{\xi+\eta} + \frac{1}{2}\gamma L_z + \frac{1}{8}\gamma^2\xi\eta \,. \qquad \text{I-9}$$

Tomando $\gamma = 0$ em I-9, obtemos I-8 que é o hamiltoniano para o problema de Coulomb (átomo livre). Por outro lado, se fizermos $Z=0$, obteremos o seguinte hamiltoniano:

$$H = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 + \frac{1}{2}\gamma L_z + \frac{1}{8}\gamma^2\xi\eta \,. \qquad \text{I-10}$$

Este último é o hamiltoniano para o problema de Landau (partícula carregada livre num campo magnético $\vec{B}$). Devido a presença do cam po magnético, a equação I-9 corresponde àquela do átomo livre I-1, adicionada de dois termos. Um deles, chamado paramagnético, proporcional à γ (isto é, a B), enquanto que o outro, chamado diamagnético, quadrático em γ (isto é, em B). Desprezado o termo quadrático, os estados estacionários do átomo colocado no campo magnético $\vec{B}$ são basicamente os mesmos que para o caso do átomo livre. Somente as correspondentes energias serão modificadas. Neste caso, o espectro de energias será dado por[3] .

$$E'_n = E_n + \frac{m\gamma}{2} , \qquad \text{I-11}$$

onde $E_n = -Z/(2n^2)$. Este é o Efeito Zeeman usualmente tratado em livros textos. Contribuições quadráticas no campo magnético são em geral desprezadas, uma vez que sua influência somente aparece para campos muito intensos (no estado fundamental, campos da ordem de 10^9 Gauss, quando $\gamma \approx 1$) ou para estados excitados, para valores menos intensos do campo e que passam a depender do estado. Porém , hoje em dia, sabe-se da existência de campos fortes em estrelas anãs brancas (10^8 G), bem como em pulsars (10^{15} G). Além disso, é possível, usando lasers, fazer-se uma série de experimentos com estados excitados. Mantido o termo quadrático em γ na I-9, a situação apesar de aparentemente simples, deixa de ser de fácil solução. Na verdade, nos deparamos então com um problema muito difícil e até o presente momento ainda não resolvido. O já citado termo diamagnético é responsável pela quebra da simetria esférica do problema do átomo livre. Isto faz com que o hamiltoniano da equação I-9 seja não separável em qualquer dos sistemas de coordenadas existentes.

Vários fatos experimentais e teóricos sugerem que o diamagnetismo em átomos hidrogenóides, apesar de não separável , possa ser integrável (veja detalhes na série de artigos de revi são (4),(5)e(6).. Isto, aliado ao fato deste ser o principal problema ainda sem solução em Mecânica Quântica de átomos de um elétron , faz com que o problema seja muito interessante de se estudar. Com vistas a obter uma solução analítica não separável (se ela existir!), estudaremos a energia de tais átomos para campos magnéticos de intensidades arbitrárias.

CAPÍTULO II

UM ESTUDO VARIACIONAL

II-0 - Introdução

Aqui, procuramos em primeiro lugar relembrar, de maneira rápida, a técnica de aproximação a ser utilizada, qual seja a do método variacional. Na sequência, apresentamos a forma geral da função de onda tentativa procurando realçar suas principais características. Finalmente encerramos o presente capítulo com um exemplo totalmente resolvido, onde mostramos com clareza todas as passagens envolvidas desde a montagem do funcional até o resultado final para a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio no campo magnético uniforme.

II-1 - O Método Variacional

Uma das técnicas de aproximação da Mecânica Quântica, o método variacional é usado principalmente para a determinação de aproximações da energia e da função de onda do estado fundamental de um sistema, cuja solução analítica da equação de Schrödinger é desconhecida, ou cujo cálculo exato seja complicado [7]. A idéia basica por trás do método, repousa no fato de o valor esperado do hamiltoniano dar a energia média do sistema, num estado correspondente a função utilizada na avaliação deste. Esta energia média será sempre maior ou igual à energia E_o do estado fundamental do sistema. Assim,

$$\langle H \rangle \equiv \langle \Psi | H | \Psi \rangle \geqslant E_o \quad . \qquad \text{II-1}$$

O método consiste praticamente no cálculo dos vários elementos de matriz (isto é, das integrais) que aparecem em II-1, com uma função tentativa ψ que depende de um certo número de parâmetros. Calculadas estas integrais, os parâmetros são variados até que o valar esperado da energia seja um mínimo. O resultado assim obtido será um limite superior para a energia do estado fundamental do sistema.

II-2 - A Função de Onda

Muitas funções tentativas tem sido usadas para investigar variacionalmente o diamagnetismo do hidrogênio. Embora algumas dessas funções tentativas contenham características de ambos os limites, ou seja, limites de Coulomb e de Landau, a grande maioria contém ou um fator exp ($-\alpha_C\, r$) (que caracteriza uma base tipo Coulomb de simetria esférica) ou um fator exp ($-\alpha_L\, \rho^2$) (que caracteriza uma base tipo Landau de simetria cilíndrica). Os parâmetros α_C e α_L que aparecem em ambos os fatores são parâmetros variacionais apropriados. Como a simetria muda à medida que a intensidade do campo magnético varia, acabamos por ter que incluir mais e mais funções na base. Como consequência, os cálculos eventualmente podem tornar-se impraticáveis. A necessidade de um grande número de termos na base se prende ao fato de precisarmos simular a diferente simetria (diferente comportamento exponencial) apresentada à medida que a intensidade do campo magnético varia. Incluindo de forma explícita ambos os fatores exponenciais na função tentativa, é de se esperar que seja possível reduzir este número de termos necessário na base. É bom lembrar que funções contendo ambos os fatores exponenciais já foram utilizadas antes (por exemplo, por Rau et al[8] e Rau e Spruch[9]) , porém não com parâmetros variacionais flexíveis o suficiente para explorar-se com facilidade ambos os limites (B=0 e Z=0). A forma genérica da função de onda tentativa aqui investigada é aquela proposta recentemente por Gallas[10] , a saber

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = \mathcal{N} f(\xi,\eta)\, e^{-\frac{1}{2} g(\xi,\eta)}\, e^{\pm i m \phi} , \qquad \text{II-2}$$

com $\mathcal{N}$ sendo um fator de normalização. A função $f(\xi,\eta)$ é um polinômio que pode ser colocado na forma compacta abaixo:

$$f(\xi,\eta) = \sum_{i,j=0}^{\infty} c^{i+j} d_{ij}\, \xi^{i} \eta^{j} \qquad \text{II-3}$$

onde os d_{ij} são parâmetros variacionais. A função $g(\xi,\eta)$, por sua vez, é escrita na forma

$$g(\xi,\eta) = a\,(\xi+\eta + a c\, \xi\eta) , \qquad \text{II-4}$$

com **a** e **c** sendo também parâmetros variacionais, obrigatoriamente <u>não</u> negativos devido ao comportamento assintótico que a função de onda tentativa deve apresentar, enquanto (ξ,η,ϕ) são as já citadas coordenadas parabólicas. Como já mencionado, muitos pesquisadores tem estudado as propriedades espectrais de átomos hidrogenóides em campos magnéticos usando a base de Coulomb $g_c = \alpha_c r$ (com f correspondendo à auto funções de Coulomb, Slater ou Sturmian) ou a base de Landau $g_L = \alpha_L \rho^2$ (com f correspondendo a auto funções de Landau). Resultados específicos, bem como referências, são encontrados nos trabalhos já citados. Ainda que para limitados intervalos de intensidade do campo magnético, esses cálculos produzem excelentes resultados. O que acaba por acontecer, é que eventualmente atinge-se uma região de campo onde a inclusão de termos adicionais na expansão das auto funções torna o cálculo impraticável. É necessário, então, encontrar uma maneira de trocar de forma adiabática g_C e g_L . Uma das maneiras possíveis de atingir este objetivo, a qual iremos investigar em detalhes no presente trabalho, é utilizar a função

$$g(\xi,\eta) = a(\xi+\eta + ac\xi\eta) .$$

Característica importante da função de onda tentativa, II-2, é o fato de a mesma conter as soluções exatas dos problemas de Coulomb e Landau nos limites apropriados, ou seja $B \to 0$ para o limite de Coulomb e $Z \to 0$ para o de Landau, além de ser uniformemente válida em todo o intervalo $0 \leq B < \infty$. Permite ainda, como veremos na sequência, que todos os elementos de matriz necessários para o cálculo variacional possam ser convenientemente representados em termos de uma única integral.

Em termos práticos, é necessário que a série II-3 para $f(\xi,\eta)$ seja truncada em algum ponto. Supondo ocorrido o truncamento citado, resta determinar a energia E do sistema através de II-1 com a utilização de II-2 e do hamiltoniano I-9. Como estamos interessados no estado fundamental do átomo de hidrogênio no campo magnético uniforme, I-9 se reduz à

$$H = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 - \frac{2}{\xi+\eta} + \frac{1}{8}\gamma^2\xi\eta , \qquad \text{II-5}$$

já que, neste caso, $L_z = 0$ e $Z = 1$.

Uma vez que as integrais que aparecem em II-1 são de volume, temos que efetuar uma série de integrais triplas nas variáveis ξ, η e ϕ. A primeira integração é feita em ϕ. É imediata, uma vez que o integrando independe desta coordenada, e dá como resultado 2π . Restam então integrações em ξ e η , as quais são trabalhosas, porém triviais. Como não sabíamos à princípio o tamanho das expansões eventualmente necessárias, decidimos efetuar todos os cálculos algébricos utilizando rotinas, escritas em REDUCE, para o Computador IBM 4341 desta Universidade. Como a manipulação algébrica em computadores não é ainda de uso comum, descrevemos nas duas próximas seções, com detalhes, os cálculos efetuados. Os resultados analíticos explícitos, que aparecem na seção II-4, são extremamente úteis para testar códigos algébricos, como veremos mais adiante.

As integrais bidimensionais em ξ e η , acima mencionadas, podem ser facilmente reduzidas a integrais da forma geral dada abaixo:

$$Y_m^n(c) = \int_0^\infty \frac{t^n e^{-t}}{(1 + ct)^m}\, dt \quad . \qquad \text{II-6}$$

Em II-6, **m** e **n** são números inteiros satisfazendo ainda $\mathbf{m} \geq \mathbf{0}$ e $\mathbf{n} \geq \mathbf{0}$, **c** é o parâmetro variacional já citado e **t** representa a variável ξ (ou η). A família de integrais representada por II-6 não admite solução analítica em termos de funções elementares, porém pode ser trivialmente calculada numericamente (ver apêncice B).

II-3 - A Energia Total

Escolhendo-se convenientemente a constante de normalização $\mathcal{N}$ em II-2 como sendo igual a $a^{\frac{3}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}N$, a energia total pode ser colocada na forma

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = a^2 \mathbb{K} + a\,\mathbb{C} + \frac{1}{8}\gamma^2 \frac{\mathbb{Z}}{a^2} , \qquad \text{II-7}$$

onde

$$a^2 \mathbb{K} = \langle -\tfrac{1}{2} \vec{\nabla}^2 \rangle \qquad \text{II-8}$$

$$a\,\mathbb{C} = \langle -\frac{2}{\xi+\eta} \rangle \qquad \text{II-9}$$

$$\frac{\mathbb{Z}}{a^2} = \langle \xi\eta \rangle \qquad \text{II-10}$$

Os elementos de matriz $\mathbb{K}$, $\mathbb{C}$ e $\mathbb{Z}$ que aparecem em II-7 independem do parâmetro a. São função apenas dos parâmetros c, d_{ij} e das integrais Y_m^n , com os vários valores presentes de m e n dependendo da maior potência de ξ e η presente na expansão da função de onda tentativa, ou seja, de onde ocorreu o truncamento na série II-3. Acabam aparecendo então, na expressão II-7 para a energia total várias integrais Y_m^n, por exemplo, Y_1^0 , Y_3^5 , etc. Há duas opções na sequência: A primeira delas é resolver numericamente todas essas integrais; A segunda, é procurar por eventuais relações de recorrência que tornem possível reduzir a avaliação das integrais Y_m^n , para todo **m**, **n** ao cálculo de apenas uma, $Y_{m'}^{n'}$ para algum par arbitrário m', n', resolvendo então numericamente apenas esta. A segunda opção nos parece ser mais conveniente, já que envolve o cálculo numérico de apenas uma integral da família. Este objetivo é alcançado quando se faz uso das relações de recorrência[10]

$$m c\, Y_{m+1}^{n}(c) = n\, Y_m^{n-1}(c) - Y_m^{n}(c) \qquad \text{II-11}$$

$$m c\, Y_{m+1}^{0}(c) = 1 - Y_m^{0}(c) \qquad \text{II-12}$$

$$n! = Y_1^{n}(c) + c\, Y_1^{n+1}(c) , \qquad \text{II-13}$$

as quais podem ser demonstradas sem muita dificuldade.

Com isto, a energia total pode finalmente ser escrita como função dos parâmetros variacionais e de apenas uma integral ($Y = Y_{m'}^{n'}$). Os elementos de matriz, II-8/II-10, podem ser convenientemente escritos como:

$$\mathbb{K} = N^2 \left(u_1 + v_1 Y \right) \qquad \text{II-14}$$

$$\mathbb{C} = N^2 (u_2 + v_2 Y) \qquad \text{II-15}$$

$$\mathbb{Z} = N^2 (u_3 + v_3 Y) \; , \qquad \text{II-16}$$

com

$$N^{-2} = u_0 + v_0 Y \qquad \text{II-17}$$

sendo calculado à partir da condição de normalização $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. O que faz com que o parâmetro a não apareça de forma explícita nos elementos de matriz II-14/II-17, mas somente na forma mostrada na expressão da energia II-7, é a presença do fator multiplicativo $a^{3/2}$ na constante $\mathcal{N}$ de normalização.

Todo o algebrismo envolvido na determinação dos elementos de matriz finais que aparecem em II-14, II-15, II-16 e II-17 foi efetuado no computador IBM 4341 da Universidade Federal de Santa Catarina. Isto só foi possível graças à utilização de um software que permite manipulação algébrica em computadores, chamado REDUCE.

II-4 - Um Exemplo Resolvido

Nesta seção apresentaremos um exemplo totalmente resolvido com o objetivo de tornar mais claro o exposto nas duas seções anteriores. O mesmo exemplo servirá também para testar códigos algébricos de integração. No caso, utilizamos a função f (ξ, η) completa até índice igual a zero, índice sendo definido como a soma dos expoentes de ξ e η em II-3. A função da onda será dada por

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = a^{\frac{3}{2}} \pi^{-\frac{1}{2}} N \, e^{-\frac{1}{2} a (\xi + \eta + a c \xi \eta)} \, e^{\pm i m \phi} \; , \qquad \text{II-18}$$

uma vez que, neste caso, $f(\xi,\eta) = 1$. Os elementos de matriz, II-14/II-17, necessários à montagem do funcional II-7, são então calculados como segue: Da condição de normalização, $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$, podemos escrever

$$\frac{a^3 N^2}{\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} d\xi \int_0^{\infty} d\eta \, \frac{\xi+\eta}{4} \, e^{-a(\xi+\eta+ac\xi\eta)} = 1 .$$

Resolvendo para N e integrando na variável ϕ, teremos

$$N^{-2} = \frac{a^3}{2} \int_0^{\infty} d\xi \int_0^{\infty} d\eta \, \xi \, e^{-a(\xi+\eta+ac\xi\eta)}$$

$$+ \frac{a^3}{2} \int_0^{\infty} d\xi \int_0^{\infty} d\eta \, \eta \, e^{-a(\xi+\eta+ac\xi\eta)} .$$

Se, agora, integrarmos a primeira integral da expressão acima para N^{-2} na variável η e a segunda na variável ξ, resultará em

$$N^{-2} = \frac{a^3}{2} \left[\int_0^{\infty} \frac{\xi e^{-a\xi}}{(a + a^2 c \xi)} d\xi + \int_0^{\infty} \frac{\eta e^{-a\eta}}{(a + a^2 c \eta)} d\eta \right] .$$

Com o objetivo de identificar as integrais acima com aquela de II-6, devemos efetuar as seguintes mudanças de variáveis:

Na primeira, $\xi' = a\,\xi$,

Na segunda, $\eta' = a\,\eta$.

Daí, podemos escrever

$$N^{-2} = \frac{a^3}{2}\left[\int_0^\infty \frac{\xi' e^{-\xi'}}{a^3(1+c\xi')}\,d\xi' + \int_0^\infty \frac{\eta' e^{-\eta'}}{a^3(1+c\eta')}\,d\eta'\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\int_0^\infty \frac{\xi' e^{-\xi'}}{(1+c\xi')}\,d\xi' + \int_0^\infty \frac{\eta' e^{-\eta'}}{(1+c\eta')}\,d\eta'\right],$$

o que, de acordo com II-6, pode ser escrita como:

$$N^{-2} = \frac{1}{2}\left[Y_1^1(c) + Y_1^1(c)\right]$$

$$= Y_1^1(c) \qquad \text{II-19}$$

Procedendo de maneira análoga, encontramos

$$\mathbb{C} = -\langle \Psi \mid \frac{2}{\xi+\eta} \mid \Psi \rangle / a$$

$$= -N^2\, Y_1^0(c) , \qquad \text{II-20}$$

$$Z\!\!\!/ = a^2 \langle \Psi \mid \xi\eta \mid \Psi \rangle$$

$$= N^2\, Y_2^2(c) \qquad \text{II-21}$$

e, por fim,

$$\mathbb{K} = -\langle \Psi | \vec{\nabla}^2 | \Psi \rangle / (2a^2)$$

$$= N^2 \left[Y_1^0(c) + c\, Y_1^1(c) - \frac{1}{2}\, Y_1^1(c) \right.$$

$$\left. - c\, Y_2^1(c) - c^2\, Y_2^2(c) \right] \quad . \qquad \text{II-22}$$

Resta utilizarmos as relações de recorrência II-11 à II-13, e reescrever todas as integrais Y_m^n que aparecem em II-19 / II-22 em função de uma única integral, que escolheremos como sendo

$$Y \equiv Y_1^1(c) = \int_0^{\infty} \frac{t\, e^{-t}}{1 + ct}\, dt \quad . \qquad \text{II-23}$$

Os elementos de matriz de II-14 / II-17 serão dados por

$u_o = 0$

$v_o = 1$

$u_1 = 1/2$

$v_1 = 0$

$u_2 = -1$

$v_2 = c$

$u_3 = -1/c^2$

$v_3 = (1 + 2c)/c^2.$

Consequentemente, o funcional II-7

$$E = \Big[a^2(u_1 + v_1 Y) + a(u_2 + v_2 Y)$$

$$+ \gamma^2(u_3 + v_3 Y)/(8a^2)\Big] / (u_0 + v_0 Y) ,$$

para o caso, será dado por

$$E = \Big\{\frac{1}{2} a^2 + (-1 + cY)a + \gamma^2[-1 + (1+2c)Y]/$$

$$(8a^2c^2)\Big\} / Y \qquad . \qquad \text{II-24}$$

A expressão acima colocada nos dá a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio no campo magnético uniforme, em função dos parâmetros variacionais a e c, e da frequência de cíclotron γ. Resta fixar o valor de γ e minimizá-la. Resultados para $0,2 \leq \gamma \leq 5,0 \times 10^4$ (o que corresponde a $4,7 \times 10^8 G \leq B \leq 11,75 \times 10^{13} G$) são apresentados em Gallas (1985), onde são também comparados com alguns dos mais precisos valores encontrados na literatura. É usual comparar-se, em vez da energia E, a energia de ligação E_B em presença do campo magnético, a qual é definida como

$$E_B = \gamma/2 - E \qquad . \qquad \text{II-25}$$

Para outro exemplo resolvido, ver apêndice B.

CAPÍTULO III

RESULTADOS MAIS ELABORADOS

III-0 - Introdução

O objetivo do presente capítulo é apresentar os melhores resultados por nós obtidos neste problema específico, qual seja o da determinação da energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio, quando colocado numa região de campo magnético uniforme $\vec{B}$. Daremos então, na sequência, os vários resultados (relativamente às várias funções f (ξ, η) utilizadas para compor a função de onda), bem como faremos, ao final, comparação do nosso melhor resultado com aqueles encontrados na literatura.

III-1 - Resultados

Várias funções de onda tentativa foram por nós utilizadas. A tebela 1 apresenta algumas destas possibilidades. No topo da tabela, na horizontal, aparecem termos característicos da série de potencias $f(\xi, \eta) = \sum_{i,j=0}^{\infty} c^{i+j} d_{ij} \xi^i \eta^j$. A esquerda, na vertical, aparecem as várias funções f (ξ, η) efetivamente estudadas. O asterisco na intersecção das linhas horizontal e vertical significa que o termo característico está presente naquela função. Assim, por exemplo, podemos ler da tabela 1

$$f_2(\xi,\eta) = 1 + x_1 c (\xi + \eta) + x_2 c^2 \xi \eta \quad , \qquad \text{III-1}$$

entendendo-se então que a função de onda correspondente é dada por

TABELA 1 - Algumas das funções f (ξ,η) efetivamente investigadas. O asterisco indica a presença do termo característico (na horizontal) na função f (ξ,η) (na vertical).

	1	$c(\xi+\eta)$	$c^2\xi\eta$	$c^2(\xi^2+\eta^2)$	$c^3\xi\eta(\xi+\eta)$	$c^3(\xi^3+\eta^3)$	$c^4\xi^2\eta^2$	$c^4\xi\eta(\xi^2+\eta^2)$	$c^4(\xi^4+\eta^4)$	$c^5(\xi^5+\eta^5)$	$c^5\xi\eta(\xi^3+\eta^3)$	$c^5\xi^2\eta^2(\xi+\eta)$	$c^6\xi^2\eta^2(\xi^2+\eta^2)$	$c^6\xi\eta(\xi^4+\eta^4)$	$c^6\xi^3\eta^3$	$c^6(\xi^6+\eta^6)$
ÍNDICE →	0	1	2	2	3	3	4	4	4	5	5	5	6	6	6	6
$f_1(\xi,\eta)$	*	*	*	*												
$f_2(\xi,\eta)$	*	*	*													
$f_3(\xi,\eta)$	*	*	*	*	*	*										
$f_4(\xi,\eta)$	*	*	*		*											
$f_5(\xi,\eta)$	*	*	*		*		*	*								
$f_6(\xi,\eta)$	*	*	*		*		*	*				*				
$f_7(\xi,\eta)$	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				
$f_8(\xi,\eta)$	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*
$f_9(\xi,\eta)$	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	
$f_{10}(\xi,\eta)$	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*		

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = a^{\frac{3}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}N\, e^{-\frac{1}{2}g(\xi,\eta)}\, e^{\pm im\phi}\, f_2(\xi,\eta) \quad . \qquad \text{III-2}$$

A metodologia na investigação da série de potências f (ξ, η) que compõe a função de onda tentativa foi, para um índice k dado, obter os autovalores (valores de energia para os vários valores de γ) para aquele número de parâmetros variacionais. Isto feito, verificávamos a possibilidade de reduzir este número de parâmetros sem que houvesse muita alteração nas energias. Assim, iniciamos esta investigação com a função de onda tentativa correspondente a f (ξ, η) = f_1 (ξ , η), ou seja, completa até índice igual a dois (portanto, com cinco parâmetros variacionais). Obtidos os resultados para as energias (já citados no apêndice B), conseguimos reduzir para quatro o número de parâmetros sem muita alteração nas energias. A função de onda tentativa utilizada para tal foi aquela correspondente a f (ξ, η) = f_2 (ξ, η). Para descobrir quais os próximos termos a serem incluídos na expansão f(ξ, η), consideramos primeiramente o limite de campo baixo (isto é, c = 0). Tomar c = 0 tem como consequência a simplificação dos cálculos. Esperamos ainda que este procedimento venha a nos dar uma indicação de quais os termos mais relevantes em f (ξ, η).

Para c = 0, a função de onda tentativa será

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = a^{\frac{3}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}N\, e^{-\frac{1}{2}a(\xi+\eta)}\, e^{\pm im\phi} \sum_{i,j=0}^{\infty} d_{ij}\, \xi^{i}\eta^{j} \quad . \qquad \text{III-3}$$

Com esta função de onda tentativa simplificada é fácil ver que as integrais tornam-se muito mais simples:

$$Y_m^n(a) = \int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\eta \, \xi^m \eta^n e^{-a(\xi+\eta)}$$

$$= \frac{m!\,n!}{a^{m+n+2}} \qquad \text{III-4}$$

A título de exemplo, façamos $\sum_{i,j=0}^{\infty} d_{ij}\xi^i\eta^j = 1$ na equação III-3. Teremos, em consequência,

$$\mathbb{K} = -\langle\Psi|\vec{\nabla}^2|\Psi\rangle/(2a^2) = N^2/2 \qquad \text{III-5}$$

$$\mathbb{C} = -\langle\Psi|\frac{2}{\xi+\eta}|\Psi\rangle/a = -N^2 \qquad \text{III-6}$$

$$\mathbb{Z} = a^2\langle\Psi|\xi\eta|\Psi\rangle = 2N^2 \qquad \text{III-7}$$

$$N^{-2} = 1$$

e, finalmente, a energia poderá ser escrita como

$$E = \frac{1}{2}a^2 - a + \frac{1}{4}\frac{\gamma^2}{a^2} . \qquad \text{III-8}$$

A rotina Fortran colocada no apêndice D, fornece a expressão da energia a ser minimizada, para índice igual a cinco , como função dos parâmetros a e X_i, i = 1,11. A função $\tilde{f}\ (\xi,\eta)$ correspondente ao caso é

$$\tilde{f}(\xi,\eta) = 1 + x_1(\xi+\eta) + x_2\xi\eta + x_3(\xi^2+\eta^2) + x_4\xi\eta(\xi+\eta) + x_5(\xi^3+\eta^3) + x_6\xi^2\eta^2 + x_7\xi\eta(\xi^2+\eta^2) + x_8(\xi^4+\eta^4) + x_9(\xi^5+\eta^5) + x_{10}\xi\eta(\xi^3+\eta^3) + x_{11}\xi^2\eta^2(\xi+\eta). \qquad \text{III-9}$$

O resultado III-8 pode ser obtido ã partir desta rotina. Basta que façamos os X_i , i = 1,11 iguais a zero (isto corresponde ã função de onda definida para índice igual a zero, ou seja, ã $\tilde{f}\ (\ \xi,\ \eta\ ) = 1$). A utilidade de tal rotina pode ser comprovada através de uma análise da tabela 2, a qual basicamente mostra a importância relativa dos vários parâmetros presentes na expansão. Para construção da mesma, γ teve seu valor fixado em 1,0 (o que corresponde ã B = 2,35 x 10^9 Gauss). Este valor de γ corresponde fisicamente ã situação em que o campo coulombiano e o campo magnético tem a mesma intensidade, ou seja, nenhum é "perturbação" frente ao outro. Observamos da tabela 2 que:

a) para valor do índice igual a dois (2), o termo relativamente me

TABELA 2 - Importância relativa dos coeficientes presentes na expansão III-9. "E" representa a energia do estado fundamental. Todos os números são dados em unidades atômicas. A intensidade do campo magnético está fixada (através de γ) em 2,35 x 10^9 G.

$\gamma = 1{,}0$	a	$10 \times X_1$	$10^2 \times X_2$	$10^2 \times X_3$	$10^3 \times X_4$	$10^3 \times X_5$	$10^3 \times X_6$	$10^3 \times X_7$	$10^4 \times X_8$	$10^6 \times X_9$	$10^5 \times X_{10}$	$10^4 \times X_{11}$	E
ÍNDICE = 2	1,75	2,86		1,15									-0,322343
	1,40	1,81	-8,24										-0,329858
	1,39	1,80	-8,19	-0,185									-0,329906
ÍNDICE = 3	2,31	2,93	10,5	2,24		8,25							-0,329632
	1,43	1,92	-6,87	0,168	-2,87								-0,329975
	1,78	1,99	6,71	2,92	-12,8	0,950							-0,330813
ÍNDICE = 4	2,60	2,81	7,85	6,83	15,6	-3,01			12,4				-0,330437
	2,53	2,87	5,90	6,11	19,7	-1,95	-2,35		10,5				-0,330553
	1,92	2,41	5,63	2,23	-2,11	3,68		-1,26					-0,330996
	1,96	2,39	5,62	2,89	0,0714	2,47		-1,48	1,26				-0,331026
	2,07	2,62	4,33	2,98	8,72	2,81	-1,08	-1,78	2,21				-0,331037
	1,53	1,57	3,72	1,71	-19,5	0,0786	2,90						-0,331109
	1,51	1,57	3,53	1,68	-20,0	-0,0937	2,88	0,125					-0,331113
ÍNDICE = 5	2,09	2,69	4,11	2,65	10,2	4,09	-1,24	-1,84	0,786	6,94			-0,331040
	2,19	2,63	6,03	4,39	6,06	0,00865	-1,88	0,519	5,53		-15,8		-0,331096
	2,27	2,82	6,20	3,66	7,62	3,57	-2,23	1,17	1,12	26,2	-20,2		-0,331124
	1,82	2,30	1,83	1,98	6,61	2,20	-4,10	-2,12	0,483			2,78	-0,331145
	1,82	2,31	1,82	1,96	6,62	2,26	-4,11	-2,12	0,412	0,293		2,78	-0,331145
	1,87	2,37	2,14	2,33	8,37	1,84	-4,95	-1,75	1,23		-4,20	2,98	-0,331150
	1,88	2,40	2,16	2,24	8,70	2,27	-5,04	-1,72	0,738	2,37	-4,61	3,00	-0,331151

nos importante é aquele correspondente ao parâmetro X_3, ou seja, $(\xi^2 + \eta^2)$;

b) para valor do índice igual a três (3), o termo relativamente menos importante é $(\xi^3 + \eta^3)$, o qual corresponde ao parâmetro X_5;

c) para valor do índice igual a quatro (4), o termo menos importante é $(\xi^4 + \eta^4)$ com o parâmetro correspondente sendo X_8;

d) Finalmente, para índice igual a cinco (5), o termo relativamente menos importante é $(\xi^5 + \eta^5)$, que corresponde à X_9.

Destas observações, é possível concluir que o método variacional (pelo menos para o caso c = 0) tende a privilegiar termos do tipo $\xi\eta\ (\xi + \eta)$, $\xi^2\eta^2\ (\xi + \eta)$, $\xi\eta\ (\xi^2 + \eta^2)$, etc , em detrimento de termos como $(\xi^2 + \eta^2)$, $(\xi^3 + \eta^3)$, etc. Note que $\xi + \eta$ é proporcional à distância radial entre as partículas $[\ r = (\xi + \eta)/ 2\ ]$, enquanto que $\xi\eta = x^2 + y^2$. Estes dois termos aparecem no hamiltoniano. O fato do método variacional favorecer termos que aparecem no hamiltoniano, nos levou aos estudo da função tentativa correspondente à

$$f(\xi,\eta) = f_4 (\xi,\eta) \quad ,$$

onde, conforme a tabela 1,

$$f_4 (\xi,\eta) = 1 + X_1 c (\xi+\eta) + X_2 c^2 \xi\eta + X_3 c^3 \xi\eta (\xi+\eta) .$$

Conforme discussão mais detalhada apresentada no apêndice B, os resultados obtidos com a função de onda tentativa montada à partir desta expansão são melhores que aqueles anteriormente obtidos com o mesmo número de parâmetros variacionais. Em outras palavras, na função tentativa com cinco parâmetros, o termo $\xi\eta\ (\ \xi + \eta\ )$ produz resultados melhores que o termo $\xi^2 + \eta^2$. Outras expansões foram investigadas levando em consideração este favorecimento, a saber

$$
\begin{aligned}
f(\xi,\eta) &= f_5(\xi,\eta) \\
&= 1 + x_1 c(\xi+\eta) \\
&+ x_2 c^2 \xi\eta + x_3 c^3 \xi\eta(\xi+\eta) \\
&+ x_4 c^4 \xi^2\eta^2 + x_5 c^4 \xi\eta(\xi^2+\eta^2) ,
\end{aligned}
$$

e

$$
\begin{aligned}
f(\xi,\eta) &= f_6(\xi,\eta) \\
&= 1 + x_1 c(\xi+\eta) \\
&+ x_2 c^2 \xi\eta + x_3 c^3 \xi\eta(\xi+\eta) \\
&+ x_4 c^4 \xi^2\eta^2 + x_5 c^4 \xi\eta(\xi^2+\eta^2) \\
&+ x_6 c^5 \xi^2\eta^2(\xi+\eta) .
\end{aligned}
$$

Assim, dois critérios foram utilizados para nortear o crescimento no número de parâmetros da função de onda tentativa mais geral (caso $c \neq 0$), quais sejam:

a) o critério do privilégio (ou favorecimento) dado a algum tipo de termo na expansão em detrimento de outro tipo, conforme já explicado, e,

b) o de trabalhar com a expansão $f (\xi, \eta)$ completa até índice igual a k, k sendo um inteiro positivo ou zero.

Em relação ao critério b e, conforme a tabela 1, utilizamos neste trabalho os valores do índice k dados abaixo:

índice	$f(\xi,\eta)$	Nº de parâmetros
2	f_1	5
3	f_3	7
5	f_7	13
6	f_8	17

Nossos resultados para a energia de ligação do átomo de hidrogênio num campo magnético uniforme, para $0,2 \leq \gamma \leq 2,0 \times 10^4$ (o que corresponde à $4,7 \times 10^8$ G $\leq B \leq 4,7 \times 10^{13}$ G) relativos à utilização de cada uma das funções $f (\xi, \eta)$ constantes da tabela 1, são dados na tabela 3. Devemos, antes de mais nada, salientar que à partir da função tentativa $\psi (\xi, \eta , \phi)$ correspondente à $f (\xi, \eta) = f_6 (\xi, \eta)$, a sistemática utilizada para a minimização da energia foi modificada. Ao invés da minimização multiparamétrica (procedimento até então utilizado), preferimos partir para uma formulação matricial do problema. Com isto, independentemente da ordem da matriz, a qual é fixada pelo número de parâmetros variacionais, a minimização passa a ser feita sempre em apenas dois

TABELA 3 - Resultados para a energia de ligação do átomo de hidrogênio num campo magnético uniforme, relativos à utilização de cada uma das funções f (ξ,η) constantes da tab.1. Todos os números são dados em unidades atômicas. A intensidade do campo magnético γ é definida em unidades de $2,35 \times 10^9$ G.

γ	E_{f_1}	E_{f_2}	E_{f_3}	E_{f_4}	E_{f_5}	E_{f_6}	E_{f_7}	E_{f_8}	E_{f_9}	$E_{f_{10}}$
0,2	0,59038	0,59038	0,59038	0,59038	0,59038	0,59038	0,59038		0,59038	0,59038
0,5	0,69720	0,69720	0,69720	0,69720	0,69721	0,69721	0,69721		0,69721	0,69721
0,8	0,78227	0,78225	0,78228	0,78227	0,78228	0,78228	0,78228		0,78228	0,78228
1,0	0,83114	0,83112	0,83116	0,83116	0,83117	0,83117	0,83117	*	0,83117	0,83117
2,0	1,02213	1,02206	1,02219	1,02218	1,02220	1,02220	1,02221		1,02221	1,02221
3,0	1,16439	1,16426	1,16449	1,16447	1,16451	1,16452	1,16453		1,16453	1,16453
4,0	1,28059	1,28042	1,28073	1,28070	1,28077	1,28078	1,28080		1,28080	1,28080
5,0	1,38013	1,37991	1,38031	1,38028	1,38036	1,38037	1,38040		1,38040	1,38040
10,0	1,74722	1,74686	1,74761	1,74758	1,74774	1,74777	1,74780	1,74780	1,74780	1,74780
15,0	2,00721	2,00677	2,00780	2,00777	2,00800	2,00803	2,00806	2,00806	2,00806	2,00806
20,0	2,21431	2,21380	2,21507	2,21504	2,21533	2,21536	2,21539	2,21540	2,21540	2,21540
25,0	2,38883	2,38829	2,38976	2,38973	2,39007	2,39009	2,39013	2,39014	2,39014	2,39013
40,0	2,79919	2,79857	2,80053	2,80048	2,80094	2,80093	2,80102	2,80103	2,80103	2,80102
50,0	3,01574	3,01508	3,01730	3,01723	3,01776	3,01772	3,01784	3,01786	3,01786	3,01785
100,0	3,78662	3,78590	3,78907	3,78871	3,78952	3,78935	3,78977	3,78980	3,78980	3,78980
200,0	4,72251	4,72182	4,72627	4,72498	4,72626	4,72586	4,72709	4,72714	4,72713	4,72713
300,0	5,35500	5,35438	5,35986	5,35749	5,35920	5,35862	5,36074	5,36081	5,36080	5,36079
500,0	6,24916	6,24868	6,25604	6,25141	6,25394	6,25306	6,25700	6,25707	6,25707	6,25706
1000,0	7,64975	7,64950	7,66117	7,65133	7,65562	7,65420	7,66231	7,66239	7,66239	7,66238
2000,0	9,28399	9,28390	9,30295	9,28477	9,29149	9,28955	9,30462	9,30471	9,30470	9,30469
3000,0	10,35577	10,35574	10,38091	10,35617	10,36456	10,36242	10,38322	10,38332	10,38332	10,38330
5000,0	11,83453	11,83453	11,86953	11,83463	11,84505	11,84309	11,87314	11,87328	11,87328	11,87326
10 000,0	14,08167	14,08167	14,13389	14,08168	14,09563	14,08854	14,14038	14,14063	14,14063	14,14061
20000,0	16,62068	16,62068	16,69427	16,62083	16,63834	16,63098	16,70576	16,70563	16,70563	16,70562

* Veja a seção III-2

parâmetros variacionais, a saber a e c. Este novo procedimento foi adotado, devido ao fato que a medida que o número de parâmetros cresce, fica mais e mais difícil a inicialização dos vários parâmetros no processo de minimização. Parece que existe uma série de mínimos. Qual deles estamos encontrando (absoluto ou relativos) é uma questão difícil de responder. Além disso, há uma dependência muito grande do resultado final para a energia com a inicialização utilizada para os vários parâmetros. Com a adoção de uma formulação matricial, o que fazemos, na prática, é diagonalizar a matriz do hamiltoniano determinando seus autovalores, com posterior minimização nos parâmetros já citados. A diagonalização matricial fixa automaticamente os vários parâmetros variacionais d_{ij} e converge sempre para o mínimo absoluto.

O problema de autovalores a ser resolvido é do tipo

$$\mathbb{A}\,|\Psi_i\rangle = \lambda_i\,\mathbb{B}\,|\Psi_i\rangle \quad , \qquad \text{III-10}$$

sendo, portanto, um problema de autovalores generalizado. Isto se deve ao fato de a base aqui utilizada ser uma base não ortogonal. Ainda com relação à equação III-10, os λ_i que lá aparecem são os autovalores, com os respectivos Kets $|\psi_i\rangle$ sendo os autovetores do sistema. Para determinação dos autovalores λ_i (isto é, para diagonalizar a matriz) dos quais é de interesse somente o menor, uma vez que estamos investigando o estado fundamental, utilizamos uma rotina da Biblioteca Harwell, a saber EA11AD. No apêndice C, apresentamos a subrotina Fortran que fornece os elementos da matriz a ser diagonalizada. Esta diz respeito à função de onda tentativa $\psi(\xi,\eta,\phi)$ correspondente à $f(\xi,\eta) = f_8(\xi,\eta)$, ou seja, dependente de dezessete parâmetros variacionais. É importante observar que qualquer matriz de ordem menor, correspondente à qualquer das funções $f\ (\xi,\eta)$ constantes da tabela 1, pode ser obtida à partir desta através da simples omissão de termos não pertinentes.

III-2 - **Análise Comparativa**

A análise que pretendemos fazer aqui diz respeito a comparação do nosso melhor resultado, o qual consta da tabela 3, com os mais precisos encontrados na literatura. Como pode se observar, nosso melhor resultado foi conseguido com utilização da função de onda tentativa $\psi(\xi\ ,\eta\ ,\ \phi\ )$ dada por

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = a^{\frac{3}{2}}\,\pi^{-\frac{1}{2}}\,N\,e^{\pm im\phi}\,e^{-\frac{1}{2}g(\xi,\eta)}\,f_9(\xi,\eta)\ , \qquad \text{III-11}$$

$$\begin{aligned} f_9(\xi,\eta) = {} & 1 + x_1 c(\xi+\eta) \\ & + x_2 c^2 \xi\eta + x_3 c^2(\xi^2+\eta^2) \\ & + x_4 c^3 \xi\eta(\xi+\eta) + x_5 c^3(\xi^3+\eta^3) \\ & + x_6 c^4 \xi^2\eta^2 + x_7 c^4 \xi\eta(\xi^2+\eta^2) + x_8 c^4(\xi^4+\eta^4) \\ & + x_9 c^5(\xi^5+\eta^5) + x_{10} c^5 \xi\eta(\xi^3+\eta^3) + x_{11} c^5 \xi^2\eta^2(\xi+\eta) \end{aligned}$$

$$+ X_{12}\, c^6 \xi^2 \eta^2 (\xi^2 + \eta^2) + X_{13}\, c^6 \xi \eta (\xi^4 + \eta^4)$$

$$+ X_{14}\, c^6 \xi^3 \eta^3 ,$$

ou seja, à função dependente dos dezesseis parâmetros variacionais a, c e X_i, i = 1,14. Este resultado, para $0,2 \leq \gamma \leq 2,0 \times 10^4$ (isto é, $4,7 \times 10^8$ G $\leq$ B $\leq$ $4,7 \times 10^{13}$ G), é apresentado na tabela 4 com alguns dos mais precisos valores tomados da literatura. Observe que o que estamos comparando são as energias de ligação $E_B = \gamma/2 - E$, e não as do estado fundamental. Estes valores tomados da literatura são, em geral, resultado de cálculos bem mais elaborados que o nosso. Aquele de Surmelian e O'Connell (SO) (1974, 1976), por exemplo , foi obtido de um cálculo variacional como o nosso, só que utilizando em torno de cento e oitenta parâmetros variacionais (os números constantes da tabela 4 são dados na tabela 2, página 34, de Surmelian (1974)). Simola e Virtamo (SV) (1978) utilizaram o método da aproximação adiabática juntamente com uma determinação numérica iterativa auto consistente de autovalores.

Wunner & Ruder (WR) (1982) (veja também Rösner et al (1984), Forster et al (1984)) adaptaram um código de computadores devido a Froese Fischer (veja Wunner & Ruder (1982)) para resolver um sistema de equações tipo Hartree-Fock. Utilizaram uma base de Coulomb para campos fracos e estados de Landau para campos fortes. Le Guillou & Zinn Justin (LZ) (1983) obtiveram seus resultados de um método apropriado de soma de Teoria de Perturbação. Usaram como entrada em seus cálculos, coeficientes de Teoria de Perturbação de ordem sessenta e dois. Além disso, seus cálculos foram feitos com precisão

TABELA 4 - Comparação das energias de ligação, $E_B = \gamma/2 - E$, com resultados tomados da literatura. Todos os números são dados em unidades atômicas. A intensidade do campo magnético γ é definida em unidades de $2,35 \times 10^9$ G. SO, Surmelian & O'Connell (1974, 1976); SV, Simola & Virtamo (1978); WR, Wunner & Ruder (1982; LZ, LeGuillou & Zinn-Justin (1983); S, Silverman (1983); BV, Baye & Vincke (1984).

Note que WR fornecem seus resultados em Rydbergs (uma unidade atômica igual à meio Rydberg), sendo suas energias portanto favorecidas nos arredondamentos. Por exemplo, para $\gamma = 40,0$, $E_{WR} = 5,60\ 17$ Rydbergs que, convertido em unidades atômicas pode dar qualquer valor entre $2,80085 \leq E \leq 2,80087$. Na tabela foi acrescentado um dígito (o sublinhado) às energias de WR para garantir o arrendondamento correto.

O dígito acrescentado foi escolhido no sentido de favorecer os resultados de WR em unidades atômicas.

γ	E_B (16 p.v.) nosso resultado	E_B (17 p.v.) nosso resultado	SO	SV	WR	LZ	S	BV
0,2	0,59038156		0,5904		0,59038156$\underline{7}$	0,59038	0,59036	
0,5	0,69721052		0,6972			0,69721	0,69721	
0,8	0,78228332					0,78228		
1,0	0,83116889		0,8312		0,83116889$\underline{7}$	0,83116	0,83116	0,830895
2,0	1,02221389		1,0222	1,022	1,02221391$\underline{2}$	1,02221	1,02223	1,02204
3,0	1,16453293				1,16453299$\underline{2}$	1,16453	1,16461	
4,0	1,28079790				1,28079801$\underline{7}$		1,28087	
5,0	1,38039869		1,380			1,38040	1,38024	
10,0	1,74779674	1,74779678	1,748		1,747796$\underline{7}$	1,7478	1,7436	1,747715
15,0	2,00806344	2,00806348	2,005			2,0081		
20,0	2,21539760	2,21539768		2,2153	2,21538$\underline{7}$	2,2153	2,145	2,215335
25,0	2,39013549	2,39013561	2,390	2,3889		2,390		
40,0	2,80102805	2,80102839	2,795		2,8008$\underline{7}$			
50,0	3,01785852	3,01785908						
100,0	3,78979948	3,78980194	3,780	3,789	3,7890$\underline{7}$	3,790	5,2	3,78977
200,0	4,72713433	4,72714116	4,690	4,727	4,7265$\underline{7}$	4,725	7,5	4,72712
300,0	5,36079910	5,36080812	5,285		5,3603$\underline{2}$	5,355		
500,0	6,25706631	6,25707442						
1000,0	7,66238767	7,66239292			7,6620$\underline{7}$	7,64	13	7,662405
2000,0	9,30470576	9,30470895		9,30	9,30448$\underline{2}$	9,27	7	9,30475
3000,0	10,38331771	10,38331918						
5000,0	11,87327951	11,87328031						
10000,0	14,14062867	14,14062904						
20000,0	16,70563164	16,70563180		16,70		16,55		

numérica bastante alta (usaram cerca de vinte e sete algarismos). Silverman (S) (1983) usou uma transformação de Euler generalizada como um método alternativo de somar séries de perturbação fortemente divergentes. Baye & Vincke (BV) (1984) obtiveram seus resultados também de um cálculo variacional. Utilizaram pelo menos dezoito parâmetros variacionais. Trabalharam com uma base de simetria cilíndrica, tipo Landau, o que fez com que conseguissem bons resultados para campos fortes, mas resultados ruins para campos fracos. É interessante observar que nossa função de onda tentativa, dependente na forma mais geral até aqui estudada de dezesseis parâmetros variacionais, fornece os melhores resultados sobre quase todo o intervalo de variação do campo magnético, seja ele fraco ou forte.

Na tabela 4, pode-se observar ainda que apenas LZ e WR apresentam resultados bons sobre todo o intervalo de variação do campo magnético. Nossos resultados são melhores que os de LZ. São também melhores que os de WR se considerarmos que os mesmos não utilizaram uma única base. Como já dito, usaram uma base de Coulomb para campos fracos e estados de Landau para campos fortes, enquanto que nós utilizamos uma única base nesta investigação, independentemente da intensidade do campo. Estritamente temos resultados melhores para $\gamma \geq 10,0$, enquanto que para $\gamma < 10,0$ nossos valores coincidem em pelo menos cinco casas decimais.

Constam ainda da tabela 4 resultados parciais da investigação da função de onda $\psi(\xi,\eta,\phi)$ correspondente à $f(\xi,\eta) = f_8(\xi,\eta)$. Este é o caso em que a função está completa até índice igual à seis, o que equivale a um total de dezessete parâmetros variacionais. Apresentamos apenas os valores da energia de ligação para $\gamma \geq 10,0$. Isto porque para $\gamma < 10,0$, a minimização começa a ficar instável, chegando ao ponto de a energia depender, para alguns valores de γ menores que dez, da fixação do infinito na integral Y. Este comportamento é, quase certamente, devido a termos atingido o limite de precisão do computador IBM 4341 (16 dígitos significativos em precisão dupla ; a redução da precisão dos resultados apresentados deve-se às numerosas iterações envolvidas).

Com relação aos parâmetros variacionais, e para que se possa observar a importância relativa dos mesmos, veja as tabelas 5 e 5A.

Todos os resultados por nós obtidos estão baseados num modelo não relativístico. Esta aproximação é de uso frequente na literatura. É bom observar, no entanto, que existe um limite de intensidade do campo magnético para o qual o modelo permanece válido. Este limite é obtido fazendo-se uma estimativa do campo magnético necessário para produzir uma diferença de energia de $m c^2$ entre níveis de Landau vizinhos. Isto define o valor de $| \vec{B} |$ à partir do qual a correção relativística passa a ter importância significativa, qual seja

$$|\vec{B}| = m^2 c^3 / (e\hbar) \approx 4{,}4 \times 10^{13}\ G \ (\text{isto é},\ \gamma \approx 18700).$$

Além disso, é bom observar também que todos os resultados aqui obtidos utilizaram a hipótese de que o próton é infinitamente pesado. Para o estado fundamental, esta hipótese é sempre boa (conforme discutido em detalhes por Wunner e Ruder (1982)).

TABELA 5 - Valores dos parâmetros variacionais que minimizam a energia obtida pela utilização de III-11 em II-7.

γ	a	c	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8	X_9	X_{10}	X_{11}	X_{12}	X_{13}	X_{14}
0,2	1,0049	0,0596	42(-3)	74(-1)	-12(-2)	-27(-1)	56(-3)	21	-32(-1)	-58(-3)	20(-3)	31(-1)	-36(-1)	-13	-36(-2)	12
0,5	0,9013	0,1922	-28(-2)	21(-1)	-35(-3)	-13(-1)	31(-3)	23(-1)	93(-3)	-73(-4)	74(-5)	12(-2)	-11(-1)	11(-2)	-25(-3)	45(-2)
0,8	1,7309	0,0543	39(-1)	20	70(-1)	30	88(-1)	96	29	29(-1)	91(-1)	34(-2)	-17(1)	-68	-77	-56
1,0	1,6474	0,1076	18(-1)	62(-1)	15(-1)	47(-1)	69(-2)	91(-1)	17(-1)	18(-2)	89(-3)	-92(-2)	-75(-2)	-41(-1)	-43(-2)	-26(-1)
2,0	1,8808	0,2137	11(-1)	25(-1)	49(-2)	14(-1)	14(-2)	13(-1)	75(-3)	10(-3)	59(-4)	21(-3)	63(-2)	-33(-2)	-12(-2)	13(-2)
3,0	2,0704	0,2814	92(-2)	17(-1)	34(-2)	76(-2)	77(-3)	66(-2)	27(-3)	36(-4)	24(-4)	89(-4)	23(-2)	-10(-2)	-26(-4)	90(-3)
4,0	2,2109	0,3422	80(-2)	13(-1)	25(-2)	49(-2)	48(-3)	41(-2)	11(-3)	16(-4)	11(-4)	43(-4)	10(-2)	-41(-3)	-66(-5)	56(-3)
5,0	2,3320	0,3944	73(-2)	11(-1)	20(-2)	36(-2)	35(-3)	29(-2)	53(-4)	89(-5)	67(-5)	29(-4)	54(-3)	-21(-3)	-23(-5)	37(-3)
10,0	2,1831	0,7635	36(-2)	24(-2)	28(-3)	-25(-3)	-45(-5)	15(-3)	-17(-3)	10(-5)	-12(-7)	15(-4)	-76(-4)	10(-4)	-72(-6)	20(-4)
15,0	2,4670	0,9367	32(-2)	18(-2)	24(-3)	-17(-3)	23(-6)	12(-3)	-85(-4)	69(-6)	-36(-8)	56(-5)	-45(-4)	46(-5)	-27(-6)	97(-5)
20,0	2,6908	1,0809	29(-2)	14(-2)	21(-3)	-13(-3)	19(-5)	92(-4)	-51(-4)	50(-6)	46(-9)	28(-5)	-30(-4)	26(-5)	-14(-6)	57(-5)
25,0	2,8774	1,2071	27(-2)	12(-2)	18(-3)	-99(-4)	25(-5)	76(-4)	-34(-4)	37(-6)	23(-8)	16(-5)	-22(-4)	16(-5)	-87(-7)	38(-5)
40,0	3,3145	1,5145	23(-2)	84(-3)	13(-3)	-58(-4)	30(-5)	46(-4)	-15(-4)	18(-6)	36(-8)	59(-6)	-11(-4)	62(-6)	-33(-7)	16(-5)
50,0	3,5331	1,6929	21(-2)	69(-3)	11(-3)	-46(-4)	28(-5)	35(-4)	-98(-5)	12(-6)	31(-8)	37(-6)	-73(-5)	38(-6)	-20(-7)	99(-6)
100,0	4,2314	2,4408	16(-2)	35(-3)	58(-4)	-27(-4)	16(-5)	13(-4)	-25(-5)	23(-7)	11(-8)	73(-7)	-20(-5)	82(-7)	37(-8)	22(-6)
200,0	4,9183	3,6488	11(-2)	14(-3)	24(-4)	-18(-4)	68(-6)	43(-5)	-48(-6)	22(-8)	22(-9)	63(-8)	-46(-6)	16(-7)	-47(-9)	36(-7)
300,0	5,2819	4,7509	86(-3)	66(-4)	12(-4)	-13(-4)	36(-6)	21(-5)	-11(-6)	-42(-10)	65(-10)	-75(-9)	-16(-6)	55(-8)	-11(-9)	10(-7)
500,0	5,7154	6,8024	61(-3)	20(-4)	45(-5)	-70(-5)	15(-6)	83(-6)	12(-7)	-41(-9)	12(-10)	-11(-8)	-38(-7)	11(-8)	-11(-10)	14(-8)
1000,0	6,5890	10,5897	40(-3)	91(-5)	14(-5)	-24(-5)	57(-7)	22(-6)	12(-7)	-20(-9)	21(-11)	-25(-9)	-72(-8)	12(-9)	-62(-12)	16(-9)
2000,0	7,5409	19,0001	23(-3)	37(-4)	30(-6)	14(-6)	13(-7)	12(-6)	75(-8)	-36(-10)	16(-12)	-34(-10)	-16(-8)	17(-10)	16(-12)	14(-9)
3000,0	8,2532	23,5204	19(-3)	26(-4)	18(-6)	55(-7)	80(-8)	57(-7)	39(-8)	-20(-10)	70(-13)	-16(-10)	-65(-9)	56(-11)	59(-13)	42(-10)
5000,0	9,2208	31,0401	14(-3)	16(-4)	92(-7)	15(-7)	41(-8)	22(-7)	16(-8)	-86(-11)	23(-13)	-53(-11)	-20(-9)	13(-11)	15(-13)	93(-11)
10 000,0	10,6230	46,2403	97(-4)	81(-5)	35(-7)	14(-8)	15(-8)	56(-8)	44(-9)	-23(-11)	41(-14)	-11(-11)	-35(-10)	17(-12)	20(-14)	12(-11)
20 000,0	12,1042	70,6003	64(-4)	40(-5)	12(-7)	-41(-9)	48(-9)	13(-8)	11(-9)	-53(-12)	61(-15)	-18(-12)	-51(-11)	18(-13)	23(-15)	15(-12)

TABELA 5A - Valores dos parâmetros variacionais que minimizam a energia obtida pela utilização da função de onda completa até índice igual a seis em II-7.

γ	a	C	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8	X_9	X_{10}	X_{11}	X_{12}	X_{13}	X_{14}	X_{15}
0,2																	
0,5																	
0,8																	
1,0																	
2,0																	
3,0																	
4,0																	
5,0																	
10,0	2,1695	0,7694	35 (-2)	24 (-2)	28 (-3)	-30 (-3)	-13 (-4)	15 (-3)	-16 (-3)	30 (-5)	-23 (-6)	14 (-4)	-74 (-4)	99 (-5)	-66 (-6)	20 (-4)	82 (-8)
15,0	2,4384	0,9582	31 (-2)	17 (-2)	22 (-3)	-19 (-3)	-43 (-5)	11 (-3)	-77 (-4)	13 (-5)	-70 (-7)	51 (-5)	-42 (-4)	42 (-5)	-24 (-6)	88 (-5)	20 (-8)
20,0	2,6623	1,1025	28 (-2)	14 (-2)	19 (-3)	-14 (-3)	-16 (-5)	91 (-4)	-46 (-4)	94 (-6)	-39 (-7)	25 (-5)	-28 (-4)	24 (-5)	-12 (-6)	53 (-5)	10 (-8)
25,0	2,8488	1,2288	26 (-2)	12 (-2)	17 (-3)	-11 (-3)	-38 (-6)	75 (-4)	-30 (-4)	71 (-6)	-25 (-7)	14 (-5)	-21 (-4)	16 (-5)	-74 (-7)	35 (-5)	65 (-9)
40,0	3,2916	1,5316	23 (-2)	82 (-3)	13 (-3)	-68 (-4)	98 (-6)	47 (-4)	-13 (-4)	39 (-6)	-10 (-7)	46 (-6)	-10 (-4)	62 (-6)	-28 (-7)	15 (-5)	26 (-9)
50,0	3,5278	1,6950	21 (-2)	70 (-3)	12 (-3)	-53 (-4)	12 (-5)	37 (-4)	-88 (-5)	30 (-6)	-66 (-8)	28 (-6)	-75 (-5)	39 (-6)	-18 (-7)	10 (-5)	18 (-9)
100,0	4,3467	2,3366	16 (-2)	41 (-3)	73 (-4)	-24 (-4)	11 (-5)	16 (-4)	-25 (-5)	12 (-6)	-18 (-8)	70 (-7)	-24 (-5)	90 (-7)	-44 (-8)	26 (-6)	51 (-10)
200,0	5,2500	3,3200	12 (-2)	22 (-3)	39 (-4)	-11 (-4)	61 (-6)	60 (-5)	-54 (-6)	39 (-7)	-49 (-9)	14 (-7)	-66 (-6)	18 (-7)	-78 (-9)	56 (-7)	11 (-10)
300,0	5,8025	4,1523	10 (-2)	16 (-3)	26 (-4)	-69 (-5)	37 (-6)	32 (-5)	-16 (-6)	18 (-7)	-20 (-9)	42 (-8)	-29 (-6)	62 (-8)	-23 (-9)	21 (-7)	38 (-11)
500,0	6,4860	5,6573	74 (-3)	96 (-4)	13 (-4)	-36 (-5)	18 (-6)	14 (-5)	65 (-8)	56 (-8)	-50 (-10)	15 (-9)	-94 (-7)	15 (-8)	-34 (-10)	51 (-8)	74 (-12)
1000,0	7,3832	9,0113	48 (-3)	52 (-4)	45 (-5)	-12 (-5)	64 (-7)	43 (-6)	29 (-7)	72 (-9)	-44 (-11)	-28 (-9)	-18 (-7)	18 (-9)	58 (-14)	65 (-9)	49 (-13)
2000,0	8,1255	15,4811	28 (-3)	31 (-4)	10 (-5)	-20 (-6)	20 (-7)	12 (-6)	11 (-7)	12 (-10)	24 (-14)	-70 (-10)	-27 (-8)	20 (-10)	29 (-12)	86 (-10)	14 (-14)
3000,0	8,5157	21,6594	20 (-3)	24 (-4)	35 (-6)	-11 (-7)	93 (-8)	57 (-7)	47 (-8)	-15 (-10)	62 (-13)	-22 (-10)	-82 (-9)	60 (-11)	81 (-13)	34 (-10)	89 (-16)
5000,0	9,3647	29,8506	15 (-3)	15 (-4)	14 (-6)	-52 (-9)	44 (-8)	22 (-7)	18 (-8)	-80 (-11)	22 (-13)	-62 (-11)	-22 (-9)	14 (-11)	18 (-13)	83 (-11)	78 (-17)
10000,0	10,6963	45,4796	98 (-4)	80 (-5)	43 (-7)	-10 (-8)	15 (-8)	56 (-8)	46 (-9)	-23 (-11)	41 (-14)	-11 (-11)	-36 (-10)	17 (-12)	22 (-14)	11 (-11)	35 (-18)
20000,0	12,1434	70,0703	64 (-4)	40 (-5)	13 (-7)	-82 (-9)	48 (-9)	13 (-8)	11 (-9)	-53 (-12)	61 (-15)	-19 (-12)	-52 (-11)	18 (-13)	24 (-15)	14 (-12)	15 (-19)

CONCLUSÕES

Como visto no decorrer do trabalho, dos vários resultados obtidos vale a pena ressaltar os seguintes:

a) Em geral obtivemos os melhores autovalores de energia para o estado fundamental de um átomo de hidrogênio num campo magnético uniforme de intensidade arbitrária;

b) Nosso resultado (obtido com dezesseis parâmetros variacionais) é melhor que resultados variacionais anteriores contendo cento e oitenta parâmetros, sendo também melhor que resultados de certas somas de teoria de perturbação de ordem 62;

c) Obtivemos uma expansão em série de potencias de ξ e η , para a função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio, que privilegia parcelas envolvendo os termos que aparecem no potencial:

$$r = \frac{1}{2} (\xi + \eta) \quad e \quad r^2 sen^2\theta = x^2 + y^2 = \xi\eta \, .$$

d) A menos de normalização e da dependência em ϕ, esta expansão é dada por

$$\Psi(\xi,\eta) = e^{-\frac{1}{2}a(\xi+\eta+ac\xi\eta)} \Big\{ 1 + x_1 c(\xi+\eta)$$

$$+ x_2 c^2 \xi\eta + x_3 c^2 (\xi^2+\eta^2)$$

$$+ x_4 c^3 \xi\eta(\xi+\eta) + x_5 c^3 (\xi^3+\eta^3)$$

$$+ X_6 c^4 \xi^2 \eta^2 + X_7 c^4 \xi \eta (\xi^2+\eta^2) + X_8 c^4 (\xi^4+\eta^4)$$

$$+ X_9 c^5 (\xi^5+\eta^5) + X_{10} c^5 \xi\eta (\xi^3+\eta^3) + X_{11} c^5 \xi^2\eta^2 (\xi+\eta)$$

$$+ X_{12} c^6 \xi^2\eta^2 (\xi^2+\eta^2) + X_{13} c^6 \xi\eta (\xi^4+\eta^4) + X_{14} c^6 \xi^3\eta^3 \Big\} ,$$

onde os parâmetros variacionais $a, c, X_1, X_2, \ldots, X_{14}$ são dados na tabela 5 como função do campo magnético.

Importante também foi o desenvolvimento de um software REDUCE para efetuar todos os cálculos algébricos necessários com auxílio de computadores.

É nossa intenção, na sequência do trabalho apresentado nesta dissertação, passar ao estudo dos estados excitados, ou seja, pretendemos verificar as propriedades de convergência da base, aqui utilizada para o estudo do estado fundamental, também para os estados excitados. Um passo posterior, é a tentativa de utilização destas autofunções para a investigação de propriedades moleculares.

APÊNDICE A

AS COORDENADAS PARABÓLICAS

As coordenadas parabólicas ξ , η , ϕ são dadas em termos das coordenadas cartesianas x, y, z pelas relações

$$\xi = r + z \qquad x = \sqrt{\xi\eta}\cos\phi$$

$$\eta = r - z \qquad y = \sqrt{\xi\eta}\,\mathrm{sen}\,\phi \qquad \text{A-1}$$

$$\phi = \mathrm{arctg}\,(y/x) \qquad z = (\xi-\eta)/2$$

onde $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$. Analogamente ao caso de coordenadas esféricas, a coordenada ϕ é definida no intervalo compreendido entre zero e 2π , enquanto ξ e η são definidas no intervalo entre zero e infinito. Para nosso propósito neste trabalho, necessitamos ainda do operador $\vec{\nabla}^2$ nestas coordenadas, o qual é dado por

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right] + \frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} , \qquad \text{A-2}$$

e do elemento infinitesimal de volume

$$d^3\vec{r} = \frac{1}{4}(\xi+\eta)\, d\xi\, d\eta\, d\phi \; . \qquad \text{A-3}$$

APÊNDICE B

OUTRO EXEMPLO

Na função de onda tentativa do exemplo colocado na seção II-4, a dependência está em dois parâmetros, a saber a e c . Neste apêndice, apresentamos outro exemplo. Este visa mostrar explicitamente a grande simplificação que se pode obter através do uso das relações de recorrência para os Y_m^n (c), além de fornecer subsídios para o teste de rotinas de integração algébrica. Para o caso, utilizamos a função f (ξ, η) completa até índice igual a dois (2) inclusive. Assim, agora, a função de onda tentativa é dependente de cinco (5) parâmetros e é dada por[20]

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = a^{3/2}\,\pi^{-1/2}\,N\,e^{-\frac{1}{2}g(\xi,\eta)}\,e^{\pm im\phi}\Big\{1 + x_1 c(\xi+\eta) + x_2 c^2 \xi\eta + x_3 c^2(\xi^2+\eta^2)\Big\} \qquad \text{B-1}$$

com g (ξ , η) sendo dada por II-4. Mostraremos agora detalhes do cálculo dos resultados apresentados na referência (20).

A utilização de B-1 como função de onda tentativa , permite que possamos escrever os elementos de matriz $\mathbb{K}$, $\mathbb{C}$ e $\mathbb{Z}$ de II-7 , explicitamente como

$$\mathbb{K} = \frac{N^2}{2}\Big[\, X_1^2\, c^2(-8Y_1^1 + 8Y_1^2 - Y_1^3 + 2Y_1^3\, c + 8Y_2^1 - 3Y_2^2 +$$

$$14Y_2^2 c - 4Y_2^3 c - Y_2^4 c^2 - 8Y_3^2 c - 6Y_3^3 c^2) + X_1 X_2 c^2 ($$

$$-4Y_1^2c - 8Y_2^1c + 20Y_2^2c - 2Y_2^3c + 8Y_2^3c^2 - 4Y_3^2c +$$

$$24Y_3^2c^2 - 16Y_3^3c^2 - 4Y_3^4c^3 - 12Y_4^3c^3) + X_1X_3c^2(-24Y_1^2c$$

$$+ 20Y_1^3c - 2Y_1^4c + 4Y_1^4c^2 - 16Y_2^1c + 20Y_2^2c - 4Y_2^3c +$$

$$24Y_2^3c^2 - 8Y_2^4c^2 - 2Y_2^5c^3 - 4Y_3^2c + 24Y_3^2c^2 - 16Y_3^3c^2 -$$

$$8Y_3^4c^3 - 12Y_4^3c^3) + X_1(-4Y_1^0c + 12Y_1^1c - 2Y_1^2c +$$

$$4Y_1^2c^2 - 2Y_2^1c + 8Y_2^1c^2 - 8Y_2^2c^2 - 2Y_2^3c^3 - 4Y_3^2c^3) +$$

$$X_2^2c^2(-4Y_2^2c^2 + 12Y_3^2c^2 - 2Y_3^3c^2 + 12Y_3^3c^3 - 12Y_4^3c^3 -$$

$$6Y_4^4c^4) + X_2X_3c^2(-4Y_1^3c^2 - 20Y_2^2c^2 + 24Y_2^3c^2 - 2Y_2^4c^2$$

$$+ 8Y_2^4c^3 - 4Y_3^3c^2 + 32Y_3^3c^3 - 16Y_3^4c^3 - 4Y_3^5c^4 - 12Y_4^4c^4)$$

$$+ X_2c^2(-4Y_1^1 + 8Y_2^1 - 2Y_2^2 + 8Y_2^2c - 8Y_3^2c - 4Y_3^3c^2) +$$

$$X_3^2c^2(-16Y_1^3c^2 + 12Y_1^4c^2 - Y_1^5c^2 + 2Y_1^5c^3 - 16Y_2^2c^2 - Y_2^4c^2$$

$$+ 10Y_2^4c^3 - 4Y_2^5c^3 - Y_2^6c^4 + 24Y_3^2c^2 - 4Y_3^3c^2 + 24Y_3^3c^3 -$$

$$2Y_3^5c^4 - 24Y_4^3c^3 - 12Y_4^4c^4) + X_3c^2(-16Y_1^1 + 16Y_1^2 -$$

$$2Y_1^3 + 4Y_1^3c - 2Y_2^2 + 12Y_2^2c - 8Y_2^3c - 2Y_2^4c^2 - 4Y_3^3c^2)$$

$$+ 2Y_1^0 - Y_1^1 + 2Y_1^1c - 2Y_2^1c - Y_2^2c^2 \Big] \qquad \text{B-2}$$

$$\mathbb{C} = N^2\Big[X_1^2 c(-2Y_1^2 c - 2Y_2^1 c) + X_1X_2(-4Y_2^2 c^3) +$$

$$X_1X_3 c(-4Y_1^3 c^2 - 4Y_2^2 c^2) + X_1 c(-4Y_1^1) + X_2^2 c\,($$

$$-2Y_3^2 c^3) + X_2X_3 c(-4Y_2^3 c^3) + X_2 c(-2Y_2^1 c) +$$

$$X_3^2 c^2(-2Y_1^4 c^2 - 4Y_3^2 c^2) + X_3 c(-4Y_1^2 c) - Y_1^0\Big] \qquad \text{B-3}$$

$$\mathcal{Z} = N^2\Big[X_1^2(Y_2^4 c^2 + 6Y_3^3 c^2) + X_1X_2(4Y_3^4 c^3 + 12Y_4^3 c^3) + X_1X_3($$

$$2Y_2^5 c^3 + 8Y_3^4 c^3 + 12Y_4^3 c^3) + X_1(2Y_2^3 c + 4Y_3^2 c) + X_2^2($$

$$6Y_4^4 c^4) + X_2X_3(4Y_3^5 c^4 + 12Y_4^4 c^4) + X_2(4Y_3^3 c^2) +$$

$$X_3^2(Y_2^6 c^4 + 2Y_3^5 c^4 + 12Y_4^4 c^4) + X_3(2Y_2^4 c^2 + 4Y_3^3 c^2) + Y_2^2\Big], \qquad \text{B-4}$$

com

$$N^{-2} = X_1^2(Y_1^3 c^2 + 3Y_2^2 c^2) + X_1X_2(2Y_2^3 c^3 + 4Y_3^2 c^3) + X_1X_3($$

$$2Y_1^4 c^3 + 4Y_2^3 c^3 + 4Y_3^2 c^3) + X_1(2Y_1^2 c + 2Y_2^1 c) + X_2^2(2Y_3^3 c^4) +$$

$$X_2X_3(2Y_2^4 c^4 + 4Y_3^3 c^4) + X_2(2Y_2^2 c^2) + X_3^2(Y_1^5 c^4 +$$

$$Y_2^4 c^4 + 4Y_3^3 c^4) + X_3(2Y_1^3 c^2 + 2Y_2^2 c^2) + Y_1^1 . \qquad \text{B-5}$$

A substituição de B-2, B-3, B-4 e B-5 em II-7 nos dá como resultado uma expressão para a energia em termos dos parâmetros a, c, d_{ij} (X_1, X_2, X_3) e de algumas das integrais Y_m^n definidas em II-6, particularmente daquelas que aparecem na tabela 6.

Tabela 6 - Colocação de algumas das integrais $Y_m^n(c)$ (particularmente daquelas que aparecem neste exemplo) como função da integral $Y = Y_1^1(c)$. Para tal, utilizamos as relações de recorrência II-11 à II-13.

$$
\begin{aligned}
Y_1^0 &= 1 - c\,Y_1^1 \\
c\,Y_1^2 &= 1 - Y_1^1 \\
c^2 Y_1^3 &= (2c-1) + Y_1^1 \\
c^3 Y_1^4 &= (6c^2-2c+1) - Y_1^1 \\
c^4 Y_1^5 &= (24c^3-6c^2+2c-1) + Y_1^1 \\
c\,Y_2^1 &= 1 - (c+1)\,Y_1^1 \\
c^2 Y_2^2 &= -1 + (2c+1)\,Y_1^1 \\
c^3 Y_2^3 &= (c+1) - (3c+1)\,Y_1^1 \\
c^4 Y_2^4 &= (2c^2-2c-1) + (4c+1)\,Y_1^1 \\
c^5 Y_2^5 &= (6c^3-4c^2+3c+1) - (5c+1)\,Y_1^1 \\
c^6 Y_2^6 &= (24c^4-12c^3+6c^2-4c-1) + (6c+1)\,Y_1^1 \\
2c^3 Y_3^2 &= (2c+1) - (2c^2+4c+1)\,Y_1^1 \\
2c^4 Y_3^3 &= -(4c+1) + (6c^2+6c+1)\,Y_1^1 \\
2c^5 Y_3^4 &= (2c^2+6c+1) - (12c^2+8c+1)\,Y_1^1 \\
2c^6 Y_3^5 &= (4c^3-6c^2-8c-1) + (20c^2+10c+1)\,Y_1^1 \\
6c^5 Y_4^3 &= (6c^2+7c+1) - (6c^3+18c^2+9c+1)\,Y_1^1 \\
6c^6 Y_4^4 &= -(18c^2+10c+1) + (24c^3+36c^2+12c+1)\,Y_1^1
\end{aligned}
$$

Analógamente ao procedimento adotado na seção II-4, devemos agora expressar a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio no campo magnético uniforme como função de a, c, X_1, X_2, X_3 e da integral $Y = Y_1^1$ (c) definida em II-23. Isto é conseguido através da utilização das relações constantes da tabela 6, para construção da qual foram utilizadas as relações de recorrência II-11, II-12 e II-13. Assim, os elementos de matriz que aparecem em II-14, II-15, II-16 e II-17 podem ser bastante simplificados e escritos finalmente como

$$\begin{aligned} u_o &= -2X_1^2(2-c) + 2X_1X_2(2+3c) + 4X_1X_3(2+c \\ &\quad + 3c^2) + 4X_1 - X_2^2(1+4c) - 4X_2X_3(1+3c - c^2) \\ &\quad -2X_2 - 4X_3^2(1+2c + c^2 - 6c^3) - 4X_3(1-c) \end{aligned} \tag{B-6}$$

$$\begin{aligned} v_o &= 2X_1^2(2+3c) - 2X_1X_2(2+7c + 2c^2) - 4X_1X_3(2 + 5c + c^2) - \\ &\quad 2X_1(2+c) + X_2^2(1+6c + 6c^2) + 4X_2X_3(1+5c + 3c^2) \\ &\quad + 2X_2(1+2c) + 4X_3^2(1+4c + 3c^2) + 4X_3(1 + c) + 1. \end{aligned} \tag{B-7}$$

$$\begin{aligned} u_1 &= X_1c^2 + 2X_1X_2c^2 + 6X_1X_3c^3 + X_1c - X_2^2c^2 - 2X_2X_3c^2 \\ &\quad + 4X_3^2c^3(1+3c) + 2X_3c^2 + 1/2 \end{aligned} \tag{B-8}$$

$$\begin{aligned} v_1 &= X_1c^2 - 2X_1X_2c^2(1+c) + 2X_1X_3c^3 + X_2^2c^2(1+2c) \\ &\quad + 2X_2X_3c^2(1+2c) - 4X_3^2c^3 - 2X_3c^2 \end{aligned} \tag{B-9}$$

$$u_2 = -4X_1^2c + 4X_1X_2c + 8X_1X_3c(1-c) - X_2^2c(1+2c) -$$

$$4X_2X_3c(1+c) - 2X_2c - 4X_3^2c(1+3c^2) - 4X_3c - 1 \qquad \text{B-10}$$

$$v_2 = 2X_1^2c(2+c) - 4X_1X_2c(1+2c) - 8X_1X_3c(1+c) -$$

$$4X_1c + X_2^2c(1+4c + 2c^2) + 4X_2X_3c(1+3c) + 2X_2c(1+c)$$

$$+ 4X_3^2c(1+2c + c^2) + 4X_3c + c \qquad \text{B-11}$$

$$u_3 = \Big[-2X_1^2(2+7c - c^2) + 2X_1X_2(2+13c + 8c^2) + 4$$

$$X_1X_3(2+11c + 3c^2 + 3c^3) + 2X_1(2+3c) - X_2^2 (1+10c + 18c^2) -$$

$$4X_2X_3(1+9c + 12c^2 - 2c^3) - 2X_2(1+4c) - 4X_3^2(1+8c + 9c^2 +$$

$$2c^3 - 6c^4) - 4X_3(1+3c - c^2) - 1 \Big]/c^2 \qquad \text{B-12}$$

$$v_3 = \Big[2X_1^2(2+11c + 9c^2) - 2X_1X_2(2+17c + 30c^2 + 6c^3)$$

$$- 4X_1X_3(2+15c + 21c^2 + 3c^3) - 2X_1(2+7c + 2c^2)$$

$$+ X_2^2(1+12c + 36c^2 + 24c^3) + 4X_2X_3(1+11c + 28c^2+ 12c^3)$$

$$+ 2X_2(1+6c + 6c^2) + 4X_3^2(1+10c + 23c^2 + 12c^3)$$

$$+ 4X_3(1+5c + 3c^2) + (1+2c) \Big]/c^2. \qquad \text{B-13}$$

Neste ponto, já contamos então com a expressão para a energia E em termos de γ, a, c, X_1, X_2 e X_3, a saber

$$E = \left[a^2(u_1 + v_1Y) + a\,(u_2 + v_2Y) + \frac{1}{8a^2}\,\gamma^2(u_3 + v_3Y) \right] / \,(u_0 + v_0Y) . \qquad \text{B-14}$$

A dependência explicita nos parâmetros X_1, X_2 X_3 e c está nos coeficientes u_i e v_i, i = 0,3, conforme se observa nas expressões B-6 à B-13. Dispomos então da energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio no campo magnético uniforme em função dos cinco parâmetros variacionais e da frequência de cíclotron γ (isto é, do campo magnético). Resta como já dito na seção II-4, fixar o valor de γ e minimizar esta energia. Para isto, utilizamos uma rotina da Bibliografia IMSL, chamada ZXMIN, com a integral y sendo resolvida numericamente através do método de Simpson. A rotina para tal integração encontra-se no livro[21] Methods of Numerical Integration de P. J. Davis e P. Rabinowitz, e sua especificação é dada abaixo:

```
      FUNCTION DSIMP(A1,B,EP,FUN)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C   PURPOSE
C   TO INTEGRATE BY SIMPSON'S RULE
C
C      B
C    INTEGRAL FUN(X) DX
C      A1
C
C   TO WITHIN TOLERANCE EP.
C   REFERENCE
```

```
C        P.J.DAVIS & P. RABINOWITZ
C        METHODS OF NUMERICAL INTEGRATION
C        COMPUTER SCIENCE AND APPLIED MATHEMATICS,
C        ACADEMIC PRESS, NY, 1975, PAGES 373-4.
```

Para este caso específico, utilizamos EP = $1,0 \times 10^{-6}$. A função FUN(X) necessária, por sua vez, é dada por

```
      FUNCTION YNTC(X)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C   FORNECE O INTEGRANDO PARA DSIMP
      COMMON/VARC/CVALUE
      YNTC = X*DEXP(-X)/(1.+ CVALUE*X)
      RETURN
      END
```

Importante na resolução numérica da integral Y é a fixação do infinito. A tabela abaixo mostra a "pesquisa" de infinito realizada para alguns valores de c :

	Y	Y	Y	Y	Y
c	∞ = 27,0	∞ = 29,0	∞ = 31,0	∞ = 33,0	∞ = 35,0
0,0	9,99999999(-1)	1,00000000	1,00000000	1,00000000	1,00000000
0,1	8,43666576 (-1)	8,43666576(-1)	8,43666576 (-1)	8,43666576(-1)	8,43666576(-1)
0,5	5,54685532 (-1)	5,54685532(-1)	5,54685532(-1)	5,54685532(-1)	5,54685532(-1)
1,0	4,03652638(-1)	4,03652638(-1)	4,03652638(-1)	4,03652638(-1)	4,03652638(-1)
10,0	7,98535746 (-2)	7,98535746(-2)	7,98535746(-2)	7,98535746(-2)	7,98535746(-2)
100,0	9,59214886 (-3)	9,59214886(-3)	9,59214886(-3)	9,59214886(-3)	9,59214886(-3)

Com base nesta tabela utilizamos para infinito (limite superior da integral Y), neste trabalho[20], 35,0. No que diz respeito a minimização, esta sistemática foi também usada para o caso colocado na seção II-4 (dois parâmetros variacionais).

Resultados para a energia de ligação E_B, no intervalo de variação de γ já definido, podem ser encontrados na tabela 2 da referência (20) . Após a conclusão do trabalho citado, descobrimos que a função

$$f(\xi,\eta) = 1 + x_1 c(\xi+\eta) + x_2 c^2 \xi\eta + x_3 c^3 \xi\eta(\xi+\eta) , \qquad \text{B-15}$$

que também contém cinco parâmetros, produz resultados melhores que

$$f(\xi,\eta) = f_1(\xi,\eta)$$

$$= 1 + x_1 c(\xi+\eta) + x_2 c^2 \xi\eta + x_3 c^2 (\xi^2+\eta^2) .$$

APÊNDICE C: ROTINA FORTRAN P/ OS ELEMENTOS DE MATRIZ

```
SUBROUTINE MATR2(N,X,F)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION U0(16,16),U1(16,16),U2(16,16),U3(16,16)
DIMENSION V0(16,16),V1(16,16),V2(16,16),V3(16,16)
DIMENSION H(16,16),S(16,16),W(100),AV(16,16),D(16)
DIMENSION X(1),AUTVT(16)
COMMON/DIAG/AUTVT
COMMON/YNF/YNFNTY
COMMON/KTROL/GAMA,MATDIM
COMMON/VARC/CVALUE
EXTERNAL YNTC
NN     = MATDIM
A      = X(1)
C      = X(2)
CVALUE= C
A2     = A*A
C2     = C*C
C3     = C2*C
C4     = C2*C2
C5     = C3*C2
C6     = C3*C3
C7     = C3*C4
C8     = C4*C4
C9     = C4*C5
C10    = C5*C5
C11    = C6*C5
C12    = C6*C6
CALCULO DA INTEGRAL Y
YNFNTY = 35.0 ( DEFINIDO NO PROGRAMA PRINCIPAL )
YYY    = DSIMP(0.0,YNFNTY,1.0D-10,YNTC)

U0(1,1) = 0.
U0(1,2) = 2.
U0(1,3) = -1.
U0(1,4) = 2.*(C- 1.)
U0(1,5) = 2.+ 3.*C
U0(1,6) = 6.*C2- C+ 2.
U0(1,7) = -1.- 4.*C
U0(1,8) = 2.*(C2- 3.*C- 1.)
U0(1,9) = 2.*(12.*C3- 2.*C2-1.)
U0(1,10)= 120.*C4- 18.*C3+ 2.*C2+ C+ 2.
U0(1,11)= 6.*C3- 2.*C2+ 9.*C+ 2.
U0(1,12)= 8.*C2+ 13.*C+ 2.
U0(1,13)= 2.*(2.*C3- 12.*C2- 9.*C- 1)
U0(1,14)= 2.*(12.*C4- 4.*C3- 6.*C- 1.)
U0(1,15)= -(18.*C2+ 10.*C+ 1.)
U0(1,16)= 2.*(360.*C5- 48.*C4+ 6.*C3- C- 1.)
U0(2,2) = 2.*(C- 2.)
U0(2,3) = 3.*C+ 2.
U0(2,4) = 2.*(3.*C2+ C+ 2.)
U0(2,5) = 2.*(C2- 7.*C- 2.)
U0(2,6) = 2.*(12.*C3- C2- 3.*C- 2.)
U0(2,7) = 8.*C2+ 13.*C+ 2.
U0(2,8) = 2.*(3.*C3+ 3.*C2+ 11.*C+ 2.)
U0(2,9) = 2.*(60.*C4- 6.*C3+ 5.*C+ 2.)
```

```
U0(2,10)= 2.*(360.*C5- 36.*C4+ 2.*C3- 7.*C- 2.)
U0(2,11)= 2.*(12.*C4- 2.*C3- 12.*C2- 15.*C- 2.)
U0(2,12)= 2.*(2.*C3- 30.*C2- 19.*C- 2.)
U0(2,13)= 2.*(6.*C4+ 12.*C3+ 65.*C2+ 25.*C+ 2.)
U0(2,14)= 2.*(60.*C5- 12.*C4+ 26.*C2+ 19.*C+ 2.)
U0(2,15)= 30.*C3+ 82.*C2+ 27.*C+ 2.
U0(2,16)= 2.*(2520.*C6- 240.*C5+ 18.*C4+ C2+ 9.*C+ 2.)
U0(3,3) = -(4.*C+ 1.)
U0(3,4) = 2.*(C2- 3.*C- 1.)
U0(3,5) = 8.*C2+ 13.*C+ 2.
U0(3,6) = 6.*C3- 2.*C2+ 9.*C+ 2.
U0(3,7) = -(18.*C2+ 10.*C+ 1.)
U0(3,8) = 2.*(2.*C3- 12.*C2- 9.*C- 1.)
U0(3,9) = 2.*(12.*C4- 4.*C3- 6.*C- 1.)
U0(3,10)= 120.*C5- 36.*C4+ 6.*C3+ 4.*C2+ 15.*C+ 2.
U0(3,11)= 12.*C4- 6.*C3+ 48.*C2+ 23.*C+ 2.
U0(3,12)= 30.*C3+ 82.*C2+ 27.*C+ 2.
U0(3,13)= 2.*(6.*C4- 60.*C3- 73.*C2- 17.*C- 1.)
U0(3,14)= 2.*(24.*C5- 12.*C4- 40.*C2- 14.*C- 1.)
U0(3,15)= -(96.*C3+ 86.*C2+ 18.*C+ 1.)
U0(3,16)= 2.*(360.*C6- 96.*C5+ 18.*C4- 5.*C2- 9.*C- 1.)
U0(4,4) = 4.*(6.*C3- C2- 2.*C- 1.)
U0(4,5) = 2.*(3.*C3+ 3.*C2+ 11.*C+ 2.)
U0(4,6) = 2.*(60.*C4- 9.*C3+ 5.*C2+ 7.*C+ 2.)
U0(4,7) = 2.*(2.*C3- 12.*C2- 9.*C- 1.)
U0(4,8) = 4.*(6.*C4- 2.*C3- 9.*C2- 8.*C- 1.)
U0(4,9) = 4.*(180.*C5- 24.*C4+ 4.*C3- 6.*C2- 5.*C- 1.)
U0(4,10)= 2.*(2520.*C6-300.*C5+42.*C4-6.*C3+23.*C2+13.*C+2.)
U0(4,11)= 2.*(60.*C5- 18.*C4+ 18.*C3+ 43.*C2+ 21.*C+ 2.)
U0(4,12)= 2.*(6.*C4+ 12.*C3+ 65.*C2+ 25.*C+ 2.)
U0(4,13)= 4.*(12.*C5- 6.*C4- 48.*C3- 63.*C2- 16.*C- 1.)
U0(4,14)= 4.*(180.*C6-48.*C5+12.*C4-30.*C3-39.*C2-13.*C-1.)
U0(4,15)= 2.*(6.*C4- 60.*C3- 73.*C2- 17.*C- 1.)
U0(4,16)= 4.*(10080.*C7-1080.*C6+132.*C5-18.*C4-19.*C2-8.*C-1.)
U0(5,5) = 2.*(2.*C3- 30.*C2- 19.*C- 2.)
U0(5,6) = 2.*(12.*C4- 2.*C3- 12.*C2- 15.*C- 2.)
U0(5,7) = 30.*C3+ 82.*C2+ 27.*C+ 2.
U0(5,8) = 2.*(6.*C4+ 12.*C3+ 65.*C2+ 25.*C+ 2.)
U0(5,9) = 2.*(60.*C5- 12.*C4+ 26.*C2+ 19.*C+ 2.)
U0(5,10)= 2.*(360.*C6-72.*C5+6.*C4-45.*C2-23.*C-2.)
U0(5,11)= 2.*(24.*C5- 6.*C4- 60.*C3- 113.*C2- 31.*C- 2.)
U0(5,12)= 2.*(6.*C4- 156.*C3- 159.*C2- 35.*C- 2.)
U0(5,13)= 2.*(18.*C5+ 60.*C4+ 433.*C3+ 261.*C2+ 43.*C+ 2.)
U0(5,14)= 2.*(120.*C6-36.*C5+160.*C3+174.*C2+37.*C+2.)
U0(5,15)= 144.*C4+ 566.*C3+ 294.*C2+ 45.*C+ 2.
U0(5,16)= 2.*(2520.*C7-480.*C6+54.*C5+5.*C3+69.*C2+27.*C+2.)
U0(6,6) = 2.*(360.*C5- 48.*C4+ 6.*C3- 18.*C2- 11.*C- 2.)
U0(6,7) = 12.*C4- 6.*C3+ 48.*C2+ 23.*C+ 2.
U0(6,8) = 2.*(60.*C5- 18.*C4+ 18.*C3+ 43.*C2+ 21.*C+ 2.)
U0(6,9) = 2.*(2520.*C6-300.*C5+36.*C4+12.*C3+40.*C2+15.*C+2.)
U0(6,10)= 2.*(20160.*C7- 2160.*C6+ 240.*C5- 18.*C4- 60.*C3
1          - 71.*C2- 19.*C- 2.)
U0(6,11)= 2.*(360.*C6-96.*C5+18.*C4-96.*C3-91.*C2-27.*C-2.)
U0(6,12)= 2.*(24.*C5- 6.*C4- 60.*C3- 113.*C2- 31.*C- 2.)
U0(6,13)= 2.*(120.*C6-54.*C5+84.*C4+293.*C3+207.*C2+39.*C+2.)
```

```
 U0(6,14)= 2.*(2520.*C7-600.*C6+108.*C5+60.*C4+278.*C3+156.*C2+
1          33.*C+ 2.)
 U0(6,15)= 36.*C5- 24.*C4+ 300.*C3+ 228.*C2+ 41.*C+ 2.
 U0(6,16)= 2.*(181440.*C8- 17640.*C7+ 1800.*C6- 162.*C5+ 153.*C3
1          + 111.*C2+ 23.*C+ 2.)
 U0(7,7) = -(96.*C3+ 86.*C2+ 18.*C+ 1.)
 U0(7,8) = 2.*(6.*C4- 60.*C3- 73.*C2- 17.*C- 1.)
 U0(7,9) = 2.*(24.*C5- 12.*C4- 40.*C2- 14.*C- 1.)
 U0(7,10)= 240.*C6-108.*C5+24.*C4+20.*C3+120.*C2+35.*C+2.
 U0(7,11)= 36.*C5- 24.*C4+ 300.*C3+ 228.*C2+ 41.*C+ 2.
 U0(7,12)= 144.*C4+ 566.*C3+ 294.*C2+ 45.*C+ 2.
 U0(7,13)= 2.*(24.*C5- 360.*C4- 618.*C3- 224.*C2- 27.*C- 1.)
 U0(7,14)= 2.*(72.*C6- 48.*C5- 300.*C3- 164.*C2- 24.*C- 1.)
 U0(7,15)= -(600.*C4+ 756.*C3+ 246.*C2+ 28.*C+ 1.)
 U0(7,16)= 2.*(720.*C7-288.*C6+72.*C5-30.*C3-84.*C2-19.*C-1.)
 U0(8,8) = 4.*(12.*C5- 6.*C4- 48.*C3- 63.*C2- 16.*C- 1.)
 U0(8,9) = 4.*(180.*C6-48.*C5+12.*C4-30.*C3-39.*C2-13.*C-1.)
 U0(8,10)= 2.*(2520.*C7- 600.*C6+ 126.*C5- 24.*C4+ 145.*C3
1          + 123.*C2+ 31.*C+ 2.)
 U0(8,11)= 2.*(120.*C6-54.*C5+84.*C4+293.*C3+207.*C2+39.*C+2.)
 U0(8,12)= 2.*(18.*C5+ 60.*C4+ 433.*C3+ 261.*C2+ 43.*C+ 2.)
 U0(8,13)= 4.*(36.*C6-24.*C5-300.*C4-528.*C3-205.*C2-26.*C-1.)
 U0(8,14)= 4.*(360.*C7- 144.*C6+ 48.*C5- 180.*C4- 324.*C3-
1          154.*C2- 23.*C- 1.)
 U0(8,15)= 2.*(24.*C5- 360.*C4- 618.*C3- 224.*C2- 27.*C- 1.)
 U0(8,16)= 4.*(10080.*C8- 2160.*C7+ 396.*C6- 72.*C5- 144.*C3-
1          89.*C2- 18.*C- 1.)
 U0(9,9) = 4.*(10080.*C7- 1080.*C6+ 120.*C5- 12.*C4- 48.*C3
1          - 42.*C2- 10.*C- 1.)
 U0(9,10)= 2.*(181440.*C8- 17640.*C7+ 1800.*C6- 180.*C5+ 84.*C4
1          + 286.*C3+ 144.*C2+ 25.*C+ 2.)
 U0(9,11)= 2.*(2520.*C7- 600.*C6+ 108.*C5+ 60.*C4+ 278.*C3
1          + 156.*C2+ 33.*C+ 2.)
 U0(9,12)= 2.*(120.*C6-36.*C5+160.*C3+ 174.*C2+ 37.*C+ 2.)
 U0(9,13)= 4.*(360.*C7- 144.*C6+ 48.*C5- 180.*C4- 324.*C3-
1          154.*C2- 23.*C- 1.)
 U0(9,14)= 4.*(10080.*C8- 2160.*C7+ 360.*C6- 48.*C5- 300.*C4-
1          372.*C3- 130.*C2- 20.*C- 1.)
 U0(9,15)= 2.*(72.*C6- 48.*C5- 300.*C3- 164.*C2- 24.*C- 1.)
 U0(9,16)= 4.*(907200.*C9- 80640.*C8+ 7560.*C7- 720.*C6+ 72.*C5
1          -180.*C4- 312.*C3- 110.*C2- 15.*C- 1.)
 U0(10,10)= 2.*(1814400.*C9- 161280.*C8+ 15120.*C7- 1440.*C6
1           + 120.*C5- 600.*C4- 762.*C3- 242.*C2- 31.*C- 2.)
 U0(10,11)= 2.*(20160.*C8- 4320.*C7+ 720.*C6- 72.*C5- 360.*C4
1           - 606.*C3- 238.*C2- 39.*C- 2.)
 U0(10,12)= 2.*(720.*C7- 216.*C6+ 24.*C5- 330.*C3- 248.*C2
1           -43.*C- 2.)
 U0(10,13)= 2.*(5040.*C8- 1800.*C7+ 504.*C6- 120.*C5+ 1050.*C4+
1           1206.*C3+ 429.*C2+ 53.*C+ 2.)
 U0(10,14)= 2.*(181440.*C9- 35280.*C8+ 5400.*C7- 720.*C6+
1           480.*C5+ 2196.*C4+ 1548.*C3+ 390.*C2+ 47.*C+ 2.)
 U0(10,15)= 720.*C7- 432.*C6+ 120.*C5+ 120.*C4+ 1050.*C3+
1           446.*C2+ 55.*C+ 2.
 U0(10,16)= 2.*(19958400.*C10- 1632960.*C9+ 141120.*C8-
1           12600.*C7+ 1080.*C6+ 360.*C5+ 2166.*C4+ 1578.*C3+
```

```
     2          365.*C2+ 37.*C+ 2.)
      U0(11,11)= 2.*(720.*C7- 288.*C6+ 72.*C5- 600.*C4- 786.*C3
     1          -330.*C2- 47.*C- 2.)
      U0(11,12)= 2.*(72.*C6- 24.*C5- 360.*C4- 918.*C3- 388.*C2
     1          - 51.*C- 2.)
      U0(11,13)= 2.*(360.*C7- 216.*C6+ 480.*C5+ 2238.*C4+ 2094.*C3+
     1          593.*C2+ 61.*C+ 2.)
      U0(11,14)= 2.*(5040.*C8- 1800.*C7+ 432.*C6+ 360.*C5+ 2148.*C4+
     1          1632.*C3+ 482.*C2+ 55.*C+ 2.)
      U0(11,15)= 144.*C6- 120.*C5+ 2160.*C4+ 2286.*C3+ 634.*C2+
     1          63.*C+ 2.
      U0(11,16)= 2.*(181440.*C9- 35280.*C8+ 5400.*C7-648.*C6+
     1          1098.*C4+ 1122.*C3+ 337.*C2+ 45.*C+ 2.)
      U0(12,12)=2.*(24.*C5- 960.*C4- 1374.*C3- 470.*C2- 55.*C- 2.)
      U0(12,13)=2.*(72.*C6+ 360.*C5+ 3258.*C4+ 2712.*C3+ 687.*C2+
     1          65.*C+ 2.)
      U0(12,14)=2.*(360.*C7- 144.*C6+ 1140.*C4+ 1668.*C3+ 540.*C2+
     1          59.*C+ 2.)
      U0(12,15)=840.*C5+ 4356.*C4+ 3138.*C3+ 740.*C2+ 67.*C+ 2.
      U0(12,16)=2.*(5040.*C8- 1440.*C7+ 216.*C6+ 30.*C4+ 588.*C3+
     1          335.*C2+ 49.*C+ 2.)
      U0(13,13)=4.*(144.*C7- 120.*C6- 2160.*C5- 4806.*C4- 2534.*C3-
     1          489.*C2- 38.*C- 1.)
      U0(13,14)=4.*(1080.*C8- 576.*C7+ 240.*C6- 1260.*C5- 2928.*C4-
     1          1826.*C3- 405.*C2- 35.*C- 1.)
      U0(13,15)=2.*(120.*C6- 2520.*C5- 5646.*C4- 2812.*C3- 519.*C2-
     1          39.*C- 1.)
      U0(13,16)=4.*(20160.*C9- 6480.*C8+ 1584.*C7- 360.*C6- 1218.*C4-
     1          1006.*C3- 285.*C2- 30.*C- 1.)
      U0(14,14)=4.*(20160.*C9- 6480.*C8+ 1440.*C7- 240.*C6- 2160.*C5-
     1          3504.*C4- 1640.*C3- 348.*C2- 32.*C- 1.)
      U0(14,15)=2.*(288.*C7- 240.*C6- 2520.*C4- 1900.*C3- 426.*C2-
     1          36.*C- 1.)
      U0(14,16)=4.*(907200.*C10- 161280.*C9+ 22680.*C8- 2880.*C7+
     1          360.*C6- 1260.*C5- 2844.*C4- 1390.*C3- 273.*C2-
     2          27.*C- 1.)
      U0(15,15)=-(4320.*C5+ 7092.*C4+ 3168.*C3+ 552.*C2+ 40.*C+ 1.)
      U0(15,16)=2.*(2160.*C8- 1152.*C7+ 360.*C6- 210.*C4- 840.*C3-
     1          291.*C2- 31.*C- 1.)
      U0(16,16)=4.*(119750400.*C11- 9072000.*C10+ 725760.*C9-
     1          60480.*C8+ 5040.*C7- 360.*C6- 2160.*C5- 3534.*C4-
     2          1590.*C3- 273.*C2- 22.*C- 1.)
      V0(1,1) = 1.
      V0(1,2) = -2. -1.*C
      V0(1,3) = 2.*C+ 1.
      V0(1,4) = 2.*(C+ 1.)
      V0(1,5) = -(2.*C2+ 7.*C+ 2.)
      V0(1,6) = -(3.*C+ 2.)
      V0(1,7) = 6.*C2+ 6.*C+ 1.
      V0(1,8) = 2.*(3.*C2+ 5.*C+ 1.)
      V0(1,9) = 2.*(2.*C+ 1.)
      V0(1,10)= -(5.*C+ 2.)
      V0(1,11)= -(12.*C2+ 13.*C+ 2.)
      V0(1,12)= -(6.*C3+ 30.*C2+ 17.*C+ 2.)
      V0(1,13)= 2.*(12.*C3+ 28.*C2+ 11.*C+ 1.)
```

```
VO(1,14)= 2.*(10.*C2+ 8.*C+ 1.)
VO(1,15)= 24.*C3+ 36.*C2+ 12.*C+ 1.
VO(1,16)= 2.*(3.*C+ 1.)
VO(2,2) = 2.*(3.*C+ 2.)
VO(2,3) = -(2.*C2+ 7.*C+ 2.)
VO(2,4) = -2.*(C2+ 5.*C+ 2.)
VO(2,5) = 2.*(9.*C2+ 11.*C+ 2.)
VO(2,6) = 2.*(3.*C2+ 7.*C+ 2.)
VO(2,7) = -(6.*C3+ 30.*C2+ 17.*C+ 2.)
VO(2,8) = -2.*(3.*C3+ 21.*C2+ 15.*C+ 2.)
VO(2,9) = -2.*(6.*C2+ 9.*C+ 2.)
VO(2,10)= 2.*(10.*C2+ 11.*C+ 2.)
VO(2,11)= 2.*(12.*C3+ 38.*C2+ 19.*C+ 2.)
VO(2,12)= 2.*(36.*C3+ 64.*C2+ 23.*C+ 2.)
VO(2,13)= -2.*(12.*C4+ 108.*C3+ 111.*C2+ 29.*C+ 2.)
VO(2,14)= -2.*(30.*C3+ 60.*C2+ 23.*C+ 2.)
VO(2,15)= -(24.*C4+ 156.*C3+ 132.*C2+ 31.*C+ 2.)
VO(2,16)= -2.*(15.*C2+ 13.*C+ 2.)
VO(3,3) = 6.*C2+ 6.*C+ 1.
VO(3,4) = 2.*(3.*C2+ 5.*C+ 1.)
VO(3,5) = -(6.*C3+ 30.*C2+ 17.*C+ 2.)
VO(3,6) = -(12.*C2+ 13.*C+ 2.)
VO(3,7) = 24.*C3+ 36.*C2+ 12.*C+ 1.
VO(3,8) = 2.*(12.*C3+ 28.*C2+ 11.*C+ 1.)
VO(3,9) = 2.*(10.*C2+ 8.*C+ 1.)
VO(3,10)= -(30.*C2+ 19.*C+ 2.)
VO(3,11)= -(60.*C3+ 90.*C2+ 27.*C+ 2.)
VO(3,12)= -(24.*C4+ 156.*C3+ 132.*C2+ 31.*C+ 2.)
VO(3,13)= 2.*(60.*C4+ 180.*C3+ 105.*C2+ 19.*C+ 1.)
VO(3,14)= 2.*(60.*C3+ 66.*C2+ 16.*C+ 1.)
VO(3,15)= 120.*C4+ 240.*C3+ 120.*C2+ 20.*C+ 1.
VO(3,16)= 2.*(21.*C2+ 11.*C+ 1.)
VO(4,4) = 4.*(3.*C2+ 4.*C + 1.)
VO(4,5) = -2.*(3.*C3+ 21.*C2+ 15.*C+ 2.)
VO(4,6) = -2.*(3.*C3+ 15.*C2+ 11.*C+ 2.)
VO(4,7) = 2.*(12.*C3+ 28.*C2+ 11.*C+ 1.)
VO(4,8) = 4.*(12.*C3+ 23.*C2+ 10.*C+ 1.)
VO(4,9) = 4.*(6.*C3+ 14.*C2+ 7.*C+ 1.)
VO(4,10)= -2.*(30.*C3+ 45.*C2+ 17.*C+ 2.)
VO(4,11)= -2.*(12.*C4+ 78.*C3+ 81.*C2+ 25.*C+ 2.)
VO(4,12)= -2.*(12.*C4+ 108.*C3+ 111.*C2+ 29.*C+ 2.)
VO(4,13)= 4.*(60.*C4+ 150.*C3+ 93.*C2+ 18.*C+ 1.)
VO(4,14)= 4.*(30.*C4+ 90.*C3+ 63.*C2+ 15.*C+ 1.)
VO(4,15)= 2.*(60.*C4+ 180.*C3+ 105.*C2+ 19.*C+ 1.)
VO(4,16)= 4.*(30.*C3+ 33.*C2+ 10.*C+ 1.)
VO(5,5) = 2.*(36.*C3+ 64.*C2+ 23.*C+ 2.)
VO(5,6) = 2.*(12.*C3+ 38.*C2+ 19.*C+ 2.)
VO(5,7) = -(24.*C4+ 156.*C3+ 132.*C2+ 31.*C+ 2.)
VO(5,8) = -2.*(12.*C4+ 108.*C3+ 111.*C2+ 29.*C+ 2.)
VO(5,9) = -2.*(30.*C3+ 60.*C2+ 23.*C+ 2.)
VO(5,10)= 2.*(60.*C3+ 87.*C2+ 27.*C+ 2.)
VO(5,11)= 2.*(60.*C4+ 240.*C3+ 171.*C2+ 35.*C+ 2.)
VO(5,12)= 2.*(180.*C4+ 420.*C3+ 225.*C2+ 39.*C+ 2.)
VO(5,13)= -2.*(60.*C5+ 660.*C4+ 885.*C3+ 343.*C2+ 47.*C+ 2.)
VO(5,14)= -2.*(180.*C4+ 450.*C3+ 244.*C2+ 41.*C+ 2.)
```

```
 VO(5,15)= -(120.*C5+ 960.*C4+ 1080.*C3+ 380.*C2+ 49.*C+ 2.)
 VO(5,16)= -2.*(105.*C3+ 119.*C2+ 31.*C+ 2.)
 VO(6,6) = 2.*(24.*C3+ 36.*C2+ 15.*C+ 2.)
 VO(6,7) = -(60.*C3+ 90.*C2+ 27.*C+ 2.)
 VO(6,8) = -2.*(12.*C4+ 78.*C3+ 81.*C2+ 25.*C+ 2.)
 VO(6,9) = -2.*(12.*C4+ 78.*C3+ 66.*C2+ 19.*C+ 2.)
 VO(6,10)= 2.*(60.*C4+ 180.*C3+ 105.*C2+ 23.*C+ 2.)
 VO(6,11)= 2.*(120.*C4+ 240.*C3+ 141.*C2+ 31.*C+ 2.)
 VO(6,12)= 2.*(60.*C4+ 240.*C3+ 171.*C2+ 35.*C+ 2.)
 VO(6,13)= -2.*(60.*C5+ 480.*C4+ 645.*C3+ 281.*C2+ 43.*C+ 2.)
 VO(6,14)= -2.*(60.*C5+ 480.*C4+ 540.*C3+ 218.*C2+ 37.*C+ 2.)
 VO(6,15)= -(360.*C4+ 690.*C3+ 306.*C2+ 45.*C+ 2.)
 VO(6,16)= -2.*(180.*C4+ 345.*C3+ 153.*C2+ 27.*C+ 2.)
 VO(7,7) = 120.*C4+ 240.*C3+ 120.*C2+ 20.*C+ 1.
 VO(7,8) = 2.*(60.*C4+ 180.*C3+ 105.*C2+ 19.*C+ 1.)
 VO(7,9) = 2.*(60.*C3+ 66.*C2+ 16.*C+ 1.)
 VO(7,10)= -(210.*C3+ 182.*C2+ 37.*C+ 2.)
 VO(7,11)= -(360.*C4+ 690.*C3+ 306.*C2+ 45.*C+ 2.)
 VO(7,12)= -(120.*C5+ 960.*C4+ 1080.*C3+ 380.*C2+ 49.*C+ 2.)
 VO(7,13)= 2.*(360.*C5+ 1320.*C4+ 1020.*C3+ 276.*C2+ 29.*C+ 1.)
 VO(7,14)= 2.*(420.*C4+ 588.*C3+ 210.*C2+ 26.*C+ 1.)
 VO(7,15)= 720.*C5+ 1800.*C4+ 1200.*C3+ 300.*C2+ 30.*C+ 1.
 VO(7,16)= 2.*(168.*C3+ 120.*C2+ 21.*C+ 1.)
 VO(8,8) = 4.*(60.*C4+ 150.*C3+ 93.*C2+ 18.*C+ 1.)
 VO(8,9) = 4.*(30.*C4+ 90.*C3+ 63.*C2+ 15.*C+ 1.)
 VO(8,10)= -2.*(180.*C4+ 345.*C3+ 181.*C2+ 35.*C+ 2.)
 VO(8,11)= -2.*(60.*C5+ 480.*C4+ 645.*C3+ 281.*C2+ 43.*C+ 2.)
 VO(8,12)= -2.*(60.*C5+ 660.*C4+ 885.*C3+ 343.*C2+ 47.*C+ 2.)
 VO(8,13)= 4.*(360.*C5+ 1110.*C4+ 894.*C3+ 255.*C2+ 28.*C+ 1.)
 VO(8,14)= 4.*(180.*C5+ 660.*C4+ 594.*C3+ 198.*C2+ 25.*C+ 1.)
 VO(8,15)= 2.*(360.*C5+ 1320.*C4+1020.*C3+ 276.*C2+ 29.*C+ 1.)
 VO(8,16)= 4.*(210.*C4+ 294.*C3+ 123.*C2+ 20.*C+ 1.)
 VO(9,9) = 4.*(60.*C4+ 120.*C3+ 60.*C2+ 12.*C+ 1.)
 VO(9,10)= -2.*(60.*C5+ 480.*C4+ 540.*C3+ 190.*C2+ 29.*C+ 2.)
 VO(9,11)= -2.*(60.*C5+ 480.*C4+ 540.*C3+ 218.*C2+ 37.*C+ 2.)
 VO(9,12)= -2.*(180.*C4+ 450.*C3+ 244.*C2+ 41.*C+ 2.)
 VO(9,13)= 4.*(180.*C5+ 660.*C4+ 594.*C3+ 198.*C2+ 25.*C+ 1.)
 VO(9,14)= 4.*(360.*C5+ 900.*C4+ 600.*C3+ 168.*C2+ 22.*C+ 1.)
 VO(9,15)= 2.*(420.*C4+ 588.*C3+ 210.*C2+ 26.*C+ 1.)
 VO(9,16)= 4.*(180.*C5+ 660.*C4+ 510.*C3+ 138.*C2+ 17.*C+ 1.)
 VO(10,10)= 2.*(720.*C5+ 1800.*C4+ 1200.*C3+300.*C2+35.*C+2.)
 VO(10,11)= 2.*(360.*C5+ 1320.*C4+ 1020.*C3+312.*C2+43.*C+2.)
 VO(10,12)= 2.*(420.*C4+ 756.*C3+ 330.*C2+ 47.*C+ 2.)
 VO(10,13)= -2.*(1260.*C5+ 2940.*C4+1974.*C3+ 531.*C2+57.*C+2.)
 VO(10,14)= -2.*(360.*C6+ 3420.*C5+ 4800.*C4+ 2250.*C3+
1           480.*C2+ 51.*C+ 2.)
 VO(10,15)= -(1680.*C4+ 1848.*C3+ 552.*C2+ 59.*C+ 2.)
 VO(10,16)= -2.*(360.*C6+ 3420.*C5+ 4800.*C4+ 2250.*C3+
1           435.*C2+ 41.*C+ 2.)
 VO(11,11)= 2.*(720.*C5+ 1800.*C4+ 1368.*C3+420.*C2+51.*C+2.)
 VO(11,12)= 2.*(360.*C5+ 1740.*C4+ 1608.*C3+486.*C2+55.*C+2.)
 VO(11,13)= -2.*(360.*C6+ 3420.*C5+ 5640.*C4+ 3174.*C3+
1           711.*C2+ 65.*C+ 2.)
 VO(11,14)= -2.*(360.*C6+ 3420.*C5+ 4800.*C4+ 2502.*C3+
1           588.*C2+ 59.*C+ 2.)
```

```
 V0(11,15)= -(2520.*C5+ 5880.*C4+ 3444.*C3+ 756.*C2+ 67.*C+ 2.)
 V0(11,16)= -2.*(1260.*C5+ 2940.*C4+ 1722.*C3+ 423.*C2+
1           49.*C+ 2.)
 V0(12,12)= 2.*(1080.*C5+ 3120.*C4+ 2220.*C3+ 576.*C2+ 59.*C+ 2.)
 V0(12,13)= -2.*(360.*C6+ 4680.*C5+ 7740.*C4+ 3972.*C3+ 813.*C2+
1           69.*C+ 2.)
 V0(12,14)= -2.*(1260.*C5+ 3780.*C4+ 2646.*C3+ 654.*C2+ 63.*C+ 2.)
 V0(12,15)= -(720.*C6+ 6840.*C5+ 9600.*C4+ 4500.*C3+ 870.*C2+
1           71.*C+ 2.)
 V0(12,16)= -2.*(840.*C4+ 1176.*C3+ 429.*C2+ 53.*C+ 2.)
 V0(13,13)= 4.*(2520.*C6+ 9240.*C5+ 9156.*C4+ 3444.*C3+ 563.*C2+
1           40.*C+ 1.)
 V0(13,14)= 4.*(1260.*C6+ 5460.*C5+ 6006.*C4+ 2574.*C3+ 473.*C2+
1           37.*C+ 1.)
 V0(13,15)= 2.*(2520.*C6+ 10920.*C5+ 10500.*C4+ 3780.*C3+
1           595.*C2+ 41.*C+ 1.)
 V0(13,16)= 4.*(1680.*C5+ 2856.*C4+ 1524.*C3+ 343.*C2+ 32.*C+ 1.)
 V0(14,14)= 4.*(2520.*C6+ 7560.*C5+ 6300.*C4+ 2280.*C3+ 410.*C2+
1           34.*C+ 1.)
 V0(14,15)= 2.*(3360.*C5+ 5712.*C4+ 2688.*C3+ 496.*C2+ 38.*C+ 1.)
 V0(14,16)= 4.*(1260.*C6+ 5460.*C5+ 5250.*C4+ 1890.*C3+ 325.*C2+
1           29.*C+ 1.)
 V0(15,15)= 5040.*C6+ 15120.*C5+ 12600.*C4+ 4200.*C3+ 630.*C2+
1           42.*C+ 1.
 V0(15,16)= 2.*(1512.*C4+ 1368.*C3+ 351.*C2+ 33.*C+ 1.)
 V0(16,16)= 4.*(2520.*C6+ 7560.*C5+ 6300.*C4+ 2100.*C3+ 315.*C2+
1           24.*C+ 1.)

 U1(1,1) = 1./(2.*C2)
 U1(1,2) = 1./(2.*C)
 U1(1,3) = 0.0
 U1(1,4) = 1.
 U1(1,5) = -1.
 U1(1,6) = 3.*(C- 1.)
 U1(1,7) = 1.
 U1(1,8) = 3.
 U1(1,9) = 6.*(2.*C2- 2.*C+ 1.)
 U1(1,10)= 10.*(6.*C3- 6.*C2+ 2.*C- 1.)
 U1(1,11)= -6.*(C+ 1.)
 U1(1,12)= -(7.*C+ 4.)
 U1(1,13)= -2.*C2+ 26.*C+ 7.
 U1(1,14)= 10.*(-2.*C2+ 2.*C+ 1.)
 U1(1,15)= 3.*(4.*C+ 1.)
 U1(1,16)= 15.*(24.*C4- 24.*C3+ 6.*C2- 2.*C+ 1.)
 U1(2,2) = 1.
 U1(2,3) = 1.
 U1(2,4) = 3.*C
 U1(2,5) = -1.
 U1(2,6) = 3.*(4.*C2+ 1.)
 U1(2,7) = C
 U1(2,8) = -(5.*C+ 2.)
 U1(2,9) = 2.*(30.*C3- 6.*C2- C- 4.)
 U1(2,10)= 5.*(72.*C4- 24.*C3+ 2.*C2+ 2.*C+ 3.)
 U1(2,11)= -2.*C2+ 26.*C+ 7.
 U1(2,12)= -2.*C2+ 10.*C+ 3.
```

```
      U1(2,13)= -(6.*C3+ 34.*C2+ 51.*C+ 8.)
      U1(2,14)= -2.*(12.*C3+ 2.*C2+ 36.*C+ 7.)
      U1(2,15)= -3.*(2.*C2+ 6.*C+ 1.)
      U1(2,16)= 3.*(840.*C5- 360.*C4+ 42.*C3+ 2.*C2- 9.*C- 8.)
      U1(3,3) = -1.
      U1(3,4) = -1.
      U1(3,5) = 3.*C+ 2.
      U1(3,6) = 0.0
      U1(3,7) = -(4.*C+ 1.)
      U1(3,8) = 2.*C2- 2.*C- 1.
      U1(3,9) = 2.*(-2.*C2+ 2.*C+ 1.)
      U1(3,10)= 5.*(-6.*C3+ 4.*C2- 3.*C- 1.)
      U1(3,11)= 6.*C3- 8.*C2- 9.*C- 1.
      U1(3,12)= 2.*C2+ 6.*C+ 1.
      U1(3,13)= 4.*C3+ 30.*C2+ 12.*C+ 1.
      U1(3,14)= 4.*(6.*C4- 8.*C3+ 9.*C2+ 9.*C+ 1.)
      U1(3,15)= 0.0
      U1(3,16)= 9.*(-24.*C4+ 12.*C3- 6.*C2+ 4.*C+ 1.)
      U1(4,4) = 4.*C*(3.*C+ 1.)
      U1(4,5) = 3.*C+ 2.
      U1(4,6) = 60.*C3+ 12.*C2- 11.*C- 2.
      U1(4,7) = -(2.*C2+ 6.*C+ 1.)
      U1(4,8) = 4.*C*(C+ 1.)
      U1(4,9) = 2.*(180.*C4+ 12.*C3- 4.*C2+ 14.*C+ 3.)
      U1(4,10)= 2520.*C5- 120.*C4+ 18.*C3- 22.*C2- 61.*C- 12.
      U1(4,11)= 6.*C3- 38.*C2- 33.*C- 4.
      U1(4,12)= C*(-6.*C2+ 14.*C+ 5.)
      U1(4,13)= 4.*(-6.*C4+ 4.*C3+ 15.*C2+ 9.*C+ 1.)
      U1(4,14)= 2.*(-12.*C4+ 8.*C3+ 84.*C2+ 48.*C+ 5.)
      U1(4,15)= -12.*C3- 18.*C2+ 4.*C+ 1.
      U1(4,16)= 4.*(5040.*C6- 720.*C5+ 114.*C4- 36.*C3+ 27.*C2+
     1          29.*C+ 5.)
      U1(5,5) = 2.*C2-18.*C- 5.
      U1(5,6) = 2.*C2- 2.*C- 1.
      U1(5,7) = 14.*C2+ 20.*C+ 3.
      U1(5,8) = 6.*C3+ 2.*C2+ 21.*C+ 4.
      U1(5,9) = -2.*(2.*C2+ 6.*C+ 1.)
      U1(5,10)= -48.*C4+ 4.*C3+ 18.*C2+ 48.*C+ 7.
      U1(5,11)= 24.*C4- 4.*C3+ 30.*C2- 1.
      U1(5,12)= 4.*C3- 78.*C2- 48.*C- 5.
      U1(5,13)= 12.*C4- 42.*C3+ 28.*C2+ 21.*C+ 2.
      U1(5,14)= 4.*(30.*C5- 12.*C4- 3.*C3- 47.*C2- 15.*C- 1.)
      U1(5,15)= 2.*(24.*C3+ 46.*C2+ 14.*C+ 1.)
      U1(5,16)= -600.*C5+ 132.*C4+ 18.*C3- 68.*C2- 115.*C- 14.
      U1(6,6) = 3.*(120.*C4+ 24.*C3- 6.*C2+ 10.*C+ 1.)
      U1(6,7) = -6.*C3+ 8.*C2+ 9.*C+ 1.
      U1(6,8) = 9.*C*(2.*C2- 2.*C- 1.)
      U1(6,9) = 6.*(420.*C5+ 60.*C4- 12.*C3- 4.*C2- 11.*C- 1.)
      U1(6,10)= 20160.*C6+1440.*C5-240.*C4+36.*C3+186.*C2+128.*C+11.
      U1(6,11)= 3.*(24.*C4- 12.*C3+ 42.*C2+ 16.*C+ 1.)
      U1(6,12)= -24.*C4+ 12.*C3- 42.*C2- 16.*C- 1.
      U1(6,13)= -120.*C5+ 84.*C4- 42.*C3- 80.*C2- 25.*C- 2.
      U1(6,14)= 2.*(120.*C5- 48.*C4- 102.*C3- 238.*C2- 65.*C- 4.)
      U1(6,15)= 9.*C*(-4.*C3+ 6.*C2+ 8.*C+ 1.)
      U1(6,16)= 9.*(20160.*C7- 4.*C4- 6.*C3- 64.*C2- 25.*C- 2.)
```

```
 U1(7,7) = -2.*(18.*C2+ 10.*C+ 1.)
 U1(7,8) = 4.*C3- 42.*C2- 28.*C- 3.
 U1(7,9) = 4.*C*(-6.*C3+ 4.*C2- 3.*C- 1.)
 U1(7,10)= -120.*C5+ 36.*C4- 6.*C3- 4.*C2- 15.*C- 2.
 U1(7,11)= 12.*C4- 6.*C3+ 48.*C2+ 23.*C+ 2.
 U1(7,12)= 2.*(30.*C3+ 82.*C2+ 27.*C+ 2.)
 U1(7,13)= 24.*C4- 144.*C3- 206.*C2- 50.*C- 3.
 U1(7,14)= 4.*C*(12.*C4- 12.*C3+ 12.*C2+ 10.*C+ 1.)
 U1(7,15)= -2.*(96.*C3+ 86.*C2+ 18.*C+ 1.)
 U1(7,16)= -720.*C6+ 48.*C5+ 72.*C4- 72.*C3+ 70.*C2+ 54.*C+ 5.
 U1(8,8) = 4.*(6.*C4- 3.*C2- 7.*C- 1.)
 U1(8,9) = 2.*(36.*C4- 24.*C3+ 36.*C2+ 16.*C+ 1.)
 U1(8,10)= 240.*C5- 132.*C4+ 42.*C3- 232.*C2- 85.*C- 6.
 U1(8,11)= 120.*C5- 12.*C4- 66.*C3- 64.*C2+ 7.*C+ 2.
 U1(8,12)= 12.*C4+ 54.*C3+ 212.*C2+ 77.*C+ 6.
 U1(8,13)= 4.*(12.*C5- 12.*C3- 50.*C2- 15.*C- 1.)
 U1(8,14)= 2.*(360.*C6- 72.*C5+ 252.*C3+ 200.*C2+ 30.*C+ 1.)
 U1(8,15)= -3.*(96.*C3+ 86.*C2+ 18.*C+ 1.)
 U1(8,16)= 12.*(-12.*C5+ 12.*C3+ 50.*C2+ 15.*C+ 1.)
 U1(9,9) = 8.*(2520.*C6+360.*C5-60.*C4+12.*C3+24.*C2+16.*C+1.)
 U1(9,10)= 2.*(90720.*C7+ 10080.*C6- 1440.*C5+ 240.*C4- 186.*C3
1            -326.*C2- 113.*C- 6.)
 U1(9,11)= 2.*(240.*C5- 96.*C4- 6.*C3- 170.*C2- 43.*C- 2.)
 U1(9,12)= 4.*C*(-30.*C4+ 12.*C3- 3.*C2+ 11.*C+ 2.)
 U1(9,13)= 2.*(-360.*C6+ 216.*C5- 144.*C4+ 84.*C3+ 92.*C2+
1            18.*C+ 1.)
 U1(9,14)= 8.*(360.*C6- 120.*C5+ 36.*C4+ 132.*C3+ 134.*C2+
1            24.*C+ 1.)
 U1(9,15)= 12.*C*(-12.*C4+ 12.*C3- 12.*C2- 10.*C- 1.)
 U1(9,16)= 6.*(302400.*C8+ 20160.*C7- 2520.*C6+ 360.*C5- 72.*C4+
1            276.*C3+ 272.*C2+ 52.*C+ 3.)
 U1(10,10)= 5.*(362880.*C8+ 40320.*C7- 5040.*C6+ 720.*C5-
1             120.*C4+ 408.*C3+ 338.*C2+ 74.*C+ 3.)
 U1(10,11)= 2880.*C6-960.*C5+216.*C4+528.*C3+830.*C2+162.*C+7.
 U1(10,12)= -720.*C6+ 192.*C5- 48.*C4+ 24.*C3+ 70.*C2+ 34.*C+ 3.
 U1(10,13)= -5040.*C7+ 2400.*C6- 1152.*C5+ 648.*C4- 790.*C3-
1             546.*C2- 87.*C- 4.
 U1(10,14)= 10.*(2520.*C7- 720.*C6+ 180.*C5- 132.*C4- 388.*C3-
1             222.*C2- 30.*C- 1.)
 U1(10,15)= -720.*C6+ 504.*C5- 312.*C4+ 240.*C3+ 90.*C2- 4.*C- 1.
 U1(10,16)= 5.*(3991680.*C9+ 362880.*C8- 40320.*C7+ 5040.*C6-
1             720.*C5- 288.*C4- 1482.*C3- 738.*C2- 115.*C- 4.)
 U1(11,11)= 720.*C6- 48.*C5- 72.*C4+ 456.*C3+ 274.*C2+ 18.*C- 1.
 U1(11,12)= 48.*C5- 144.*C3- 286.*C2- 78.*C- 5.
 U1(11,13)= 240.*C6- 48.*C4+ 46.*C3+ 270.*C2+ 69.*C+ 4.
 U1(11,14)= 2.*(2520.*C7- 240.*C6- 108.*C5- 228.*C4- 1120.*C3-
1             474.*C2- 48.*C- 1.)
 U1(11,15)= 3.*(24.*C4+ 240.*C3+ 138.*C2+ 22.*C+ 1.)
 U1(11,16)= 3.*(5040.*C7- 1440.*C6+ 288.*C5- 72.*C4- 810.*C3-
1             606.*C2- 97.*C- 4.)
 U1(12,12)= 24.*C4- 720.*C3- 722.*C2- 158.*C- 9.
 U1(12,13)= 72.*C5+ 144.*C4+ 1646.*C3+ 1026.*C2+ 171.*C+ 8.
 U1(12,14)= 2.*(120.*C6- 36.*C5- 24.*C4- 80.*C3+ 36.*C2+ 15.*C+ 1.)
 U1(12,15)= 408.*C4+ 1458.*C3+ 744.*C2+ 113.*C+ 5.
 U1(12,16)= -5040.*C7+ 720.*C6- 72.*C5+ 72.*C4- 150.*C3- 438.*C2-
```

```
1              125.*C- 8.
 U1(13,13)= 4.*(72.*C6- 24.*C5- 360.*C4- 918.*C3- 388.*C2-
1              51.*C- 2.)
 U1(13,14)= 2.*(720.*C7- 72.*C6- 192.*C5+ 600.*C4+ 648.*C3+
1              52.*C2- 12.*C- 1.)
 U1(13,15)= 96.*C5- 2040.*C4- 3228.*C3- 1142.*C2- 136.*C- 5.
 U1(13,16)= 4.*(-10080.*C8+ 3600.*C7- 1296.*C6+ 504.*C5- 180.*C4+
1              714.*C3+ 356.*C2+ 49.*C+ 2.)
 U1(14,14)= 4.*(10080.*C8- 720.*C7- 360.*C6+ 240.*C5+ 1380.*C4+
1              1956.*C3+ 566.*C2+ 48.*C+ 1.)
 U1(14,15)= 2.*(48.*C5- 120.*C4- 480.*C3- 202.*C2- 26.*C- 1.)
 U1(14,16)= 2.*(100800.*C8- 25200.*C7+ 5400.*C6- 1440.*C5+
1              3600.*C4+ 5712.*C3+ 2152.*C2+ 236.*C+ 7.)
 U1(15,15)= -3.*(600.*C4+ 756.*C3+ 246.*C2+ 28.*C+ 1.)
 U1(15,16)= 3.*(-1440.*C7+ 720.*C6- 288.*C5+ 120.*C4- 60.*C3+
1              42.*C2+ 16.*C+ 1.)
 U1(16,16)= 12.*(19958400.*C10+ 1814400.*C9- 181440.*C8+
1              20160.*C7- 2520.*C6+ 360.*C5+ 1440.*C4+ 1902.*C3+
2              612.*C2+ 71.*C+ 2.)
 V1(1,1)  = 0.0
 V1(1,2)  = 0.0
 V1(1,3)  = 0.0
 V1(1,4)  = -1.
 V1(1,5)  = C+ 1.
 V1(1,6)  = 3.
 V1(1,7)  = -2.*C- 1.
 V1(1,8)  = -3.*(2.*C+ 1.)
 V1(1,9)  = -6.0
 V1(1,10)= 10.
 V1(1,11)= 6.*(3.*C+ 1.)
 V1(1,12)= 6.*C2+ 15.*C+ 4.
 V1(1,13)= -(36.*C2+ 40.*C+ 7.)
 V1(1,14)= -10.*(4.*C+ 1.)
 V1(1,15)= -3.*(6.*C2+ 6.*C+ 1.)
 V1(1,16)= -15.
 V1(2,2)  = 1.
 V1(2,3)  = -(C+ 1.)
 V1(2,4)  = C
 V1(2,5)  = 2.*C+ 1.
 V1(2,6)  = -3.*(2.*C+ 1.)
 V1(2,7)  = -C*(2.*C+ 1.)
 V1(2,8)  = 6.*C2+ 9.*C+ 2.
 V1(2,9)  = 2.*(9.*C+ 4.)
 V1(2,10)= -5.*(8.*C+ 3.)
 V1(2,11)= -(36.*C2+ 40.*C+ 7.)
 V1(2,12)= -(12.*C2+ 16.*C+ 3.)
 V1(2,13)= 36.*C3+ 120.*C2+ 67.*C+ 8.
 V1(2,14)= 2.*(60.*C2+ 50.*C+ 7.)
 V1(2,15)= 3.*(12.*C2+ 8.*C+ 1.)
 V1(2,16)= 3.*(25.*C+ 8.)
 V1(3,3)  = 2.*C+ 1.
 V1(3,4)  = 2.*C+ 1.
 V1(3,5)  = -(2.*C2+ 7.*C+ 2.)
 V1(3,6)  = 0.0
 V1(3,7)  = 6.*C2+ 6.*C+ 1.
```

```
V1(3,8) = 4.*C+ 1.
V1(3,9) = -2.*(4.*C+ 1.)
V1(3,10)= 5.*(5.*C+ 1.)
V1(3,11)= 24.*C2+ 11.*C+ 1.
V1(3,12)= -(12.*C2+ 8.*C+ 1.)
V1(3,13)= -(48.*C3+ 52.*C2+ 14.*C+ 1.)
V1(3,14)= -4.*(25.*C2+ 11.*C+ 1.)
V1(3,15)= 0.0
V1(3,16)= -9.*(6.*C+ 1.)
V1(4,4) = -4.*C
V1(4,5) = -(2.*C2+ 7.*C+ 2.)
V1(4,6) = 6.*C2+ 15.*C+ 2.
V1(4,7) = 12.*C2+ 8.*C+ 1.
V1(4,8) = -4.*C*(3.*C+ 1.)
V1(4,9) = -2.*(18.*C2+ 20.*C+ 3.)
V1(4,10)= 120.*C2+ 85.*C+ 12.
V1(4,11)= 36.*C3+ 96.*C2+ 41.*C+ 4.
V1(4,12)= -C*(12.*C2+ 24.*C+ 5.)
V1(4,13)= -4.*(24.*C3+ 31.*C2+ 11.*C+ 1.)
V1(4,14)= -2.*(120.*C3+ 170.*C2+ 58.*C+ 5.)
V1(4,15)= 48.*C3+ 12.*C2- 6.*C- 1.
V1(4,16)= -4.*(75.*C2+ 39.*C+ 5.)
V1(5,5) = 24.*C2+ 28.*C+ 5.
V1(5,6) = 4.*C+ 1.
V1(5,7) = -(12.*C3+ 48.*C2+ 26.*C+ 3.)
V1(5,8) = -(36.*C2+ 29.*C+ 4.)
V1(5,9) = 2.*(12.*C2+ 8.*C+ 1.)
V1(5,10)= -(100.*C2+ 62.*C+ 7.)
V1(5,11)= -48.*C3- 32.*C2+ 2.*C+ 1.
V1(5,12)= 96.*C3+ 164.*C2+ 58.*C+ 5.
V1(5,13)= 48.*C4+ 12.*C3- 66.*C2- 25.*C- 2.
V1(5,14)= 4.*(75.*C3+ 75.*C2+ 17.*C+ 1.)
V1(5,15)= -2.*(24.*C4+ 96.*C3+ 72.*C2+ 16.*C+ 1.)
V1(5,16)= 270.*C2+ 143.*C+ 14.
V1(6,6) = -3.*(12.*C2+ 12.*C+ 1.)
V1(6,7) = -(24.*C2+ 11.*C+ 1.)
V1(6,8) = 9.*C*(4.*C+ 1.)
V1(6,9) = 6.*(6.*C3+ 24.*C2+ 13.*C+ 1.)
V1(6,10)= -(240.*C3+ 420.*C2+ 150.*C+ 11.)
V1(6,11)= -3.*(48.*C3+ 72.*C2+ 18.*C+ 1.)
V1(6,12)= 48.*C3+ 72.*C2+ 18.*C+ 1.
V1(6,13)= - 48.*C4+ 168.*C3+ 126.*C2+ 29.*C+ 2.
V1(6,14)= 2.*(120.*C4+ 480.*C3+ 360.*C2+ 73.*C+ 4.)
V1(6,15)= -9.*C*(20.*C2+ 10.*C+ 1.)
V1(6,16)= 9.*(100.*C3+ 110.*C2+ 29.*C+ 2.)
V1(7,7) = 2.*(24.*C3+ 36.*C2+ 12.*C+ 1.)
V1(7,8) = 48.*C3+ 92.*C2+ 34.*C+ 3.
V1(7,9) = 4.*C*(5.*C+ 1.)
V1(7,10)= 30.*C2+ 19.*C+ 2.
V1(7,11)= -(60.*C3+ 90.*C2+ 27.*C+ 2.)
V1(7,12)= -2.*(24.*C4+ 156.*C3+ 132.*C2+ 31.*C+ 2.)
V1(7,13)= 120.*C4+ 480.*C3+ 300.*C2+ 56.*C+ 3.
V1(7,14)= -4.*C*(30.*C2+ 12.*C+ 1.)
V1(7,15)= 2.*(120.*C4+ 240.*C3+ 120.*C2+ 20.*C+ 1.)
V1(7,16)= -(168.*C2+ 64.*C+ 5.)
```

```
V1(8,8) = 4.*(15.*C2+ 9.*C+ 1.)
V1(8,9) = -2.*(24.*C3+ 66.*C2+ 18.*C+ 1.)
V1(8,10)= 300.*C3+ 390.*C2+ 97.*C+ 6.
V1(8,11)= 48.*C4+ 192.*C3+ 54.*C2- 11.*C- 2.
V1(8,12)= -(48.*C4+ 372.*C3+ 354.*C2+ 89.*C+ 6.)
V1(8,13)= 4.*(90.*C3+ 78.*C2+ 17.*C+ 1.)
V1(8,14)= -2.*(300.*C4+ 600.*C3+ 258.*C2+ 32.*C+ 1.)
V1(8,15)= 3.*(120.*C4+ 240.*C3+ 120.*C2+ 20.*C+ 1.)
V1(8,16)= -12.*(90.*C3+ 78.*C2+ 17.*C+ 1.)
V1(9,9) = -8.*(36.*C3+ 54.*C2+ 18.*C+ 1.)
V1(9,10)= 2.*(120.*C4+ 660.*C3+ 540.*C2+ 125.*C+ 6.)
V1(9,11)= 2.*(24.*C4+ 276.*C3+ 252.*C2+ 47.*C+ 2.)
V1(9,12)= -4.*C*(15.*C2+ 15.*C+ 2.)
V1(9,13)= 2.*(60.*C4- 240.*C3- 126.*C2- 20.*C- 1.)
V1(9,14)= -8.*(180.*C4+ 360.*C3+ 180.*C2+ 26.*C+ 1.)
V1(9,15)= 12.*C*(30.*C2+ 12.*C+ 1.)
V1(9,16)= -6.*(300.*C4+ 720.*C3+ 390.*C2+ 68.*C+ 3.)
V1(10,10)= -5.*(480.*C4+ 960.*C3+ 480.*C2+ 80.*C+ 3.)
V1(10,11)= -(600.*C4+ 1920.*C3+ 1140.*C2+ 176.*C+ 7.)
V1(10,12)= -(120.*C3+ 132.*C2+ 40.*C+ 3.)
V1(10,13)= 360.*C4+ 1740.*C3+ 712.*C2+ 95.*C+ 4.
V1(10,14)= 10.*(60.*C5+ 660.*C4+ 780.*C3+ 280.*C2+ 32.*C+ 1.)
V1(10,15)= -420.*C3- 84.*C2+ 6.*C+ 1.
V1(10,16)= 5.*(360.*C5+ 2520.*C4+ 2760.*C3+ 960.*C2+ 123.*C+ 4.)
V1(11,11)= -480.*C4- 960.*C3- 312.*C2- 16.*C+ 1.
V1(11,12)= 120.*C4+ 600.*C3+ 432.*C2+ 88.*C+ 5.
V1(11,13)= -120.*C5+ 120.*C4- 480.*C3- 400.*C2- 77.*C- 4.
V1(11,14)= 2.*(300.*C5+ 1860.*C4+ 1980.*C3+ 568.*C2+ 50.*C+ 1.)
V1(11,15)= -3.*(360.*C4+ 480.*C3+ 180.*C2+ 24.*C+ 1.)
V1(11,16)= 3.*(1080.*C4+ 1860.*C3+ 792.*C2+ 105.*C+ 4.)
V1(12,12)= 840.*C4+ 1920.*C3+ 1020.*C2+ 176.*C+ 9.
V1(12,13)= -(120.*C5+ 2400.*C4+ 3420.*C3+ 1352.*C2+ 187.*C+ 8.)
V1(12,14)= 2.*(180.*C4+ 30.*C3- 64.*C2- 17.*C- 1.)
V1(12,15)= -(360.*C5+ 2520.*C4+ 2760.*C3+ 960.*C2+ 123.*C+ 5.)
V1(12,16)= 840.*C3+ 672.*C2+ 141.*C+ 8.
V1(13,13)= 4.*(360.*C5+ 1740.*C4+ 1608.*C3+ 486.*C2+ 55.*C+ 2.)
V1(13,14)= 2.*(-360.*C5- 1740.*C4- 768.*C3- 30.*C2+ 14.*C+ 1.)
V1(13,15)= 2160.*C5+ 7080.*C4+ 5280.*C3+ 1404.*C2+ 146.*C+ 5.
V1(13,16)= -4.*(840.*C4+ 1344.*C3+ 450.*C2+ 53.*C+ 2.)
V1(14,14)= -4.*(1800.*C5+ 4500.*C4+ 3000.*C3+ 660.*C2+ 50.*C+ 1.)
V1(14,15)= 2.*(840.*C4+ 840.*C3+ 252.*C2+ 28.*C+ 1.)
V1(14,16)= -2.*(3240.*C5+12300.*C4+9600.*C3+2610.*C2+250.*C+7.)
V1(15,15)= 3.*(720.*C5+ 1800.*C4+ 1200.*C3+ 300.*C2+ 30.*C+ 1.)
V1(15,16)= -3.*(72.*C2+ 18.*C+ 1.)
V1(16,16)= -12.*(1800.*C5+ 4500.*C4+ 3000.*C3+ 750.*C2+75.*C+2.)
U2(1,1) = -1./C
U2(1,2) = 0.0
U2(1,3) = -1.
U2(1,4) = -2.
U2(1,5) = 2.
U2(1,6) = 2.*(-2.*C+ 1.)
U2(1,7) = -(2.*C+ 1.)
U2(1,8) = -2.*(C+ 1.)
U2(1,9) = 2.*(-6.*C2+ 2.*C- 1.)
U2(1,10)= 2.*(-24.*C3+ 6.*C2- 2.*C+ 1.)
```

```
U2(1,11)= 2.*(-2.*C2+ 2.*C+ 1.)
U2(1,12)= 2.*(4.*C+ 1.)
U2(1,13)= -2.*(2.*C2+ 6.*C+ 1.)
U2(1,14)= 2.*(-6.*C3+ 4.*C2- 3.*C- 1.)
U2(1,15)= -(6.*C2+ 7.*C+ 1.)
U2(1,16)= 2.*(-120.*C4+ 24.*C3- 6.*C2+ 2.*C- 1.)
U2(2,2) = -4.
U2(2,3) = 2.
U2(2,4) = 4.*(-C+ 1.)
U2(2,5) = -2.*(3.*C+ 2.)
U2(2,6) = 2.*(-6.*C2+ C- 2.)
U2(2,7) = 2.*(4.*C+ 1.)
U2(2,8) = 4.*(-C2+ 3.*C+ 1.)
U2(2,9) = 4.*(-12.*C3+ 2.*C2+ 1.)
U2(2,10)= 2.*(-120.*C4+ 18.*C3- 2.*C2- C- 2.)
U2(2,11)= 2.*(-6.*C3+ 2.*C2- 9.*C- 2.)
U2(2,12)= -2.*(8.*C2+ 13.*C+ 2.)
U2(2,13)= 4.*(-2.*C3+ 12.*C2+ 9.*C+ 1.)
U2(2,14)= 4.*(-12.*C4+ 4.*C3+ 6.*C+ 1.)
U2(2,15)= 2.*(18.*C2+ 10.*C+ 1.)
U2(2,16)= 4.*(-360.*C5+ 48.*C4- 6.*C3+ C+ 1.)
U2(3,3) = -(2.*C+ 1.)
U2(3,4) = -2.*(C+ 1.)
U2(3,5) = 2.*(4.*C+ 1.)
U2(3,6) = 2.*(-2.*C2+ 2.*C+ 1.)
U2(3,7) = -(6.*C2+ 7.*C+ 1.)
U2(3,8) = -2.*(2.*C2+ 6.*C+ 1.)
U2(3,9) = 2.*(-6.*C3+ 4.*C2- 3.*C- 1.)
U2(3,10)= 2.*(-24.*C4+ 12.*C3- 6.*C2+ 4.*C+ 1.)
U2(3,11)= 2.*(-4.*C3+ 6.*C2+ 8.*C+ 1.)
U2(3,12)= 2.*(18.*C2+ 10.*C+ 1.)
U2(3,13)= -2.*(6.*C3+ 36.*C2+ 13.*C+ 1.)
U2(3,14)= 2.*(-12.*C4+ 12.*C3-12.*C2- 10.*C- 1.)
U2(3,15)= -(24.*C3+ 46.*C2+ 14.*C+ 1.)
U2(3,16)= 2.*(-120.*C5+ 48.*C4- 18.*C3+ 8.*C2- 5.*C- 1.)
U2(4,4) = -4.*(3.*C2+ 1.)
U2(4,5) = 4.*(-C2+ 3.*C+ 1.)
U2(4,6) = 4.*(-12.*C3+ 3.*C2+ C+ 1.)
U2(4,7) = -2.*(2.*C2+ 6.*C+ 1.)
U2(4,8) = -4.*(3.*C3+ C2+ 5.*C+ 1.)
U2(4,9) = 4.*(-60.*C4+ 12.*C3- 4.*C2- 2.*C- 1.)
U2(4,10)= 4.*(-360.*C5+ 60.*C4- 14.*C3+ 6.*C2+ 3.*C+ 1.)
U2(4,11)= 4.*(-12.*C4+ 6.*C3+ 6.*C2+ 7.*C+ 1.)
U2(4,12)= 4.*(-2.*C3+ 12.*C2+ 9.*C+ 1.)
U2(4,13)= -4.*(6.*C4+ 6.*C3+ 29.*C2+ 12.*C+ 1.)
U2(4,14)= 4.*(-60.*C5+ 24.*C4- 12.*C3- 14.*C2- 9.*C- 1.)
U2(4,15)= -2.*(6.*C3+ 36.*C2+ 13.*C+ 1.)
U2(4,16)= 4.*(-2520.*C6+ 360.*C5- 66.*C4+ 18.*C3-9.*C2-4.*C-1.)
U2(5,5) = -2.*(8.*C2+ 13.*C+ 2.)
U2(5,6) = 2.*(-6.*C3+ 2.*C2- 9.*C- 2.)
U2(5,7) = 2.*(18.*C2+ 10.*C+ 1.)
U2(5,8) = 4.*(-2.*C3+ 12.*C2+ 9.*C+ 1.)
U2(5,9) = 4.*(-12.*C4+ 4.*C3+ 6.*C+ 1.)
U2(5,10)= 2.*(-120.*C5+ 36.*C4- 6.*C3- 4.*C2- 15.*C- 2.)
U2(5,11)= 2.*(-12.*C4+ 6.*C3- 48.*C2- 23.*C- 2.)
```

```
 U2(5,12)= -2.*(30.*C3+ 82.*C2+ 27.*C+ 2.)
 U2(5,13)= 4.*(-6.*C4+ 60.*C3+ 73.*C2+ 17.*C+ 1.)
 U2(5,14)= 4.*(-24.*C5+ 12.*C4+ 40.*C2+ 14.*C+ 1.)
 U2(5,15)= 2.*( 96.*C3+ 86.*C2+ 18.*C+ 1.)
 U2(5,16)= 4.*(-360.*C6+ 96.*C5- 18.*C4+ 5.*C2+ 9.*C+ 1.)
 U2(6,6) = 2.*(-120.*C4+ 24.*C3- 12.*C2- 5.*C- 2.)
 U2(6,7) = 2.*(-4.*C3+ 6.*C2+ 8.*C+ 1.)
 U2(6,8) = 4.*(-12.*C4+ 6.*C3+ 6.*C2+ 7.*C+ 1.)
 U2(6,9) = 4.*(-360.*C5+ 60.*C4- 12.*C3+ 12.*C2+ 4.*C+ 1.)
 U2(6,10)= 2.*(-5040.*C6+ 720.*C5- 120.*C4+ 18.*C3- 42.*C2
1          -11.*C- 2.)
 U2(6,11)= 2.*(-120.*C5+ 48.*C4- 42.*C3- 38.*C2- 19.*C- 2.)
 U2(6,12)= 2.*(-12.*C4+ 6.*C3- 48.*C2- 23.*C- 2.)
 U2(6,13)= 4.*(-24.*C5+ 18.*C4+ 36.*C3+ 53.*C2+ 15.*C+ 1.)
 U2(6,14)= 4.*(-360.*C6+ 120.*C5- 36.*C4+ 60.*C3+38.*C2+12.*C+1.)
 U2(6,15)= 2.*(-12.*C4+ 24.*C3+ 60.*C2+ 16.*C+ 1.)
 U2(6,16)= 4.*(-20160.*C7+ 2520.*C6- 360.*C5+ 54.*C4+ 33.*C2+
1          7.*C+ 1.)
 U2(7,7) = -(24.*C3+ 46.*C2+ 14.*C+ 1.)
 U2(7,8) = -2.*(6.*C3+ 36.*C2+ 13.*C+ 1.)
 U2(7,9) = 2.*(-12.*C4+ 12.*C3- 12.*C2- 10.*C- 1.)
 U2(7,10)= 2.*(-48.*C5+ 36.*C4- 24.*C3+ 20.*C2+ 12.*C+ 1.)
 U2(7,11)= 2.*(-12.*C4+ 24.*C3+ 60.*C2+ 16.*C+ 1.)
 U2(7,12)= 2.*( 96.*C2+ 86.*C2+ 18.*C+ 1.)
 U2(7,13)= -2.*(24.*C4+ 240.*C3+ 138.*C2+ 22.*C+ 1.)
 U2(7,14)= 2.*(-36.*C5+ 48.*C4- 60.*C3- 90.*C2- 19.*C- 1.)
 U2(7,15)= -(120.*C4+ 326.*C3+ 156.*C2+ 23.*C+ 1.)
 U2(7,16)= 2.*(-240.*C6+ 144.*C5- 72.*C4+40.*C3-30.*C2-14.*C-1.)
 U2(8,8) = -4.*(6.*C4+ 6.*C3+ 29.*C2+ 12.*C+ 1.)
 U2(8,9) = 4.*(-60.*C5+ 24.*C4- 12.*C3-14.*C2- 9.*C- 1.)
 U2(8,10)= 4.*(-360.*C6+120.*C5-42.*C4+24.*C3+25.*C2+11.*C+1.)
 U2(8,11)= 4.*(-24.*C5+ 18.*C4+ 36.*C3+ 53.*C2+ 15.*C+ 1.)
 U2(8,12)= 4.*(-6.*C4+ 60.*C3+ 73.*C2+ 17.*C+ 1.)
 U2(8,13)= -4.*(18.*C5+ 36.*C4+ 193.*C3+ 123.*C2+ 21.*C+ 1.)
 U2(8,14)= 4.*(-120.*C6+ 72.*C5- 48.*C4-100.*C3-84.*C2-18.*C-1.)
 U2(8,15)= -2.*(24.*C4+ 240.*C3+ 138.*C2+ 22.*C+ 1.)
 U2(8,16)= 4.*(-2520.*C7+ 720.*C6- 198.*C5+ 72.*C4- 45.*C3-
1          39.*C2- 13.*C- 1.)
 U2(9,9) = 4.*(-2520.*C6+ 360.*C5- 60.*C4- 26.*C2- 6.*C- 1.)
 U2(9,10)= 4.*(-20160.*C7+ 2520.*C6- 360.*C5+ 60.*C4+ 36.*C3
1          + 46.*C2+ 8.*C+ 1.)
 U2(9,11)= 4.*(-360.*C6+120.*C5-36.*C4+60.*C3+38.*C2+12.*C+1.)
 U2(9,12)= 4.*(-24.*C5+ 12.*C4+ 40.*C2+ 14.*C+ 1.)
 U2(9,13)= 4.*(-120.*C6+ 72.*C5- 48.*C4- 100.*C3-84.*C2-18.*C-1.)
 U2(9,14)= 4.*(-2520.*C7+ 720.*C6- 180.*C5- 12.*C4- 178.*C3-
1          72.*C2- 15.*C- 1.)
 U2(9,15)= 2.*(-36.*C5+ 48.*C4- 60.*C3- 90.*C2- 19.*C- 1.)
 U2(9,16)= 4.*(-181440.*C8+ 20160.*C7- 2520.*C6+ 360.*C5-
1          72.*C4- 108.*C3- 72.*C2- 10.*C- 1.)
 U2(10,10)=2.*(-362880.*C8+ 40320.*C7- 5040.*C6+ 720.*C5
1          -240.*C4- 302.*C3- 162.*C2- 21.*C- 2.)
 U2(10,11)=2.*(-5040.*C7+ 1440.*C6- 360.*C5+ 72.*C4-
1          270.*C3- 126.*C2- 29.*C- 2.)
 U2(10,12)=2.*(-240.*C6+108.*C5-24.*C4-20.*C3-120.*C2-33.*C-2.)
 U2(10,13)=4.*(-720.*C7+ 360.*C6- 168.*C5+ 120.*C4+ 210.*C3+
```

```
1             122.*C2+ 21.*C+ 1.)
 U2(10,14)=4.*(-20160.*C8+ 5040.*C7- 1080.*C6+ 240.*C5+ 240.*C4+
1             396.*C3+ 116.*C2+ 18.*C+ 1.)
 U2(10,15)=2.*(-144.*C6+ 144.*C5- 120.*C4+ 120.*C3+ 126.*C2+
1             22.*C+ 1.)
 U2(10,16)=4.*(-1814400.*C9+ 181440.*C8- 20160.*C7+ 2520.*C6-
1             360.*C5+ 360.*C4+ 366.*C3+ 126.*C2+ 13.*C+ 1.)
 U2(11,11)=2.*(-240.*C6+144.*C5-192.*C4-286.*C3-186.*C2-37.*C-2.)
 U2(11,12)=2.*(-36.*C5+ 24.*C4- 300.*C3- 228.*C2- 41.*C- 2.)
 U2(11,13)=4.*(-72.*C6+ 72.*C5+ 240.*C4+438.*C3+186.*C2+25.*C+1.)
 U2(11,14)=4.*(-720.*C7+ 360.*C6- 144.*C5+ 360.*C4+ 348.*C3+
1             144.*C2+ 22.*C+ 1.)
 U2(11,15)=2.*(-48.*C5+ 120.*C4+ 480.*C3+ 202.*C2+ 26.*C+ 1.)
 U2(11,16)=4.*(-20160.*C8+ 5040.*C7- 1080.*C6+ 216.*C5+ 258.*C3+
1             94.*C2+ 17.*C+ 1.)
 U2(12,12)=-2.*(144.*C4+ 566.*C3+ 294.*C2+ 45.*C+ 2.)
 U2(12,13)=4.*(-24.*C5+ 360.*C4+ 618.*C3+ 224.*C2+ 27.*C+ 1.)
 U2(12,14)=4.*(-72.*C6+ 48.*C5+ 300.*C3+ 164.*C2+ 24.*C+ 1.)
 U2(12,15)=2.*( 600.*C4+ 756.*C3+ 246.*C2+ 28.*C+ 1.)
 U2(12,16)=4.*(-720.*C7+ 288.*C6- 72.*C5+ 30.*C3+84.*C2+19.*C+1.)
 U2(13,13)=-4.*(72.*C6+ 240.*C5+ 1458.*C4+ 1266.*C3+ 331.*C2+
1             32.*C+ 1.)
 U2(13,14)=4.*(-360.*C7+ 288.*C6- 240.*C5- 780.*C4- 828.*C3-
1             262.*C2- 29.*C- 1.)
 U2(13,15)=-2.*(120.*C5+ 1800.*C4+ 1446.*C3+ 356.*C2+ 33.*C+ 1.)
 U2(13,16)=4.*(-5040.*C8+ 2160.*C7- 792.*C6+ 360.*C5- 270.*C4-
1             378.*C3- 167.*C2- 24.*C- 1.)
 U2(14,14)=4.*(-5040.*C8+ 2160.*C7- 720.*C6- 120.*C5- 1368.*C4-
1             804.*C3- 220.*C2- 26.*C- 1.)
 U2(14,15)=2.*(-144.*C6+ 240.*C5- 360.*C4- 840.*C3- 278.*C2-
1             30.*C- 1.)
 U2(14,16)=4.*(-181440.*C9+ 40320.*C8- 7560.*C7+ 1440.*C6-
1             360.*C5- 828.*C4- 744.*C3- 170.*C2- 21.*C- 1.)
 U2(15,15)=-(720.*C5+ 2556.*C4+ 1692.*C3+ 384.*C2+ 34.*C+ 1.)
 U2(15,16)=2.*(-720.*C7+ 576.*C6- 360.*C5+ 240.*C4- 210.*C3-
1             168.*C2- 25.*C- 1.)
 U2(16,16)=4.*(-19958400.*C10+ 1814400.*C9- 181440.*C8+
1             20160.*C7- 2520.*C6- 1338.*C4- 834.*C3- 195.*C2-
2             16.*C- 1.)
 V2(1,1) = 1.
 V2(1,2) = -2.
 V2(1,3) = C+ 1.
 V2(1,4) = 2.
 V2(1,5) = -2.*(2.*C+ 1.)
 V2(1,6) = -2.
 V2(1,7) = 2.*C2+ 4.*C+ 1.
 V2(1,8) = 2.*(3.*C+ 1.)
 V2(1,9) = 2.
 V2(1,10)= -2.
 V2(1,11)= -2.*(4.*C+ 1.)
 V2(1,12)= -2.*(6.*C2+ 6.*C+ 1.)
 V2(1,13)= 2.*(12.*C2+ 8.*C+ 1.)
 V2(1,14)= 2.*(5.*C+ 1.)
 V2(1,15)= 6.*C3+ 18.*C2+ 9.*C+ 1.
 V2(1,16)= 2.
```

```
V2(2,2)  = 2.*(C+ 2.)
V2(2,3)  = -2.*(2.*C+ 1.)
V2(2,4)  = -4.*(C+ 1.)
V2(2,5)  = 2.*(2.*C2+ 7.*C+ 2.)
V2(2,6)  = 2.*(3.*C+ 2.)
V2(2,7)  = -2.*(6.*C2+ 6.*C+ 1.)
V2(2,8)  = -4.*(3.*C2+ 5.*C+ 1.)
V2(2,9)  = -4.*(2.*C+ 1.)
V2(2,10)= 2.*(5.*C+ 2.)
V2(2,11)= 2.*(12.*C2+ 13.*C+ 2.)
V2(2,12)= 2.*(6.*C3+ 30.*C2+ 17.*C+ 2.)
V2(2,13)= -4.*(12.*C3+ 28.*C2+ 11.*C+ 1.)
V2(2,14)= -4.*(10.*C2+ 8.*C+ 1.)
V2(2,15)= -2.*(24.*C3+ 36.*C2+ 12.*C+ 1.)
V2(2,16)= -4.*(3.*C+ 1.)
V2(3,3)  = 2.*C2+ 4.*C+ 1.
V2(3,4)  = 2.*(3.*C+ 1.)
V2(3,5)  = -2.*(6.*C2+ 6.*C+ 1.)
V2(3,6)  = -2.*(4.*C+ 1.)
V2(3,7)  = 6.*C3+ 18.*C2+ 9.*C+ 1.
V2(3,8)  = 2.*(12.*C2+ 8.*C+ 1.)
V2(3,9)  = 2.*(5.*C+ 1.)
V2(3,10)= -2.*(6.*C+ 1.)
V2(3,11)= -2.*(20.*C2+ 10.*C+ 1.)
V2(3,12)= -2.*(24.*C3+ 36.*C2+ 12.*C+ 1.)
V2(3,13)= 2.*(60.*C3+ 60.*C2+ 15.*C+ 1.)
V2(3,14)= 2.*(30.*C2+ 12.*C+ 1.)
V2(3,15)= 24.*C4+ 96.*C3+ 72.*C2+ 16.*C+ 1.
V2(3,16)= 2.*(7.*C+ 1.)
V2(4,4)  = 4.*(C2+ 2.*C+ 1.)
V2(4,5)  = -4.*(3.*C2+ 5.*C+ 1.)
V2(4,6)  = -4.*(3.*C2+ 3.*C+ 1.)
V2(4,7)  = 2.*(12.*C2+ 8.*C+ 1.)
V2(4,8)  = 4.*(3.*C3+ 9.*C2+ 7.*C+ 1.)
V2(4,9)  = 4.*(6.*C2+ 4.*C+ 1.)
V2(4,10)= -4.*(10.*C2+ 5.*C+ 1.)
V2(4,11)= -4.*(12.*C3+ 18.*C2+ 9.*C+ 1.)
V2(4,12)= -4.*(12.*C3+ 28.*C2+ 11.*C+ 1.)
V2(4,13)= 4.*(12.*C4+ 48.*C3+ 51.*C2+ 14.*C+ 1.)
V2(4,14)= 4.*(30.*C3+ 30.*C2+ 11.*C+ 1.)
V2(4,15)= 2.*(60.*C3+ 60.*C2+ 15.*C+ 1.)
V2(4,16)= 4.*(15.*C2+ 6.*C+ 1.)
V2(5,5)  = 2.*(6.*C3+ 30.*C2+ 17.*C+ 2.)
V2(5,6)  = 2.*(12.*C2+ 13.*C+ 2.)
V2(5,7)  = -2.*(24.*C3+ 36.*C2+ 12.*C+ 1.)
V2(5,8)  = -4.*(12.*C3+ 28.*C2+ 11.*C+ 1.)
V2(5,9)  = -4.*(10.*C2+ 8.*C+ 1.)
V2(5,10)= 2.*(30.*C2+ 19.*C+ 2.)
V2(5,11)= 2.*(60.*C3+ 90.*C2+ 27.*C+ 2.)
V2(5,12)= 2.*(24.*C4+ 156.*C3+ 132.*C2+ 31.*C+ 2.)
V2(5,13)= -4.*(60.*C4+ 180.*C3+ 105.*C2+ 19.*C+ 1.)
V2(5,14)= -4.*(60.*C3+ 66.*C2+ 16.*C+ 1.)
V2(5,15)= -2.*(120.*C4+ 240.*C3+ 120.*C2+ 20.*C+ 1.)
V2(5,16)= -4.*(21.*C2+ 11.*C+ 1.)
V2(6,6)  = 2.*(6.*C3+ 18.*C2+ 9.*C+ 2.)
```

```
V2(6,7) = -2.*(20.*C2+ 10.*C+ 1.)
V2(6,8) = -4.*(12.*C3+ 18.*C2+ 9.*C+ 1.)
V2(6,9) = -4.*(12.*C3+ 18.*C2+ 6.*C+ 1.)
V2(6,10)= 2.*(60.*C3+ 60.*C2+ 15.*C+ 2.)
V2(6,11)= 2.*(24.*C4+ 96.*C3+ 72.*C2+ 23.*C+ 2.)
V2(6,12)= 2.*(60.*C3+ 90.*C2+ 27.*C+ 2.)
V2(6,13)= -4.*(60.*C4+ 120.*C3+ 81.*C2+ 17.*C+ 1.)
V2(6,14)= -4.*(60.*C4+ 120.*C3+ 60.*C2+ 14.*C+ 1.)
V2(6,15)= -2.*(120.*C3+ 90.*C2+ 18.*C+ 1.)
V2(6,16)= -4.*(60.*C3+ 45.*C2+ 9.*C+ 1.)
V2(7,7) = 24.*C4+ 96.*C3+ 72.*C2+ 16.*C+ 1.
V2(7,8) = 2.*(60.*C3+ 60.*C2+ 15.*C+ 1.)
V2(7,9) = 2.*(30.*C2+ 12.*C+ 1.)
V2(7,10)= -2.*(42.*C2+ 14.*C+ 1.)
V2(7,11)= -2.*(120.*C3+ 90.*C2+ 18.*C+ 1.)
V2(7,12)= -2.*(120.*C4+ 240.*C3+ 120.*C2+ 20.*C+ 1.)
V2(7,13)= 2.*(360.*C4+ 480.*C3+ 180.*C2+ 24.*C+ 1.)
V2(7,14)= 2.*(210.*C3+ 126.*C2+ 21.*C+ 1.)
V2(7,15)= 120.*C5+ 600.*C4+ 600.*C3+ 200.*C2+ 25.*C+ 1.
V2(7,16)= 2.*(56.*C2+ 16.*C+ 1.)
V2(8,8) = 4.*(12.*C4+ 48.*C3+ 51.*C2+ 14.*C+ 1.)
V2(8,9) = 4.*(30.*C3+ 30.*C2+ 11.*C+ 1.)
V2(8,10)= -4.*(60.*C3+ 45.*C2+ 13.*C+ 1.)
V2(8,11)= -4.*(60.*C4+ 120.*C3+ 81.*C2+ 17.*C+ 1.)
V2(8,12)= -4.*(60.*C4+ 180.*C3+ 105.*C2+ 19.*C+ 1.)
V2(8,13)= 4.*(60.*C5+ 300.*C4+ 405.*C3+ 163.*C2+ 23.*C+ 1.)
V2(8,14)= 4.*(180.*C4+ 240.*C3+ 118.*C2+ 20.*C+ 1.)
V2(8,15)= 2.*(360.*C4+ 480.*C3+ 180.*C2+ 24.*C+ 1.)
V2(8,16)= 4.*(105.*C3+ 63.*C2+ 15.*C+ 1.)
V2(9,9) = 4.*(12.*C4+ 48.*C3+ 36.*C2+ 8.*C+ 1.)
V2(9,10)= -4.*(60.*C4+ 120.*C3+ 60.*C2+ 10.*C+ 1.)
V2(9,11)= -4.*(60.*C4+ 120.*C3+ 60.*C2+ 14.*C+ 1.)
V2(9,12)= -4.*(60.*C3+ 66.*C2+ 16.*C+ 1.)
V2(9,13)= 4.*(180.*C4+ 240.*C3+ 118.*C2+ 20.*C+ 1.)
V2(9,14)= 4.*(60.*C5+ 300.*C4+ 300.*C3+ 100.*C2+ 17.*C+ 1.)
V2(9,15)= 2.*(210.*C3+ 126.*C2+ 21.*C+ 1.)
V2(9,16)= 4.*(180.*C4+ 240.*C3+ 90.*C2+ 12.*C+ 1.)
V2(10,10)=2.*(120.*C5+ 600.*C4+ 600.*C3+ 200.*C2+ 25.*C+ 2.)
V2(10,11)=2.*(360.*C4+ 480.*C3+ 180.*C2+ 33.*C+ 2.)
V2(10,12)=2.*(210.*C3+ 182.*C2+ 37.*C+ 2.)
V2(10,13)=-4.*(420.*C4+ 420.*C3+ 162.*C2+ 23.*C+ 1.)
V2(10,14)=-4.*(360.*C5+ 900.*C4+ 600.*C3+ 150.*C2+ 20.*C+ 1.)
V2(10,15)=-2.*(336.*C3+ 168.*C2+ 24.*C+ 1.)
V2(10,16)=-4.*(360.*C5+ 900.*C4+ 600.*C3+ 150.*C2+ 15.*C+ 1.)
V2(11,11)=2.*(120.*C5+ 600.*C4+ 600.*C3+ 256.*C2+ 41.*C+ 2.)
V2(11,12)=2.*(360.*C4+ 690.*C3+ 306.*C2+ 45.*C+ 2.)
V2(11,13)=-4.*(360.*C5+ 900.*C4+ 768.*C3+ 234.*C2+ 27.*C+ 1.)
V2(11,14)=-4.*(360.*C5+ 900.*C4+ 600.*C3+ 186.*C2+ 24.*C+ 1.)
V2(11,15)=-2.*(840.*C4+ 840.*C3+ 252.*C2+ 28.*C+ 1.)
V2(11,16)=-4.*(420.*C4+ 420.*C3+ 126.*C2+ 19.*C+ 1.)
V2(12,12)=2.*(120.*C5+ 960.*C4+ 1080.*C3+ 380.*C2+ 49.*C+ 2.)
V2(12,13)=-4.*(360.*C5+ 1320.*C4+ 1020.*C3+ 276.*C2+ 29.*C+ 1.)
V2(12,14)=-4.*(420.*C4+ 538.*C3+ 210.*C2+ 26.*C+ 1.)
V2(12,15)=-2.*(720.*C5+ 1800.*C4+ 1200.*C3+ 300.*C2+ 30.*C+ 1.)
V2(12,16)=-4.*(168.*C3+ 120.*C2+ 21.*C+ 1.)
```

```
 V2(13,13)=4.*(360.*C6+ 2160.*C5+ 3540.*C4+ 1872.*C3+ 393.*C2+
1           34.*C+ 1.)
 V2(13,14)=4.*(1260.*C5+ 2100.*C4+ 1302.*C3+ 318.*C2+ 31.*C+ 1.)
 V2(13,15)=2.*(2520.*C5+ 4200.*C4+ 2100.*C3+ 420.*C2+ 35.*C+ 1.)
 V2(13,16)=4.*(840.*C4+ 672.*C3+ 213.*C2+ 26.*C+ 1.)
 V2(14,14)=4.*(360.*C6+ 2160.*C5+ 2700.*C4+ 1200.*C3+ 270.*C2+
1           28.*C+ 1.)
 V2(14,15)=2.*(1680.*C4+ 1344.*C3+ 336.*C2+ 32.*C+ 1.)
 V2(14,16)=4.*(1260.*C5+ 2100.*C4+ 1050.*C3+ 210.*C2+ 23.*C+ 1.)
 V2(15,15)=720.*C6+ 4320.*C5+ 5400.*C4+ 2400.*C3+ 450.*C2+
1           36.*C+ 1.
 V2(15,16)=2.*(504.*C3+ 216.*C2+ 27.*C+ 1.)
 V2(16,16)=4.*(360.*C6+ 2160.*C5+ 2700.*C4+ 1200.*C3+ 225.*C2+
1           18.*C+ 1.)

 U3(1,1) = -1.0
 U3(1,2) = 2.0 + 3.*C
 U3(1,3) = -(4.*C+ 1.)
 U3(1,4) = 2.*(C2- 3.*C- 1.)
 U3(1,5) = 8.*C2+ 13.*C+ 2.
 U3(1,6) = 6.*C3- 2.*C2+ 9.*C+ 2.
 U3(1,7) = -(18.*C2+ 10.*C+ 1.)
 U3(1,8) = 2.*(2.*C3- 12.*C2- 9.*C- 1.)
 U3(1,9) = 2.*(12.*C4- 4.*C3- 6.*C- 1.)
 U3(1,10)= 120.*C5- 36.*C4+ 6.*C3+ 4.*C2+ 15.*C+ 2.
 U3(1,11)= 12.*C4- 6.*C3+ 48.*C2+ 23.*C+ 2.
 U3(1,12)= 30.*C3+ 82.*C2+ 27.*C+ 2.
 U3(1,13)= 2.*(6.*C4- 60.*C3- 73.*C2- 17.*C- 1.)
 U3(1,14)= 2.*(24.*C5- 12.*C4- 40.*C2- 14.*C- 1.)
 U3(1,15)= -(96.*C3+ 86.*C2+ 18.*C+ 1.)
 U3(1,16)= 2.*(360.*C6- 96.*C5+ 18.*C4- 5.*C2- 9.*C- 1.)
 U3(2,2) = 2.*(C2- 7.*C- 2.)
 U3(2,3) = 8.*C2+ 13.*C+ 2.
 U3(2,4) = 2.*(3.*C3+ 3.*C2+ 11.*C+ 2.)
 U3(2,5) = 2.*(2.*C3- 30.*C2- 19.*C- 2.)
 U3(2,6) = 2.*(12.*C4- 2.*C3- 12.*C2- 15.*C- 2.)
 U3(2,7) = 30.*C3+ 82.*C2+ 27.*C+ 2.
 U3(2,8) = 2.*(6.*C4+ 12.*C3+ 65.*C2+ 25.*C+ 2.)
 U3(2,9) = 2.*(60.*C5- 12.*C4+ 26.*C2+ 19.*C+ 2.)
 U3(2,10)= 2.*(360.*C6-72.*C5+ 6.*C4- 45.*C2-23.*C- 2.)
 U3(2,11)= 2.*(24.*C5- 6.*C4- 60.*C3- 113.*C2- 31.*C- 2.)
 U3(2,12)= 2.*(6.*C4- 156.*C3- 159.*C2- 35.*C- 2.)
 U3(2,13)= 2.*(18.*C5+ 60.*C4+ 433.*C3+ 261.*C2+ 43.*C+ 2.)
 U3(2,14)= 2.*(120.*C6- 36.*C5+ 160.*C3+ 174.*C2+ 37.*C+ 2.)
 U3(2,15)= 144.*C4+ 566.*C3+ 294.*C2+ 45.*C+ 2.
 U3(2,16)= 2.*(2520.*C7- 480.*C6+54.*C5+5.*C3+69.*C2+27.*C+2.)
 U3(3,3) = -(18.*C2+ 10.*C+ 1.)
 U3(3,4) = 2.*(2.*C3- 12.*C2- 9.*C- 1.)
 U3(3,5) = 30.*C3+ 82.*C2+ 27.*C+ 2.
 U3(3,6) = 12.*C4- 6.*C3+ 48.*C2+ 23.*C+ 2.
 U3(3,7) = -(96.*C3+ 86.*C2+ 18.*C+ 1.)
 U3(3,8) = 2.*(6.*C4- 60.*C3- 73.*C2- 17.*C- 1.)
 U3(3,9) = 2.*(24.*C5- 12.*C4- 40.*C2- 14.*C- 1.)
 U3(3,10)= 240.*C6- 108.*C5+ 24.*C4+ 20.*C3+ 120.*C2+ 33.*C+ 2.
 U3(3,11)= 36.*C5- 24.*C4+ 300.*C3+ 228.*C2+ 41.*C+ 2.
```

```
 U3(3,12)= 144.*C4+ 566.*C3+ 294.*C2+ 45.*C+ 2.
 U3(3,13)= 2.*(24.*C5- 360.*C4- 618.*C3- 224.*C2- 27.*C- 1.)
 U3(3,14)= 2.*( 72.*C6- 48.*C5- 300.*C3- 164.*C2- 24.*C- 1.)
 U3(3,15)= -(600.*C4+ 756.*C3+ 246.*C2+ 28.*C+ 1.)
 U3(3,16)= 2.*( 720.*C7- 288.*C6+ 72.*C5-30.*C3-84.*C2-19.*C-1.)
 U3(4,4) = 4.*(6.*C4- 2.*C3- 9.*C2- 8.*C- 1.)
 U3(4,5) = 2.*(6.*C4+ 12.*C3+ 65.*C2+ 25.*C+ 2.)
 U3(4,6) = 2.*(60.*C5- 18.*C4+ 18.*C3+ 43.*C2+ 21.*C+ 2.)
 U3(4,7) = 2.*(6.*C4- 60.*C3- 73.*C2- 17.*C- 1.)
 U3(4,8) = 4.*( 12.*C5- 6.*C4- 48.*C3- 63.*C2- 16.*C- 1.)
 U3(4,9) = 4.*( 180.*C6-48.*C5+12.*C4-30.*C3-39.*C2-13.*C-1.)
 U3(4,10)= 2.*( 2520.*C7- 600.*C6+ 126.*C5- 24.*C4+ 145.*C3
1         +123.*C2+ 31.*C+ 2.)
 U3(4,11)= 2.*( 120.*C6-54.*C5+84.*C4+293.*C3+207.*C2+39.*C+2.)
 U3(4,12)= 2.*( 18.*C5+ 60.*C4+ 433.*C3+ 261.*C2+ 43.*C+ 2.)
 U3(4,13)= 4.*( 36.*C6- 24.*C5- 300.*C4-528.*C3-205.*C2-26.*C-1.)
 U3(4,14)= 4.*(360.*C7- 144.*C6+ 48.*C5- 180.*C4- 324.*C3-
1         154.*C2- 23.*C- 1.)
 U3(4,15)= 2.*(24.*C5- 360.*C4- 618.*C3- 224.*C2- 27.*C- 1.)
 U3(4,16)= 4.*(10080.*C8- 2160.*C7+ 396.*C6- 72.*C5- 144.*C3-
1         89.*C2- 18.*C- 1.)
 U3(5,5) = 2.*(6.*C4- 156.*C3- 159.*C2- 35.*C- 2.)
 U3(5,6) = 2.*( 24.*C5- 6.*C4- 60.*C3- 113.*C2- 31.*C- 2.)
 U3(5,7) = 144.*C4+ 566.*C3+ 294.*C2+ 45.*C+ 2.
 U3(5,8) = 2.*(18.*C5+ 60.*C4+ 433.*C3+ 261.*C2+ 43.*C+ 2.)
 U3(5,9) = 2.*(120.*C6- 36.*C5+ 160.*C3+ 174.*C2+ 37.*C+ 2.)
 U3(5,10)= 2.*( 720.*C7-216.*C6+24.*C5-330.*C3-248.*C2-43.*C-2.)
 U3(5,11)= 2.*( 72.*C6-24.*C5-360.*C4-918.*C3-388.*C2-51.*C-2.)
 U3(5,12)= 2.*( 24.*C5- 960.*C4- 1374.*C3- 470.*C2- 55.*C- 2.)
 U3(5,13)= 2.*( 72.*C6+ 360.*C5+ 3258.*C4+ 2712.*C3+ 687.*C2+
1         65.*C+ 2.)
 U3(5,14)= 2.*( 360.*C7- 144.*C6+ 1140.*C4+ 1668.*C3+ 540.*C2+
1         59.*C+ 2.)
 U3(5,15)= 840.*C5+ 4356.*C4+ 3138.*C3+ 740.*C2+ 67.*C+ 2.
 U3(5,16)= 2.*(5040.*C8- 1440.*C7+ 216.*C6+ 30.*C4+ 588.*C3+
1         335.*C2+ 49.*C+ 2.)
 U3(6,6) = 2.*(360.*C6- 96.*C5+ 18.*C4- 96.*C3-91.*C2- 27.*C- 2.)
 U3(6,7) = 36.*C5- 24.*C4+ 300.*C3+ 228.*C2+ 41.*C+ 2.
 U3(6,8) = 2.*(120.*C6- 54.*C5+ 84.*C4+ 293.*C3+207.*C2+39.*C+2.)
 U3(6,9) = 2.*(2520.*C7- 600.*C6+ 108.*C5+ 60.*C4+ 278.*C3
1         + 156.*C2+ 33.*C+ 2.)
 U3(6,10)= 2.*(20160.*C8-4320.*C7+ 720.*C6- 72.*C5- 360.*C4
1         -606.*C3- 238.*C2- 39.*C- 2.)
 U3(6,11)= 2.*(720.*C7- 288.*C6+ 72.*C5- 600.*C4- 786.*C3-
1         330.*C2- 47.*C- 2.)
 U3(6,12)= 2.*( 72.*C6- 24.*C5- 360.*C4-918.*C3-388.*C2-51.*C- 2.)
 U3(6,13)= 2.*(360.*C7- 216.*C6+ 480.*C5+ 2238.*C4+ 2094.*C3+
1         593.*C2+ 61.*C+ 2.)
 U3(6,14)= 2.*(5040.*C8- 1800.*C7+ 432.*C6+ 360.*C5+ 2148.*C4+
1         1632.*C3+ 482.*C2+ 55.*C+ 2.)
 U3(6,15)= 144.*C6- 120.*C5+ 2160.*C4+ 2286.*C3+ 634.*C2+ 63.*C+2.
 U3(6,16)= 2.*( 181440.*C9- 35280.*C8+ 5400.*C7- 648.*C6+ 1098.*C4+
1         1122.*C3+ 337.*C2+ 45.*C+ 2.)
 U3(7,7) = -(600.*C4+ 756.*C3+ 246.*C2+ 28.*C+ 1.)
 U3(7,8) = 2.*( 24.*C5- 360.*C4- 618.*C3- 224.*C2- 27.*C- 1.)
```

```
 U3(7,9) = 2.*( 72.*C6- 48.*C5- 300.*C3- 164.*C2- 24.*C- 1.)
 U3(7,10)= 720.*C7- 432.*C6+ 120.*C5+ 120.*C4+ 1050.*C3
1          + 446.*C2+ 55.*C+ 2.
 U3(7,11)= 144.*C6-120.*C5+2160.*C4+2286.*C3+634.*C2+63.*C+2.
 U3(7,12)= 840.*C5+ 4356.*C4+ 3138.*C3+ 740.*C2+ 67.*C+ 2.
 U3(7,13)= 2.*(120.*C6- 2520.*C5- 5646.*C4- 2812.*C3- 519.*C2-
1          39.*C- 1.)
 U3(7,14)= 2.*(288.*C7- 240.*C6- 2520.*C4- 1900.*C3- 426.*C2-
1          36.*C- 1.)
 U3(7,15)= -(4320.*C5+ 7092.*C4+ 3168.*C3+ 552.*C2+ 40.*C+ 1.)
 U3(7,16)= 2.*( 2160.*C8- 1152.*C7+ 360.*C6- 210.*C4- 840.*C3-
1          291.*C2- 31.*C- 1.)
 U3(8,8) = 4.*( 36.*C6- 24.*C5- 300.*C4- 528.*C3-205.*C2-26.*C-1.)
 U3(8,9) = 4.*( 360.*C7- 144.*C6+ 48.*C5- 180.*C4- 324.*C3
1          - 154.*C2- 23.*C- 1.)
 U3(8,10)= 2.*(5040.*C8- 1800.*C7+ 504.*C6- 120.*C5+ 1050.*C4
1          + 1206.*C3+ 429.*C2+ 53.*C+ 2.)
 U3(8,11)= 2.*( 360.*C7- 216.*C6+ 480.*C5+ 2238.*C4+ 2094.*C3
1          + 593.*C2+ 61.*C+ 2.)
 U3(8,12)= 2.*( 72.*C6+360.*C5+3258.*C4+2712.*C3+687.*C2+65.*C+2.)
 U3(8,13)= 4.*( 144.*C7- 120.*C6- 2160.*C5- 4806.*C4- 2534.*C3-
1          489.*C2- 38.*C- 1.)
 U3(8,14)= 4.*( 1080.*C8- 576.*C7+ 240.*C6- 1260.*C5- 2928.*C4-
1          1826.*C3- 405.*C2- 35.*C- 1.)
 U3(8,15)= 2.*(120.*C6- 2520.*C5- 5646.*C4- 2812.*C3- 519.*C2-
1          39.*C- 1.)
 U3(8,16)= 4.*( 20160.*C9- 6480.*C8+ 1584.*C7- 360.*C6-
1          1218.*C4- 1006.*C3- 285.*C2- 30.*C- 1.)
 U3(9,9) = 4.*(10080.*C8- 2160.*C7+ 360.*C6- 48.*C5- 300.*C4
1          - 372.*C3- 130.*C2- 20.*C- 1.)
 U3(9,10)= 2.*( 181440.*C9- 35280.*C8+ 5400.*C7- 720.*C6+ 480.*C5
1          + 2196.*C4+ 1548.*C3+ 390.*C2+ 47.*C+ 2.)
 U3(9,11)= 2.*( 5040.*C8- 1800.*C7+ 432.*C6+ 360.*C5+ 2148.*C4
1          + 1632.*C3+ 482.*C2+ 55.*C+ 2.)
 U3(9,12)= 2.*( 360.*C7- 144.*C6+ 1140.*C4+ 1668.*C3+ 540.*C2
1          + 59.*C+ 2.)
 U3(9,13)= 4.*( 1080.*C8- 576.*C7+ 240.*C6- 1260.*C5- 2928.*C4-
1          1826.*C3- 405.*C2- 35.*C- 1.)
 U3(9,14)= 4.*( 20160.*C9- 6480.*C8+ 1440.*C7- 240.*C6- 2160.*C5-
1          3504.*C4- 1640.*C3- 348.*C2- 32.*C- 1.)
 U3(9,15)= 2.*( 288.*C7- 240.*C6- 2520.*C4- 1900.*C3- 426.*C2-
1          36.*C- 1.)
 U3(9,16)= 4.*( 907200.*C10- 161280.*C9+ 22680.*C8- 2880.*C7+
1          360.*C6- 1260.*C5- 2844.*C4- 1390.*C3- 273.*C2-
2          27.*C- 1.)
 U3(10,10)=2.*( 1814400.*C10- 322560.*C9+ 45360.*C8- 5760.*C7
1          + 600.*C6- 4320.*C5- 7134.*C4- 3136.*C3- 579.*C2
2          - 55.*C- 2.)
 U3(10,11)=2.*( 40320.*C9- 12960.*C8+ 2880.*C7- 360.*C6- 2520.*C5
1          - 5562.*C4- 2924.*C3- 663.*C2- 63.*C- 2.)
 U3(10,12)=2.*( 2160.*C8- 864.*C7+ 120.*C6- 2730.*C4- 2740.*C3
1          - 717.*C2- 67.*C- 2.)
 U3(10,13)=2.*( 15120.*C9- 7200.*C8+ 2520.*C7- 720.*C6+ 8610.*C5+
1          12588.*C4+ 5835.*C3+ 1061.*C2+ 79.*C+ 2.)
 U3(10,14)=2.*( 362880.*C10- 105840.*C9+ 21600.*C8- 3600.*C7+
```

```
1          3240.*C6+ 18792.*C5+ 17184.*C4+ 5760.*C3+ 950.*C2+
2          73.*C+ 2.)
 U3(10,15)=2860.*C8- 2160.*C7+ 720.*C6+ 840.*C5+ 10080.*C4+
1          5862.*C3+ 1102.*C2+ 81.*C+ 2.
 U3(10,16)=2.*(1995840C.*C11- 3265920.*C10+ 423360.*C9- 50400.*C8+
1          5400.*C7+ 2520.*C6+ 18582.*C5+ 17424.*C4+ 5535.*C3+
2          805.*C2+ 63.*C+ 2.)
 U3(11,11)=2.*(2160.*C8- 1152.*C7+ 360.*C6- 4320.*C5- 7302.*C4
1          - 4008.*C3- 843.*C2- 71.*C- 2.)
 U3(11,12)=2.*(288.*C7- 120.*C6- 2520.*C5- 8166.*C4- 4712.*C3
1          - 945.*C2- 75.*C- 2.)
 U3(11,13)=2.*(1440.*C8- 1080.*C7+ 3240.*C6+ 19086.*C5+
1          22392.*C4+ 8511.*C3+ 1321.*C2+ 87.*C+ 2.)
 U3(11,14)=2.*(15120.*C9- 7200.*C8+ 2160.*C7+ 2520.*C6+
1          18456.*C5+ 17856.*C4+ 6840.*C3+ 1138.*C2+ 81.*C+ 2.)
 U3(11,15)=720.*C7- 720.*C6+ 17640.*C5+ 24168.*C4+ 9150.*C3+
1          1386.*C2+ 89.*C+ 2.
 U3(11,16)=2.*(362880.*C10- 105840.*C9+ 21600.*C8- 3240.*C7+
1          8946.*C5+ 11916.*C4+ 4755.*C3+ 873.*C2+ 71.*C+ 2.)
 U3(12,12)=2.*(120.*C6- 6840.*C5- 12738.*C4- 5980.*C3- 1071.*C2
1          -79.*C- 2.)
 U3(12,13)=2.*(360.*C7+ 2520.*C6+ 27486.*C5+ 29436.*C4+
1          10155.*C3+ 1463.*C2+ 91.*C+ 2.)
 U3(12,14)=2.*(1440.*C8- 720.*C7+ 9240.*C5+ 17124.*C4+ 7506.*C3+
1          1244.*C2+ 85.*C+ 2.)
 U3(12,15)=5760.*C6+ 37332.*C5+ 34704.*C4+ 11160.*C3+ 1540.*C2+
1          93.*C+ 2.
 U3(12,16)=2.*(15120.*C9- 5760.*C8+ 1080.*C7+ 210.*C5+ 5544.*C4+
1          4191.*C3+ 919.*C2+ 75.*C+ 2.)
 U3(13,13)=4.*(720.*C8- 720.*C7- 17640.*C6- 47688.*C5- 31962.*C4-
1          8334.*C3- 981.*C2- 52.*C- 1.)
 U3(13,14)=4.*(4320.*C9- 2880.*C8+ 1440.*C7- 10080.*C6-28884.*C5-
1          22440.*C4- 6624.*C3- 858.*C2- 49.*C- 1.)
 U3(13,15)=2.*(720.*C7- 20160.*C6- 56088.*C5- 35808.*C4-
1          8970.*C3- 1024.*C2- 53.*C- 1.)
 U3(13,16)=4.*(60480.*C10- 25920.*C9+ 7920.*C8- 2160.*C7-
1          11424.*C5- 11910.*C4- 4374.*C3- 673.*C2- 44.*C- 1.)
 U3(14,14)=4.*(60480.*C10- 25920.*C9+ 7200.*C8- 1440.*C7-
1          17640.*C6- 35592.*C5-21060.*C4-5760.*C3-762.*C2-
2          46.*C- 1.)
 U3(14,15)=2.*(1440.*C8- 1440.*C7- 23520.*C5- 22812.*C4- 6948.*C3-
1          892.*C2- 50.*C- 1.)
 U3(14,16)=4.*(1814400.*C11- 483840.*C10+ 90720.*C9- 14400.*C8+
1          2160.*C7- 10080.*C6- 28212.*C5- 17760.*C4- 4620.*C3-
1          622.*C2- 41.*C- 1.)
 U3(15,15)=-(35280.*C6+ 71856.*C5+ 41112.*C4+ 9720.*C3+ 1070.*C2+
1          54.*C+ 1.)
 U3(15,16)=2.*(8640.*C9- 5760.*C8+ 2160.*C7- 1680.*C5- 9072.*C4-
1          4278.*C3- 692.*C2- 45.*C- 1.)
 U3(16,16)=4.*(119750400.*C12- 18144000.*C11+ 2177280.*C10-
1          241920.*C9+ 25200.*C8- 2160.*C7- 17640.*C6-
2          35832.*C5- 20610.*C4- 4830.*C3- 557.*C2- 36.*C- 1.)
 V3(1,1) = 1. + 2.*C
 V3(1,2) = -1.0*(2. + 7.*C +2.*C2)
 V3(1,3) = 6.*C2+ 6.*C+ 1.
```

```
V3(1,4) = 2.*(3.*C2+ 5.*C+ 1.)
V3(1,5) = -(6.*C3+ 30.*C2+ 17.*C+ 2.)
V3(1,6) = -(12.*C2+ 13.*C+ 2.)
V3(1,7) = 24.*C3+ 36.*C2+ 12.*C+ 1.
V3(1,8) = 2.*(12.*C3+ 28.*C2+ 11.*C+ 1.)
V3(1,9) = 2.*(10.*C2+ 8.*C+ 1.)
V3(1,10)= -(30.*C2+ 19.*C+ 2.)
V3(1,11)= -(60.*C3+ 90.*C2+ 27.*C+ 2.)
V3(1,12)= -(24.*C4+ 156.*C3+ 132.*C2+ 31.*C+ 2.)
V3(1,13)= 2.*(60.*C4+ 180.*C3+ 105.*C2+ 19.*C+ 1.)
V3(1,14)= 2.*(60.*C3+ 66.*C2+ 16.*C+ 1.)
V3(1,15)= 120.*C4+ 240.*C3+ 120.*C2+ 20.*C+ 1.
V3(1,16)= 2.*(21.*C2+ 11.*C+ 1.)
V3(2,2) = 2.*(9.*C2+ 11.*C+ 2.)
V3(2,3) = -(6.*C3+ 30.*C2+ 17.*C+ 2.)
V3(2,4) = -2.*(3.*C3+ 21.*C2+ 15.*C+ 2.)
V3(2,5) = 2.*(36.*C3+ 64.*C2+ 23.*C+ 2.)
V3(2,6) = 2.*(12.*C3+ 38.*C2+ 19.*C+ 2.)
V3(2,7) = -(24.*C4+ 156.*C3+ 132.*C2+ 31.*C+ 2.)
V3(2,8) = -2.*(12.*C4+ 108.*C3+ 111.*C2+ 29.*C+ 2.)
V3(2,9) = -2.*(30.*C3+ 60.*C2+ 23.*C+ 2.)
V3(2,10)= 2.*(60.*C3+ 87.*C2+ 27.*C+ 2.)
V3(2,11)= 2.*(60.*C4+ 240.*C3+ 171.*C2+ 35.*C+ 2.)
V3(2,12)= 2.*(180.*C4+ 420.*C3+ 225.*C2+ 39.*C+ 2.)
V3(2,13)= -2.*(60.*C5+ 660.*C4+ 885.*C3+ 343.*C2+ 47.*C+ 2.)
V3(2,14)= -2.*(180.*C4+ 450.*C3+ 244.*C2+ 41.*C+ 2.)
V3(2,15)= -(120.*C5+ 960.*C4+ 1080.*C3+ 380.*C2+ 49.*C+ 2.)
V3(2,16)= -2.*(105.*C3+ 119.*C2+ 31.*C+ 2.)
V3(3,3) = 24.*C3+ 36.*C2+ 12.*C+ 1.
V3(3,4) = 2.*(12.*C3+ 28.*C2+ 11.*C+ 1.)
V3(3,5) = -(24.*C4+ 156.*C3+ 132.*C2+ 31.*C+ 2.)
V3(3,6) = -(60.*C3+ 90.*C2+ 27.*C+ 2.)
V3(3,7) = 120.*C4+ 240.*C3+ 120.*C2+ 20.*C+ 1.
V3(3,8) = 2.*(60.*C4+ 180.*C3+ 105.*C2+ 19.*C+ 1.)
V3(3,9) = 2.*(60.*C3+ 66.*C2+ 16.*C+ 1.)
V3(3,10)= -(210.*C3+ 182.*C2+ 37.*C+ 2.)
V3(3,11)= -(360.*C4+ 690.*C3+ 306.*C2+ 45.*C+ 2.)
V3(3,12)= -(120.*C5+ 960.*C4+ 1080.*C3+ 380.*C2+ 49.*C+ 2.)
V3(3,13)= 2.*(360.*C5+ 1320.*C4+ 1020.*C3+ 276.*C2+ 29.*C+ 1.)
V3(3,14)= 2.*(420.*C4+ 588.*C3+ 210.*C2+ 26.*C+ 1.)
V3(3,15)= 720.*C5+ 1800.*C4+ 1200.*C3+ 300.*C2+ 30.*C+ 1.
V3(3,16)= 2.*(168.*C3+ 120.*C2+ 21.*C+ 1.)
V3(4,4) = 4.*(12.*C3+ 23.*C2+ 10.*C+ 1.)
V3(4,5) = -2.*(12.*C4+ 108.*C3+ 111.*C2+ 29.*C+ 2.)
V3(4,6) = -2.*(12.*C4+ 78.*C3+ 81.*C2+ 25.*C+ 2.)
V3(4,7) = 2.*(60.*C4+ 180.*C3+ 105.*C2+ 19.*C+ 1.)
V3(4,8) = 4.*(60.*C4+ 150.*C3+ 93.*C2+ 18.*C+ 1.)
V3(4,9) = 4.*(30.*C4+ 90.*C3+ 63.*C2+ 15.*C+ 1.)
V3(4,10)= -2.*(180.*C4+ 345.*C3+ 181.*C2+ 35.*C+ 2.)
V3(4,11)= -2.*(60.*C5+ 480.*C4+ 645.*C3+ 281.*C2+ 43.*C+ 2.)
V3(4,12)= -2.*(60.*C5+ 660.*C4+ 885.*C3+ 343.*C2+ 47.*C+ 2.)
V3(4,13)= 4.*(360.*C5+ 1110.*C4+ 894.*C3+ 255.*C2+ 28.*C+ 1.)
V3(4,14)= 4.*(180.*C5+ 660.*C4+ 594.*C3+ 198.*C2+ 25.*C+ 1.)
V3(4,15)= 2.*(360.*C5+1320.*C4+1020.*C3+ 276.*C2+ 29.*C+ 1.)
V3(4,16)= 4.*(210.*C4+ 294.*C3+ 123.*C2+ 20.*C+ 1.)
```

```
      V3(5,5) = 2.*(180.*C4+ 420.*C3+ 225.*C2+ 39.*C+ 2.)
      V3(5,6) = 2.*(60.*C4+ 240.*C3+ 171.*C2+ 35.*C+ 2.)
      V3(5,7) = -(120.*C5+ 960.*C4+ 1080.*C3+ 380.*C2+ 49.*C+ 2.)
      V3(5,8) = -2.*(60.*C5+ 660.*C4+ 885.*C3+ 343.*C2+ 47.*C+ 2.)
      V3(5,9) = -2.*(180.*C4+ 450.*C3+ 244.*C2+ 41.*C+ 2.)
      V3(5,10)= 2.*(420.*C4+ 756.*C3+ 330.*C2+ 47.*C+ 2.)
      V3(5,11)= 2.*(360.*C5+ 1740.*C4+ 1608.*C3+ 486.*C2+ 55.*C+ 2.)
      V3(5,12)= 2.*(1080.*C5+ 3120.*C4+ 2220.*C3+ 576.*C2+ 59.*C+ 2.)
      V3(5,13)= -2.*(360.*C6+ 4680.*C5+ 7740.*C4+ 3972.*C3+
     1          813.*C2+ 69.*C+ 2.)
      V3(5,14)= -2.*(1260.*C5+ 3780.*C4+ 2646.*C3+ 654.*C2+ 63.*C+ 2.)
      V3(5,15)= -(720.*C6+ 6840.*C5+ 9600.*C4+ 4500.*C3+ 870.*C2+
     1          71.*C+ 2.)
      V3(5,16)= -2.*(840.*C4+ 1176.*C3+ 429.*C2+ 53.*C+ 2.)
      V3(6,6) = 2.*(120.*C4+ 240.*C3+ 141.*C2+ 31.*C+ 2.)
      V3(6,7) = -(360.*C4+ 690.*C3+ 306.*C2+ 45.*C+ 2.)
      V3(6,8) = -2.*(60.*C5+ 480.*C4+ 645.*C3+ 281.*C2+ 43.*C+ 2.)
      V3(6,9) = -2.*(60.*C5+ 480.*C4+ 540.*C3+ 218.*C2+ 37.*C+ 2.)
      V3(6,10)= 2.*(360.*C5+ 1320.*C4+ 1020.*C3+ 312.*C2+ 43.*C+ 2.)
      V3(6,11)= 2.*(720.*C5+ 1800.*C4+ 1368.*C3+ 420.*C2+ 51.*C+ 2.)
      V3(6,12)= 2.*(360.*C5+ 1740.*C4+ 1608.*C3+ 486.*C2+ 55.*C+ 2.)
      V3(6,13)= -2.*(360.*C6+ 3420.*C5+ 5640.*C4+ 3174.*C3+
     1          711.*C2+ 65.*C+ 2.)
      V3(6,14)= -2.*(360.*C6+ 3420.*C5+ 4800.*C4+ 2502.*C3+
     1          588.*C2+ 59.*C+ 2.)
      V3(6,15)= -(2520.*C5+ 5880.*C4+ 3444.*C3+ 756.*C2+ 67.*C+ 2.)
      V3(6,16)= -2.*(1260.*C5+ 2940.*C4+ 1722.*C3+ 423.*C2+ 49.*C+ 2.)
      V3(7,7) = 720.*C5+ 1800.*C4+ 1200.*C3+ 300.*C2+ 30.*C+ 1.
      V3(7,8) = 2.*(360.*C5+ 1320.*C4+ 1020.*C3+ 276.*C2+ 29.*C+ 1.)
      V3(7,9) = 2.*(420.*C4+ 588.*C3+ 210.*C2+ 26.*C+ 1.)
      V3(7,10)= -(1680.*C4+ 1848.*C3+ 552.*C2+ 59.*C+ 2.)
      V3(7,11)= -(2520.*C5+ 5880.*C4+ 3444.*C3+ 756.*C2+ 67.*C+ 2.)
      V3(7,12)= -(720.*C6+6840.*C5+9600.*C4+4500.*C3+870.*C2+71.*C+2.)
      V3(7,13)= 2.*(2520.*C6+ 10920.*C5+ 10500.*C4+ 3780.*C3+
     1          595.*C2+ 41.*C+ 1.)
      V3(7,14)= 2.*(3360.*C5+ 5712.*C4+ 2688.*C3+ 496.*C2+ 38.*C+ 1.)
      V3(7,15)= 5040.*C6+ 15120.*C5+ 12600.*C4+ 4200.*C3+ 630.*C2+
     1          42.*C+ 1.
      V3(7,16)= 2.*(1512.*C4+ 1368.*C3+ 351.*C2+ 33.*C+ 1.)
      V3(8,8) = 4.*(360.*C5+ 1110.*C4+ 894.*C3+ 255.*C2+ 28.*C+ 1.)
      V3(8,9) = 4.*(180.*C5+ 660.*C4+ 594.*C3+ 198.*C2+ 25.*C+ 1.)
      V3(8,10)= -2.*(1260.*C5+ 2940.*C4+ 1974.*C3+531.*C2+57.*C+2.)
      V3(8,11)= -2.*(360.*C6+ 3420.*C5+ 5640.*C4+ 3174.*C3+ 711.*C2
     1           + 65.*C+ 2.)
      V3(8,12)= -2.*(360.*C6+ 4680.*C5+ 7740.*C4+ 3972.*C3+ 813.*C2
     1          + 69.*C+ 2.)
      V3(8,13)= 4.*(2520.*C6+ 9240.*C5+ 9156.*C4+ 3444.*C3+ 563.*C2+
     1          40.*C+ 1.)
      V3(8,14)= 4.*(1260.*C6+ 5460.*C5+ 6006.*C4+ 2574.*C3+ 473.*C2+
     1          37.*C+ 1.)
      V3(8,15)= 2.*(2520.*C6+10920.*C5+10500.*C4+ 3780.*C3+ 595.*C2+
     1          41.*C+ 1.)
      V3(8,16)= 4.*(1680.*C5+ 2856.*C4+ 1524.*C3+ 343.*C2+ 32.*C+ 1.)
      V3(9,9) = 4.*(360.*C5+ 900.*C4+ 600.*C3+ 168.*C2+ 22.*C+ 1.)
      V3(9,10)= -2.*(360.*C6+ 3420.*C5+ 4800.*C4+ 2250.*C3+
```

```
1          480.*C2+ 51.*C+ 2.)
 V3(9,11)= -2.*(360.*C6+ 3420.*C5+ 4800.*C4+ 2502.*C3+
1          588.*C2+ 59.*C+ 2.)
 V3(9,12)= -2.*(1260.*C5+ 3780.*C4+ 2646.*C3+ 654.*C2+
1          63.*C+ 2.)
 V3(9,13)= 4.*(1260.*C6+ 5460.*C5+ 6006.*C4+ 2574.*C3+ 473.*C2+
1          37.*C+ 1.)
 V3(9,14)= 4.*(2520.*C6+ 7560.*C5+ 6300.*C4+ 2280.*C3+ 410.*C2+
1          34.*C+ 1.)
 V3(9,15)= 2.*(3360.*C5+ 5712.*C4+ 2688.*C3+ 496.*C2+ 38.*C+ 1.)
 V3(9,16)= 4.*(1260.*C6+ 5460.*C5+ 5250.*C4+ 1890.*C3+ 325.*C2+
1          29.*C+ 1.)
 V3(10,10)=2.*(5040.*C6+ 15120.*C5+ 12600.*C4+ 4200.*C3+
1          685.*C2+ 59.*C+ 2.)
 V3(10,11)=2.*(2520.*C6+ 10920.*C5+ 10500.*C4+ 4140.*C3+
1          785.*C2+ 67.*C+ 2.)
 V3(10,12)=2.*(3360.*C5+ 7224.*C4+ 4056.*C3+ 847.*C2+ 71.*C+ 2.)
 V3(10,13)=-2.*(10080.*C6+ 27720.*C5+ 22680.*C4+ 7815.*C3+
1          1215.*C2+ 83.*C+ 2.)
 V3(10,14)=-2.*(2520.*C7+ 27720.*C6+ 46620.*C5+ 27300.*C4+
1          7530.*C3+ 1092.*C2+ 77.*C+ 2.)
 V3(10,15)=-(15120.*C5+ 20160.*C4+ 7920.*C3+ 1260.*C2+ 85.*C+ 2.)
 V3(10,16)=-2.*(2520.*C7+ 27720.*C6+ 46620.*C5+ 27300.*C4+
1          7035.*C3+ 927.*C2+ 67.*C+ 2.)
 V3(11,11)=2.*(5040.*C6+ 15120.*C5+ 14112.*C4+ 5568.*C3+
1          981.*C2+ 75.*C+ 2.)
 V3(11,12)=2.*(2520.*C6+ 14280.*C5+ 16212.*C4+ 6468.*C3+
1          1091.*C2+ 79.*C+ 2.)
 V3(11,13)=-2.*(2520.*C7+ 27720.*C6+ 54180.*C5+ 37380.*C4+
1          10995.*C3+ 1491.*C2+ 91.*C+ 2.)
 V3(11,14)=-2.*(2520.*C7+ 27720.*C6+ 46620.*C5+ 29820.*C4+
1          8970.*C3+ 1296.*C2+ 85.*C+ 2.)
 V3(11,15)=-(20160.*C6+ 55440.*C5+ 40320.*C4+ 11760.*C3+
1          1560.*C2+ 93.*C+ 2.)
 V3(11,16)=-2.*(10080.*C6+ 27720.*C5+ 20160.*C4+ 6375.*C3+
1          1011.*C2+ 75.*C+ 2.)
 V3(12,12)=2.*(7560.*C6+ 26040.*C5+ 23100.*C4+ 7980.*C3+ 1225.*C2
1          + 83.*C+ 2.)
 V3(12,13)=-2.*(2520.*C7+ 37800.*C6+ 74340.*C5+ 47460.*C4+
1          12915.*C3+ 1641.*C2+ 95.*C+ 2.)
 V3(12,14)=-2.*(10080.*C6+ 35280.*C5+ 30240.*C4+ 9840.*C3+
1          1410.*C2+ 89.*C+ 2.)
 V3(12,15)=-(5040.*C7+ 55440.*C6+ 93240.*C5+ 54600.*C4+ 14070.*C3+
1          1722.*C2+ 97.*C+ 2.)
 V3(12,16)=-2.*(7560.*C5+ 12600.*C4+ 5895.*C3+ 1065.*C2+ 79.*C+2.)
 V3(13,13)=4.*(20160.*C7+ 85680.*C6+ 100800.*C5+ 47040.*C4+
1          10200.*C3+ 1083.*C2+ 54.*C+ 1.)
 V3(13,14)=4.*(10080.*C7+ 50400.*C6+ 65520.*C5+ 34320.*C4+
1          8250.*C3+ 954.*C2+ 51.*C+ 1.)
 V3(13,15)=2.*(20160.*C7+ 100800.*C6+ 115920.*C5+ 52080.*C4+
1          10920.*C3+ 1128.*C2+ 55.*C+ 1.)
 V3(13,16)=4.*(15120.*C6+ 30240.*C5+ 19620.*C4+ 5640.*C3+ 759.*C2+
1          46.*C+ 1.)
 V3(14,14)=4.*(20160.*C7+ 70560.*C6+ 70560.*C5+ 31380.*C4+
1          7200.*C3+ 852.*C2+ 48.*C+ 1.)
```

```
      V3(14,15)=2.*(30240.*C6+ 60480.*C5+ 35280.*C4+ 8640.*C3+ 990.*C2+
     1           52.*C+ 1.)
      V3(14,16)=4.*(10080.*C7+ 50400.*C6+ 57960.*C5+ 26040.*C4+
     1           5790.*C3+ 702.*C2+ 43.*C+ 1.)
      V3(15,15)=40320.*C7+ 141120.*C6+ 141120.*C5+ 58800.*C4+
     1           11760.*C3+ 1176.*C2+ 56.*C+ 1.
      V3(15,16)=2.*(15120.*C5+ 16560.*C4+ 5580.*C3+ 780.*C2+ 47.*C+ 1.)
      V3(16,16)=4.*(20160.*C7+ 70560.*C6+ 70560.*C5+ 29400.*C4+
     1           5880.*C3+ 627.*C2+ 38.*C+ 1.)

      DO 301 I= 2,NN
      II      = I-1
      DO 301 J= 1,II
      U0(I,J)=U0(J,I)
      U1(I,J)=U1(J,I)
      U2(I,J)=U2(J,I)
      U3(I,J)=U3(J,I)
      V0(I,J)=V0(J,I)
      V1(I,J)=V1(J,I)
      V2(I,J)=V2(J,I)
      V3(I,J)=V3(J,I)
  301 CONTINUE

      DO 10 I = 1,NN
      DO 10 J = 1,NN
      S(I,J) = U0(I,J) + V0(I,J)*YYY
      H(I,J) = (U1(I,J) + V1(I,J)*YYY)*A2*C2 +
     1         (U2(I,J) + V2(I,J)*YYY)*A*C   +
     2        (GAMA*GAMA*(U3(I,J) + V3(I,J)*YYY)/8.0)/(A2*C2)
   10 CONTINUE
      DO 20 I = 1,NN
   20 WRITE(6,50) (S(I,J),J=1,N),(H(I,L),L=1,N)
   50 FORMAT(2X,2(2X,F8.4),5X,2(2X,F8.4))


  A*X -LAMBDA*B*X = 0
      CALL EA11AD(A,B,C,ID,D,N,W)
      C(N,N)  = AUTOVETORES (SAIDA)
      D(N)    = AUTOVALORES (SAIDA)
      ID      = DIMENSAO DECLARADA DAS MATRIZES
      NN      = DIMENSAO REALMENTE UTILIZADA
      W(5*N)  = WORKING ARRAY


      ID     = 16
      CALL EA11AD(H,S,AV,ID,D,NN,W)
      MINUS   = 1
      DO 51 I = 2,NN
      IF( D(I).LT.D(MINUS)) MINUS = I
   51 CONTINUE
      F       = D(MINUS)
      DO 31 I = 1,NN
      AUTVT(I)= AV(I,MINUS)
   31 CONTINUE
      RETURN
      END
```

APÊNDICE D: ROTINA PARA OS ELEMENTOS DE MATRIZ (CASO c = ZERO)

```
      SUBROUTINE LCOUL2(N,X,F)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON/CAMPO/EPS
      COMMON/ENER/BIGK,BIGC,BIGZ,ANORMA
      DIMENSION X(1)
      COMMON/ENER/BIGK,BIGC,BIGZ
HIDROGENIO : PESQUISA DA RELEVANCIA DOS TERMOS COM INDEX.LE.5
       DRIVE PARA MINIMIZACAO.                     10.01.1986

F = C0 + C1*X + C2*Y + C3*XY + C4*X2 + C5*Y2 + C6*X2*Y + C7*X*Y2
    + C8*X3 + C9*Y3 + C10*X2*Y2 + C11*X3*Y + C12*X*Y3
    + C13*X4 + C14*Y4 + C15*X5 + C16*Y5 + C17*X4*Y + C18*X*Y4
    + C19*X3*Y2 + C20*X2*Y3

      C1  = 0.0
      C2  = 0.0
      C3  = 0.0
      C4  = 0.0
      C5  = 0.0
      C6  = 0.0
      C7  = 0.0
      C8  = 0.0
      C9  = 0.0
      C10 = 0.0
      C11 = 0.0
      C12 = 0.0
      C13 = 0.0
      C14 = 0.0
      C15 = 0.0
      C16 = 0.0
      C17 = 0.0
      C18 = 0.0
      C19 = 0.0
      C20 = 0.0
      GO TO (5,    20,30,    50,    70,    90,100,     120,     140,
     *       160,    180,     200),N
200   C20 = X(12)
      C19 = X(12)
180   C17 = X(11)
      C18 = X(11)
160   C15 = X(10)
      C16 = X(10)
140   C10 = X(7 )
120   C12 = X(8 )
      C11 = X(8 )
100   C13 = X(9 )
      C14 = X(9 )
 90   C9  = X(6 )
      C7  = X(5)
 70   C8  = X(6)
      C6  = X(5)
 50   C4  = X(4)
      C5  = X(4)
 30   C3  = X(3)
 20   C1  = X(2)
```

```
      C2    = X(2)
    5 A     = X(1)

      ANORMA = 1. + 3.*C1 +3.*C2 +4.*C3 +8.*C4 +8.*C5 + 10.*C6 + 10.*C7
     1 +30.*C8 +30.*C9 +24.*C10 +36.*C11 +36.*C12 +144.*(C13+C14)
     2 +840.*(C15+C16) + 168.*(C17+C18) + 84.*(C19+C20)
     3 +C1*( 4.*(C1+C2) +10.*C3 +30.*C4 +10.*C5 +36.*C6 +24.*C7
     4+144.*C8 +35.*C9 +84.*C10 +168.*C11 +84.*C12 +840.*C13 +168.*C14
     5+5760.*C15 +960.*C16 +960.*C17 +384.*(C18+C19) +288.*C20)
     6 +C2*( 4.*C2 +10.*(C3+C4) +30.*C5 +24.*C6 +36.*(C7+C8) +144.*C9
     7+84.*(C10+C11) +168.*(C12+C13) +840.*C14 +960.*C15 + 5760.*C16
     8+384.*C17+950.*C18 +288.*C19+384.*C20) +C3*( 12.*C3 +36.*(C4+C5)
     9+84.*(C6+C7) +168.*( C8+C9) +288.*C10 +384.*(C11+C12) +960.*(C13+
     *C14) +6480.*(C15+C16) +2160.*(C17+C18) + 1296.*(C19+C20)) + C4*(
     172.*C4 +24.*C5 +168.*C6 + 84.*C7 +840.*C8 +84.*C9 +384.*C10 +
     2960.*C11 +288.*C12 +5760.*C13+384.*C14 +45360.*C15 +2160.*C16
     3+6480.*C17 +1296.*C18 +2160.*C19 +1296.*C20) + C5*(72.*C5 + 84.*
     4 C6 +168.*C7 +84.*C8 +840.*C9 +384.*C10 +288.*C11 +960.*C12 +
     5 384.*C13 +5760.*C14 +2160.*C15 + 45360.*C16 +1296.*C17 +6480.*C18
     6 +1296.*C19 +2160.*C20) + C6*( 192.*C6 +288.*C7 +960.*C8 +384.*C9
     7 +1296.*C10 +2160.*C11 +1296.*C12 +6480.*C13 +2160.*C14 +
     8 50400.*C15 +14400.*(C16+C17) +7200.*(C18+C19) +5760.*C20) +C7*(
     9 192.*C7 +384.*C8 +960.*C9 +1296.*(C10+C11) +2160.*(C12+C13) )
      ANORMA = ANORMA +  C7*( 6480.*C14 +14400.*C15 +50400.*C16 +
     1 7200.*C17 +14400.*C18 +5760.*C19 +7200.*C20) + C8*( 2880.*C8
     2+288.*C9 +2160.*C10 +6480.*C11 +1296.*C12 +45360.*C13 +1296.*C14
     3+403200.*C15 +7200.*C16 +50400.*C17 +5760.*C18 +14400.*C19 +
     47200.*C20) +C9*( 2880.*C9 +2160.*C10 +1296.*C11 +6480.*C12 +
     51296.*C13 +45360.*C14 +7200.*C15 +403200.*C16 +5760.*C17 +50400.*
     6C18 +7200.*C19 + 14400.*C20) + C10*(2880.*C10 +7200.*(C11+C12) +
     714400.*(C13+C14) +110880.*(C15+C16) +47520*(C17+C18) +31680.*(C19
     8+C20)) + C11*(7200.*C11 +5760.*C12 +50400.*C13 +7200.*C14 +
     9 443520.*C15 +47520.*C16 +110880.*C17 +31680.*C18 +47520.*C19 +
     * 31680.*C20) + C12*(7200.*(C12+C13) +50400.*C14 +47520.*C15 +
     1 443520.*C16 +31680.*C17 + 110880.*C18 +31680.*C19 +47520.*C20) +
     2 C13*( 201600.*C13 +5760.*C14 +3991680.*C15 + 31680.*C16 +
     3 443520.*C17 +31680.*C18 +110880.*C19 +47520.*C20)+ C14*(201600.*
     4 C14 +31680.*C15 +3991680.*C16 +31680.*C17 +443520.*C18 +47520.*
     5 C19 + 110880.*C20) +C15*( 21772800.*C15 +172800.*C16 +4354560.*
     6 C17 +207360.*C18 +967680.*C19 +362880.*C20) + C16*(21772800.*C16
     7+207360.*C17 +4354560.*C18 +362880.*C19 +967680.*C20) +C17*(
     8 483840.*C17 +172800.*C18 +362880.*C19 +207360.*C20)
      ANORMA = ANORMA + C18*( 483840.*C18 +207360.*C19 +362880.*C20) +
     1 C19*(103680.*C19 +172800.*C20) + 103680.*C20*C20

      BIGK = 0.5 + (C1+C2)/2.0 -(C6 +C7 +3.*C8 +3.*C9 +4.*C10 +6.*(C11+
     1 C12) +24.*(C13+C14) +180.*(C15 +C16) +36.*(C17+C18) +18.*(C19+
     2 C20) ) + C1*( C1 +C3 +5.*C4 -C5 +2.*C6 +12.*C8 -( 6.*C9 +2.*C10
     3 +6.*C12 ) + 12.*C13 -( 36.*C14 +240.*C15 +240.*C16 +48.*(C17+C18)
     4 +24.*(C19+C20) )) + C2*( C2 +C3 -C4 +5.*C5 +2.*C7 -6.*C8 +12.*C9
     5 -(2.*C10 +6.*C11 +36.*C13) +12.*C14 -(240.*(C15+C16) +48.*(C17+
     6 C18) +24.*(C19+C20) )) + C3*( 2.*(C3+C4+C5) +10.*(C6+C7) +24.*(
     7 C10+C11+C12) -(48.*(C13+C14) +600.*(C15+C16)) +24.*(C17+C18) +
     8 48.*(C19+C20)) + C4*( 12.*C4 -4.*C5 +12.*C6 -2.*C7 +108.*C8 -
     9 18.*C9 +48.*C11 -24.*C12 +480.*C13 -96.*C14 +1800.*C15 -600.*C16
```

```
 * +120.*C17 -168.*C18 -24.*C19 -72.*C20) +C5*(12.*C5 -2.*C6 +12.*
 1 C7 -18.*C8 +108.*C9 -24.*C11 +48.*C12 -96.*C13 +480.*C14 -600.*
 2 C15 +1800.*C16 -168.*C17 +120.*C18 -72.*C19 -24.*C20) + C6*(
 3 24.*(C6+C7) +48.*C8 -24.*C9 +120.*C10 +216.*C11 +48.*C12 +120.*
 4 C13 -216.*C14 -720.*C15 -1920.*C16 +960.*C17 -48.*C18 +528.*C19
 5 +288.*C20) + C7*(24.*(C7-C8) +48.*(C9+C11) +120.*C10 +216.*(C12-
 6 C13) +120.*C14 -1920.*C15 -720.*C16 -48.*C17 +960.*C18 +288.*C19
 7 +528.*C20) + C8*(360.*C8 -72.*C9 -24.*C10 +360.*C11 -144.*C12 +
 8 4680.*C13 -360.*C14 +30240.*C15 +2160.*(-C16 +C17) -864.*C18 -
 9 432.*C20)
   BIGK = BIGK + C9*( 360.*C9 -24.*C10 -144.*C11 +360.*(C12-C13)
 1 +4680.*C14 -2160.*C15 +30240.*C16 -864.*C17 +2160.*C18-432.*C19)
 2 + C10*(288.*C10 +528.*(C11+C12)-480.*(C13+C14) -6480.*(C15+C16)
 3 + 2160.*(C17+C18) +2592.*(C19+C20)) + C11*(720.*C11 +2160.*C13
 4 -1008.*C14 +10080.*C15 -7920.*C16 +9360.*C17 -1152.*C18 +3600.*
 5 C19 +1152.*C20) + C12*(720.*C12 -1008.*C13 +2160.*C14 -7920.*
 6 C15 +10080.*C16 -1152.*C17 +9360.*C18 +1152.*C19 +3600.*C20) +
 7 C13*(20160.*C13 -1728.*C14 +342720.*C15 -10080.*C16 +20160.*C17
 8 -(5472.*C18 +720.*C19 +3600.*C20)) + C14*(20160.*C14-10080.*C15
 9 +342720.*C16 -5472.*C17 + 20160.*C18 -3600.*C19 -720.*C20) +
 * C15*(1814400.*C15 -57600.*C16 +161280.*C17 -40320.*C18 -20160.*
 1 C19 -34560.*C20) +C16*(1814400.*C16 -40320.*C17 +161280.*C18
 2 -34560.*C19 -20160.*C20) + C17*(40320.*C17 -11520.*C18 +23040.*
 3 C19 +2880.*C20) + C18*(40320.*C18 +2880.*C19 +23040.*C20)
 4 +C19*(8640.*C19 +11520.*C20) +8640.*C20*C20

   BIGC = -(1. + 2.*(C1 + C2 + C3) +4.*(C4 + C5 + C6 + C7) +12.*(C8
 1 +C9) + 8.*C10 +12.*(C11 +C12) +48.*(C13 +C14) + 240.*(C15 +C16)
 2 +48.*(C17 +C18) +24.*(C19 +C20)) -C1*(2.*(C1 +C2+2.*C3 +6.*C4 +
 3 2.*C5 +6.*C6 +4.*C7) +48.*(C8 +C11 +C14) +12.*C9 +24.*(C10 +C12)
 4 +240.*(C13 +C16 +C17) +1440.*C15 +96.*(C18 +C19) +72.*C20)
 5 -C2*(2.*(C2 +2.*C3 +2.*C4 +6.*C5 + 4.*C6 + 6.*C7 + 6.*C8) +
 6 48.*(C9 +C12 +C13) +24.*(C10 +C11) +240.*(C14 +C15 +C18) +
 7 1440.*C16 +96.*(C17 +C20) +72.*C19) -C3*(4.*C3 +12.*(C4 +C5)
 8 +24.*(C6 +C7) +48.*(C8 +C9) +72.*C10 +96.*(C11 +C12) +240.*(C13
 9 +C14) +1440.*(C15 +C16) +480.*(C17 +C18) +288.*(C19 +C20))
 * -C4*(24.*(C4 +C7 +C9) +8.*C5 +48.*C6 +240.*(C8 +C11) +96.*(C10
 1 +C14) +72.*C12 + 1440.*(C13 +C17) +10080.*C15 +480.*(C16 +C19)
 2 +288.*(C18 +C20)) -C5*(24.*(C5 +C6 +C8) +48.*C7 +240.*(C9 +C12)
 3 +96.*(C10 +C13) +72.*C11 +1440.*(C14 +C18) +480.*(C15 +C20) +
 4 10080.*C16 +288.*(C17 +C19)) -C6*(48.*C6 +72.*C7 +240.*C8 +96.*C9
 5 +288.*(C10 +C12) +480.*(C11 +C14) +1440.*(C13 +C18 +C19) +
 6 10080.*C15 +2880.*(C16 +C17) +1152.*C20) -C7*(48.*C7 +96.*C8 +
 7 240.*C9 +288.*(C10 +C11) +480.*(C12 +C13) +1440.*(C14 +C17 +C20)
 8 +2880.*(C15 +C18) +10080.*C16 +1152.*C19) -C8*(720.*C8 +72.*C9
 9 +480.*C10 +1440.*(C11 +C16) +288.*(C12 +C14) +10080.*(C13 +C17))
   BIGC = BIGC -C8*(80640.*C15 +1152.*C18 +2880.*C19 +1440.*C20)
 1 -C9*( 720.*C9 +480.*C10 +288.*(C11+C13) +1440.*(C12+C15) +
 2 10080.*(C14+C18) +80640.*C16 +1152.*C17 +1440.*C19 +2880.*C20)
 3 -C10*(576.*C10 +1440.*(C11+C12) +2880.*(C13+C14) + 20160.*(C15+
 4 C16) +8640.*(C17+C18) +5760.*(C19+C20)) - C11*(1440.*(C11+C14)+
 5 1152.*C12 +10080.*C13 +80640.*C15 +8640.*(C16+C19) +20160.*C17
 6 +5760.*(C18+C20)) - C12*(1440.*(C12+C13) +10080.*C14 +8640.*(C15
 7 +C20) +80640.*C16 +5760.*(C17+C19) +20160.*C18) -C13*( 40320.*
 8 C13 + 1152.*C14 +725760.*C15 +5760.*(C16+C18) +80640.*C17 +
```

```
 9 20160.*C19 +8640.*C20) - C14*(40320.*C14 +5760.*(C15+C17) +
 * 725760.*C15 +80640.*C18 +8640.*C19 +20160.*C20) -C15*(3628800.*
 1 C15 + 28800.*C16 + 725760.*C17 +34560.*C18 +161280.*C19 +60480.*
 2 C20) -C16*(3628800.*C16 +34560.*C17 +725760.*C18 +60480.*C19 +
 3 161280.*C20) -C17*(80640.*C17 +28800.*C18 +60480.*C19 +34560.*
 4 C20) -C18*(80640.*C18 +34560.*C19 +60480.*C20) -C19*(17280.*C19
 5 +28800.*C20) - 17280.*C20*C20

  BIGZ = 2. + 10.*(C1 + C2) + 24.*C3 + 36.*(C4 + C5) + 84.*(C6 + C7
 1 ) + 168.*(C8 + C9) + 288.*C10 + 384.*(C11 + C12) + 960.*(C13 +
 2 C14) + 6480.*(C15 + C16)+2160.*(C17 + C18) + 1296.*(C19 + C20)+
 3  C1*(18.*C1 + 24.*C2 + 84.*(C3+C5)+ 168.*C4 + 384.*(C6+C9) +
 4 288.*C7 +960.*C8 + 1296.*(C10+C12)+ 2160.*(C11+C14)+ 6480.*C13
 5 + 50400.*C15 + 14400.*(C16+C17)+ 7200.*(C18+C19)+ 5760.*C20)
 6 +C2*(18.*C2+ 84.*(C3+C4) + 168.*C5 + 288.*C6 + 384.*(C7+C8) +
 7 960.*C9 + 1296.*(C10+C11) + 2160.*(C12+C13) + 6480.*C14 +
 8 14400.*(C15+C18) + 50400.*C16 + 7200.*(C17+C20) + 5760.*
 9 C19) + C3*(144.*C3 + 384.*(C4+C5) + 1296.*(C6+C7) + 2160.
 * *(C8+C9) + 5760.*C10 + 7200.*(C11+C12) + 14400.*(C13+C14)
 1 + 110880.*(C15+C16) + 47520.*(C17+C18) + 31680.*(C19+C20))
 2 + C4*(480.*C4 + 288.*C5 + 2160.*C6 + 1296.*(C7+C9) + 6480.
 3 *C8 + 7200.*(C10+C14) + 14400.*C11 + 5760.*C12 + 50400.*
 4 C13 + 443520.*C15 + 47520.*(C16+C19) + 110880.*C17 +
 5 31680.*(C18+C20)) + C5*(480.*C5 + 1296.*(C6+C8) + 2160.*
 6 C7 + 6480.*C9 + 7200.*(C10+C13) + 5760.*C11 + 14400.*C12
 7 + 50400.*C14 + 47520.*(C15+C20) + 443520.*C16 + 31680.*(
 8 C17+C19) + 110880.*C18) + C6*(3600.*C6 + 5760.*C7 +
 9 14400.*C8 + 7200.*C9 + 31680.*(C10+C12) + 47520.*(C11+C14))
  BIGZ = BIGZ + C6*(110880.*C13 + 967680.*C15 + 362880.*(C16+
 1 C17) + 207360.*(C18+C19) + 172800.*C20) + C7*(3600.*C7 +
 2 7200.*C8 + 14400.*C9 + 31680.*(C10+C11) + 47520.*(C12+C13)+
 3 110880.*C14 + 362880.*(C15+C18) + 967680.*C16 + 207360.*(
 4 C17+C20) + 172800.*C19) + C8*(25200.*C8 + 5760.*C9 +
 5 47520.*C10 + 110880.*C11 + 31680.*(C12+C14) + 443520.*C13
 6 + 4354560.*C15 + 207360.*(C16+C20) + 967680.*C17 + 172800.
 7 *C18 + 362880.*C19) + C9*(25200.*C9 + 47520.*C10 + 31680.*
 8 (C11+C13) + 110880.*C12 + 443520.*C14 + 207360.*(C15+C19)
 9 + 4354560.*C16 + 172800.*C17 + 967680.*C18 + 362880.*C20)
 * +C10*(86400.*C10 + 207360.*(C11+C12) + 362880.*(C13+C14) +
 1 3144960.*(C15+C16) + 1572480.*(C17+C18) + 1123200.*(C19 +
 2 C20))+ C11*(181440.*C11 + 172800.*C12 + 967680.*C13 +
 3 207360.*C14 + 9434880.*C15 + 1572480.*(C16+C19) + 3144960.
 4 *C17 + 1123200.*(C18+C20)) + C12*(181440.*C12 + 207360.*C13
 5 + 967680.*C14 + 1572480.*C15 + 9434880.*C16 + 1123200.*(C17
 6 +C19) + 3144960.*C18 + 1572480.*C20) + C13*(2177280.*C13 +
 7 172800.*C14 + 47174400.*C15 + 1123200.*(C16+C18) + 9434880.
 8 *C17 + 3144960.*C19 + 1572480.*C20) + C14*(2177280.*C14 +
 9 1123200.*(C15+C17) + 47174400.*C16 + 9434880.*C18 + 1572480.*C19)
  BIGZ = BIGZ + C14*3144960.*C20 + C15*(279417600.*C15 + 7257600.*
 1 C16 + 101606400.*C17 + 8467200.*C18 + 30481920.*C19 + 13547520.
 2 *C20)+ C16*(279417600.*C16 + 8467200.*C17 + 101606400.*C18 +
 3 13547520.*C19 + 30481920.*C20) + C17*(15240960.*C17 + 7257600.
 4 *C18 + 13547520.*C19 + 8467200.*C20) + C18*(15240960.*C18 +
 5 8467200.*C19 + 13547520.*C20) + C19*(4233600.*C19 + 7257600.*
 6 C20) + 4233600.*C20*C20
   BIGZ = BIGZ*EPS
   F   = ( A*A*BIGK + A*BIGC + BIGZ/(A*A))/ANORMA
   RETURN
   END
```

BIBLIOGRAFIA

1 . Encyclopedia of Mathematics and its Aplications, Vol IV, symetry and separations of variables, Massachusetts, Addison-Wesley, 1976.

2 . Schiff, L. I. Quantum Mechanics, New York, McGraw-Hill, 1968.

3 . Cohen - Tannoudji, C. Quantum Mechanics, vol-I, New York, J. Wiley and Sons, 1977.

4 . Kleppner D 1982 Laser - Plasma Interaction, Les Houches XXXIV ed. R Balian and J-C Adam (Amsterdam: North - Holland).

5 . Kleppner D., Littman M. G. and Zimmerman M. 1983, Rydberg states of Atoms and Molecules ed R F Stebbings and F B Dunning (Cambridge: Cambridge University Press).

6 . Gay J. C. and Delande D. 1983 Comment. At. Mol. Phys. 13 275

7 . Dicke, R. H., Wittke, J. P., Introduction to Quantum Mechanics, Massachusetts, Addison - Wesley, 1978.

8 . Rau A.R.P., Mueller R.O. and Spruch L. 1975 Phys. Rev. A 11 1865.

9 . Rau, A.R.P. and Spruch L. 1976 Astrophys. J. 207 671.

10. Gallas J.A.C. 1985 J. Phys. B: At. Mol. Phys. 18 2199.

11. Surmelian G.L. and O'Connell R.F. 1974 Astrophys. J. 160 741.

12. Surmelian G.L. and O'Connell R.F. 1976 Astrophys. J. 204 311 (Erratum)****

13. Simola J. and Virtamo J. 1978 J. Phys. B: At. Mol. Phys. 11 3309.

14. Wunner G. and Ruder H. 1982 J. Physique 43 C2 137.

15. Rösner W, Wunner G., Herold H. and Ruder H. 1984 J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17 29.

16. Forster H., Strupat W., Rösner W., Wunner G. Ruder H. and Herold H. 1984 J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17 1301.

17. Le Guillou J.C. and Zinn- Justin J. 1983 Ann. Phys. NY 147 57

18. Silverman J.N. 1983 Phys. Rev. A 28 498.

19. Baye D. and Vincke M. 1984 J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17 L 631.

20. Rech P.C., Gallas M.R. and Gallas J.A.C. 1986 J. Phys. B: At. Mol. Phys. 19 L 215.

21. Davis, P.J. and Rabinowitz P. Methods of Numerical Integration, Computer Science and Applied Methematics, New York, Academic Press, 1975.