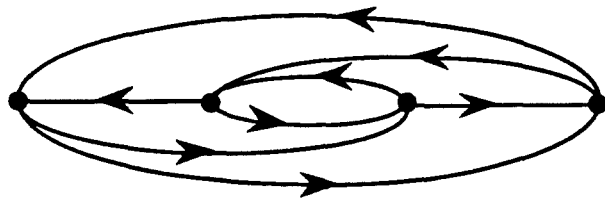
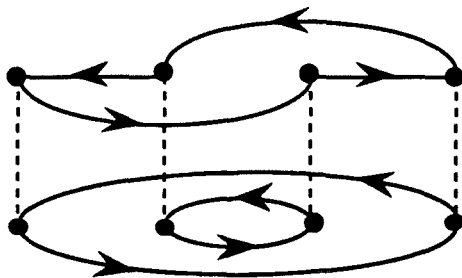


veamos los factores de interacción no-equivalentes compatibles con el diagrama de Hugenholtz



(4.7)

El diagrama de Goldstone de referencia (diagrama de Goldstone con el mayor número posible de ciclos) asociado al anterior diagrama de Hugenholtz y su permutación representativa serán:



$$\hat{P} = (1375)(28)(46) \quad (4.8)$$

Observese que

$$1000 \equiv 0100 \equiv 0010 \equiv 0001$$

$$1100 \equiv 1010 \equiv 0101 \equiv 0011$$

$$1001 \equiv 0110$$

$$1110 \equiv 1101 \equiv 1011 \equiv 0111$$

Por consiguiente, podemos formar, para el diagrama de Goldstone de referencia (4.8), los siguientes conjuntos disjuntos de números binarios:

$$\mathbb{H}_1 = \{0000\}$$

$$\mathbb{H}_2 = \{1000, 0100, 0010, 0001\}$$

$$\mathbb{H}_3 = \{1100, 1010, 0101, 0011\}$$

$$\mathbb{H}_4 = \{1001, 0110\}$$

$$\mathbb{H}_5 = \{1110, 1101, 1011, 0111\}$$

$$\mathbb{H}_6 = \{1111\}$$

Cualquier \mathbb{H}_i ($i=1,2,\dots,6$ -en este caso-) contiene números binarios correspondientes a intercambios de vértices que conducen, a partir del diagrama de Goldstone de referencia (4.8), a diagramas de Goldstone equivalentes (es decir, transformables unos en otros mediante permutación de vértices). En otras palabras, todos los números binarios de un conjunto \mathbb{H}_i representan, conjuntamente con el diagrama de Hugenholtz (4.7), el mismo factor de interacción.

Escogiendo un único representante de cada \mathbb{H}_i , obtenemos los seis diagramas de Goldstone no-equivalentes compatibles con el diagrama de Hugenholtz (4.7). En la tabla siguiente resumimos los resultados:

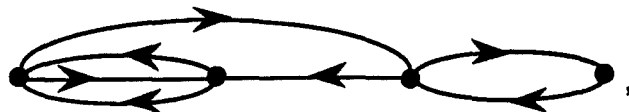
Nº bin.	\hat{R}	$\hat{Q} = \hat{P} \cdot \hat{R}$	Diag. de Goldstone
0000	(e)	(1375)(28)(4)	
1000	(12)	(182375)(46)	
1100	(12)(34)	(18236475)	

1001	(12)(78)	(185)(237)(4)	
1110	(12)(34)(56)	(18236)(475)	
1111	(12)(34)(56)(8)	(18547236)	

Notese que con objeto de definir los números binarios no equivalentes, hemos de dibujar el diagrama de Goldstone asociado con $00\dots 0$; es decir, hemos de dibujar el diagrama de Goldstone de referencia. Nosotros escogeremos siempre, como tal diagrama de referencia, aquel que siendo compatible con el diagrama de Hugenholtz dado, tenga el número máximo de ciclos. Puede suceder, sin embargo, que exista más de uno de este tipo. En tal caso, deberemos identificar explícitamente el diagrama de Goldstone que usamos como referencia.

(iii) Existe otro tipo de simetría que puede aparecer en algunos diagramas:

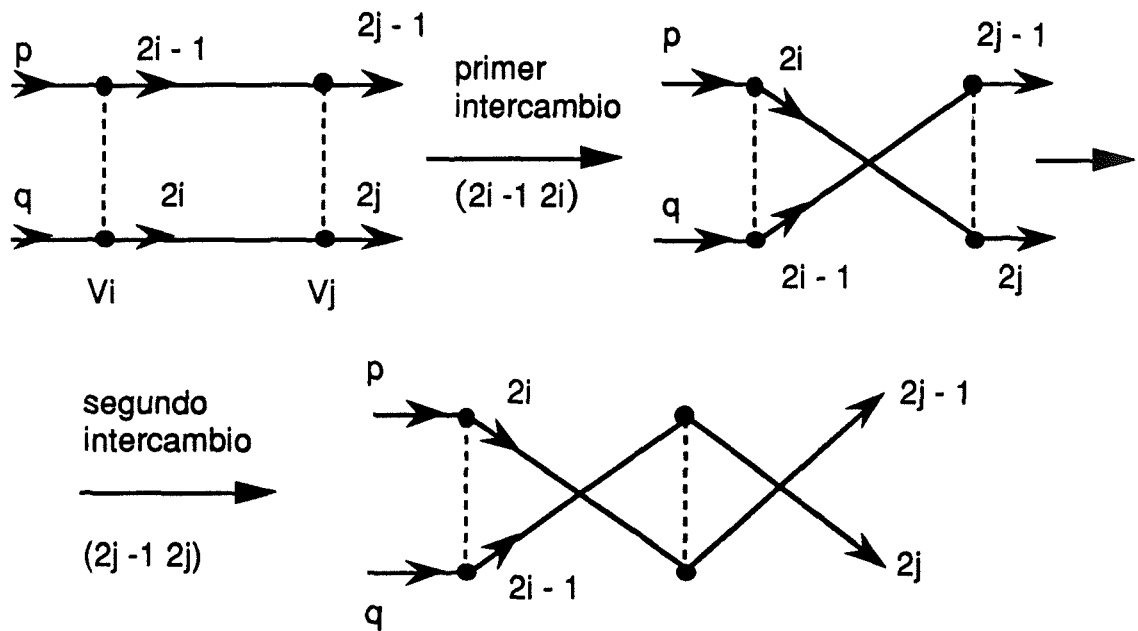
Cuando dos vértices estén unidos por dos líneas igualmente orientadas, como por ejemplo los vértices 1 y 2 del diagrama



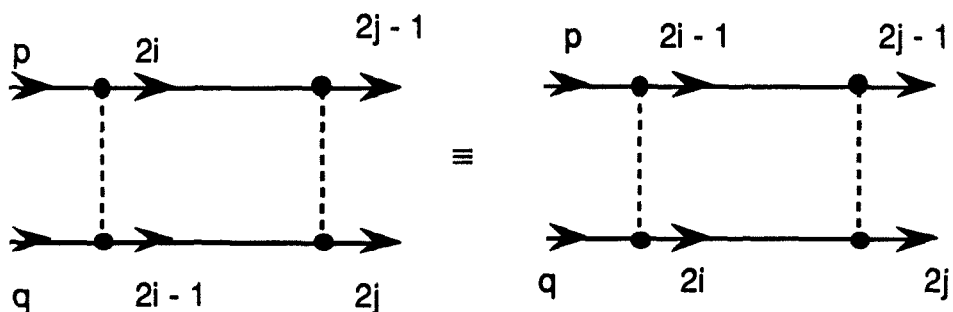
aparecen dos nuevas simetrías, entre los números binarios, que podemos representar en la forma $\dots 1..1\dots \equiv \dots 0..0\dots$ y $\dots 1..0\dots \equiv \dots 0..1\dots$. (Los dígitos 0 y 1

explicitados en los números binarios anteriores, corresponden a los vértices unidos por líneas con igual sentido). Por ejemplo, para el diagrama de Hugenholtz anterior tenemos $1101 \equiv 0001$ y $1000 \equiv 0100$ (entre otras equivalencias).

Una demostración gráfica de las anteriores simetrías resulta inmediata. En efecto, si llamamos i, j a los vértices de Goldstone conectados por dos líneas igualmente orientadas, podemos ver que $\dots 1..1\dots \equiv \dots 0..0\dots$:



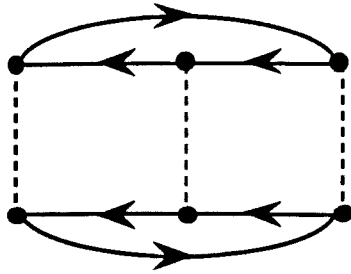
Si ahora realizamos un intercambio entre los puntos inferior y superior del vértice j (lo cual siempre es posible en virtud de la simetría de las integrales bielectrónicas generalizadas: $\{2j\ 2i-1 \mid 2j-1\ 2i\} \equiv \{2j-1\ 2i \mid 2j\ 2i-1\}$) obtenemos



(donde en el último paso tan solo hemos hecho un reetiquetaje: a $2i-1$ le llamamos $2i$ y viceversa).

Como puede apreciarse, la primera y última figura de la serie son idénticas. Por tanto, intercambiar flechas en dos vértices tales como i y j (vértices unidos por dos flechas igualmente orientadas) equivale a no hacer nada. De ahí que $\dots 11\dots \equiv \dots 00\dots$ (si $j = i + 1$) ó $\dots 1..1\dots \equiv \dots 0..0\dots$ (si $j > i + 1$).

Por ejemplo, el diagrama de Goldstone



tiene una permutación asociada $\hat{P} = (135)(246)$. Si intercambiamos flechas a nivel del primero y segundo vértice, obtendremos un diagrama de Goldstone cuya permutación será:

$$\hat{Q} = \hat{P} (12)(34) = (135)(246) (12)(34) = (145)(236)$$

Si ahora hacemos una permutación vertical de los puntos pertenecientes al segundo vértice del diagrama asociado a \hat{Q} , obtenemos un nuevo diagrama equivalente al anterior. Ahora bien, realizar esta permutación equivale a sustituir 3 por 4 (y viceversa) en la permutación \hat{Q} . Dicho cambio conduce a la permutación \hat{P} ; es decir,

$$\hat{Q} = (145)(236) \xrightarrow{3 \leftrightarrow 4} (135)(246) = \hat{P}.$$

Por tanto, el diagrama de Goldstone que obtenemos es idéntico al de partida.

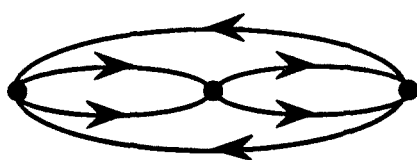
Análogamente puede demostrarse la equivalencia $\dots 1 \dots 0 \dots \equiv \dots 0 \dots 1 \dots$ para vértices conectados por dos líneas igualmente orientadas.

En definitiva, con objeto de identificar cualquier factor de interacción proveniente de $\text{Tr}(H^n)$, dibujamos los diagramas de Hugenholtz (y los diagramas de Goldstone de referencia) de la n -ésima potencia de MBPT (una versión temporal representativa). Recuerdese que hemos de incluir también los diagramas no conexos. Finalmente, escribimos un conjunto de números binarios, diagramáticamente no equivalentes, por cada diagrama de Hugenholtz. Esto último lo hacemos siguiendo las reglas anteriormente expuestas.

Una vez hemos determinado los factores de interacción, podemos obtener los coeficientes de propagación asociados tal como se indica en la sección 3.5; es decir, obteniendo las distintas t -secuencias correspondientes a las versiones temporales, agrupando según enganches superiores y calculando los pesos asociados.

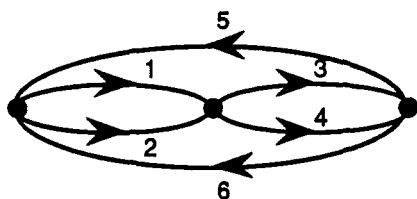
El uso de diagramas de Hugenholtz como etiqueta parcial de un diagrama de Goldstone (o equivalentemente de un factor de interacción) conduce a una simplificación en el etiquetaje de los factores de interacción. La única desventaja que este método tiene, frente al método diagramático visto en el capítulo anterior, es el hecho de necesitar dibujar el diagrama de Hugenholtz (o su correspondiente diagrama de Goldstone de referencia) para poder discernir las posibles equivalencias entre los números binarios representativos de intercambios de flechas en los vértices. De todas formas esto no es un problema insalvable si consideramos momentos no superiores al quinto.

En lo que resta de este apartado vamos a ver cómo trasladar el etiquetaje basado en los diagramas de Hugenholtz más un número binario; a otro que sea puramente numérico. Para ello, podemos considerar un diagrama de Hugenholtz como su esqueleto más la orientación de las líneas. El esqueleto de un diagrama de Hugenholtz representa el número de índices comunes en cada uno de los $\binom{n}{2}$ pares distintos de integrales que podemos considerar en un factor de interacción. Lo cual está representado por la etiqueta 3 del método diagramático expuesto en el capítulo anterior (para más detalles ver la sección 3.4.1). El otro rasgo que necesitamos caracterizar numéricamente (de un diagrama de Hugenholtz) es la orientación de sus líneas. Para ello, siguiendo con la convención de etiquetar como $2i - 1, 2i$ las líneas salientes del vértice i de un diagrama, y representando ambas por t_i , podemos caracterizar la orientación de las líneas de un diagrama mediante el número de tipos de índices involucrados en cada vértice. Por ejemplo, para caracterizar la orientación del diagrama



(4.9)

etiquetamos las flechas salientes de cada vértice tal como se ha indicado. Obtenemos:



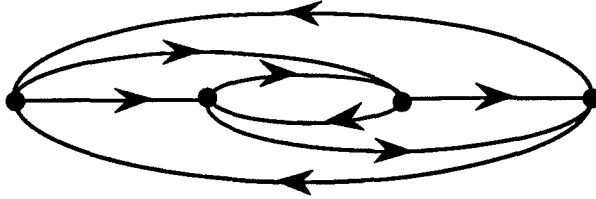
Vértice 1: $\{1, 2, 5, 6\} \Rightarrow \{t_1, t_1, t_3, t_3\} \Rightarrow 2$ tipos de t_i índices

Vértice 2: $\{1, 2, 3, 4\} \Rightarrow \{t_1, t_1, t_2, t_2\} \Rightarrow 2$ tipos de t_i índices

Vértice 3: $\{3, 4, 5, 6\} \Rightarrow \{t_2, t_2, t_3, t_3\} \Rightarrow 2$ tipos de t_i índices

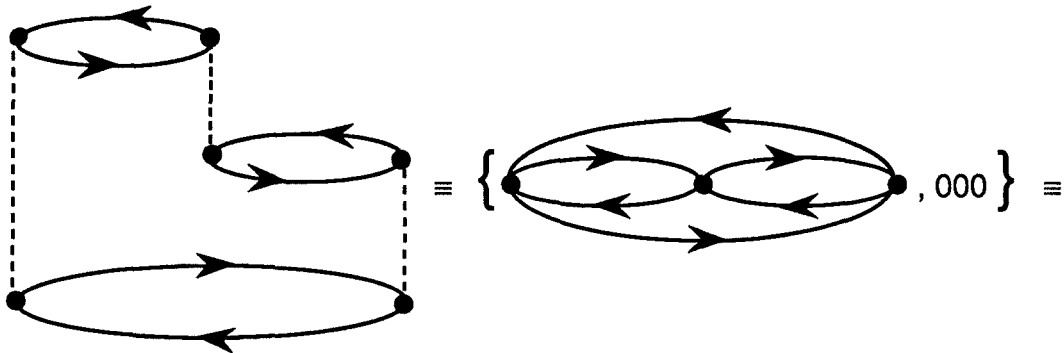
Por tanto, la orientación del diagrama (4.9) viene caracterizada por $(2, 2, 2)$.

Análogamente, para el diagrama



la orientación estará caracterizada por $(2, 3, 3, 3)$.

En definitiva, un diagrama de Goldstone especificado por el diagrama de Hugenholtz asociado más un número binario, puede ser numéricamente etiquetado con tan solo tres etiquetas. Por ejemplo:


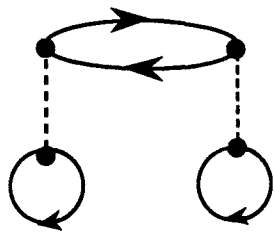
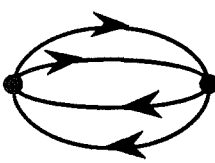
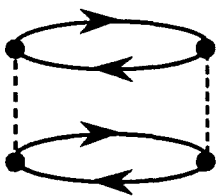


$$\{(2^3), (3^3), 000\} \equiv \sum_{i,k,a,c,p,q}^K \{i a | k q\} \{a i | c p\} \{p c | q k\}.$$

En este segundo método diagramático (y en su translación numérica) debe tenerse presente la necesidad de explicitar la elección de los diagramas de Goldstone de referencia (uno para cada diagrama de Hugenholtz); ya que de otra forma, la tercera etiqueta (número binario representativo de los intercambios de flechas en los vértices del diagrama de Goldstone de referencia) sería ambigua.


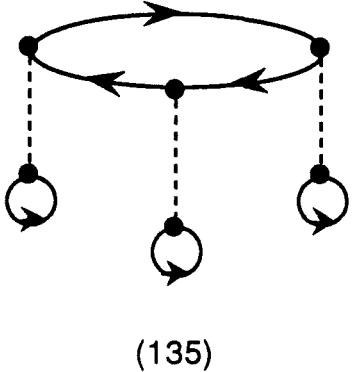

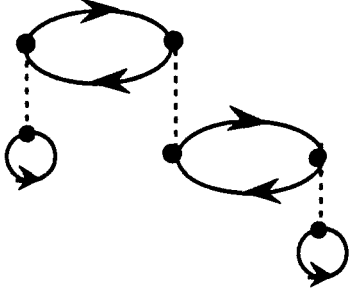
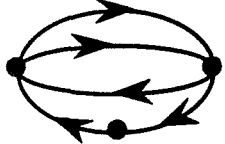
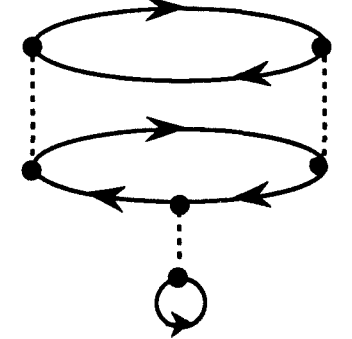
A continuación damos los resultados de la clasificación de los factores de interacción correspondientes al segundo, tercero y cuarto momento centrado; utilizando, para ello, este segundo método diagramático basado en los diagramas de Hugenholtz.

Tabla 4.1.- Factores de interacción para el segundo momento centrado.

Diag. de Hugenholtz	Diag. G de ref. y \hat{P} asociada	Nº. bin.	$\hat{Q} = \hat{P} \hat{R}$ *	Etiqueta
	 (13)	00 10 11	(13) (123) (1234)	{(2), (2), 00} {(2), (2), 10} {(2), (2), 11}
	 (13)(24)	00 10	(13)(24) (1324)	{(4), (2), 00} {(4), (2), 10}

(*) \hat{Q} es la permutación representativa del diagrama de Goldstone (factor de interacción) que se obtiene cuando en los vértices del diagrama de Goldstone de referencia efectuamos los intercambios de líneas indicados en el número binario. \hat{R} viene determinada por el número binario. Por ejemplo, para el número binario 00, $\hat{R} = (e)$; para 11, $\hat{R} = (12)(34)$; etc.

Tabla 4.2.- Factores de interacción para el tercer momento centrado.

Diag. de Hugenholtz	Diag. G.de ref. y \hat{P} asociada	Nº. bin.	$\hat{Q} = \hat{P} \hat{R}$	Etiqueta
	 <p style="text-align: center;">(135)</p>	<p>000</p> <p>100</p> <p>110</p> <p>111</p>	<p>(135)</p> <p>(1235)</p> <p>(12345)</p> <p>(123456)</p>	<p>$\{(1^3), (2^3), 000\}$</p> <p>$\{(1^3), (2^3), 100\}$</p> <p>$\{(1^3), (2^3), 110\}$</p> <p>$\{(1^3), (2^3), 111\}$</p>
	 <p style="text-align: center;">(13)(45)</p>	<p>000</p> <p>100</p> <p>010</p> <p>110</p> <p>101</p> <p>111</p>	<p>(13)(45)</p> <p>(123)(45)</p> <p>(1354)</p> <p>(12354)</p> <p>(123)(456)</p> <p>(123564)</p>	<p>$\{(0,2^2), (2^2,3), 000\}$</p> <p>$\{(0,2^2), (2^2,3), 100\}$</p> <p>$\{(0,2^2), (2^2,3), 010\}$</p> <p>$\{(0,2^2), (2^2,3), 110\}$</p> <p>$\{(0,2^2), (2^2,3), 101\}$</p> <p>$\{(0,2^2), (2^2,3), 111\}$</p>
	 <p style="text-align: center;">(236)(15)</p>	<p>000</p> <p>100</p> <p>010</p> <p>110</p>	<p>(236)(15)</p> <p>(13625)</p> <p>(2346)(15)</p> <p>(134625)</p>	<p>$\{(1^2,3), (2^2,3), 000\}$</p> <p>$\{(1^2,3), (2^2,3), 100\}$</p> <p>$\{(1^2,3), (2^2,3), 010\}$</p> <p>$\{(1^2,3), (2^2,3), 110\}$</p>

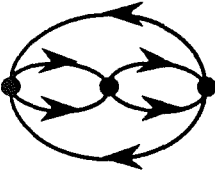
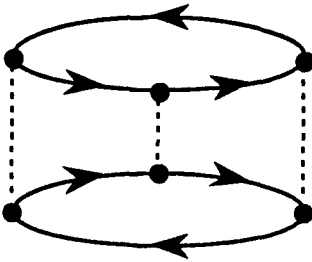
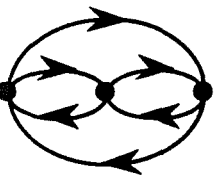
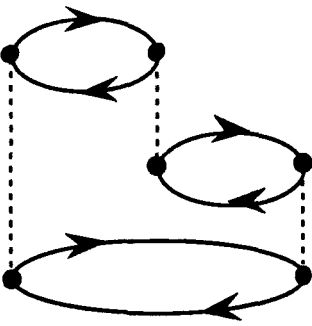
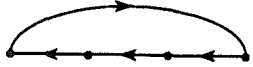
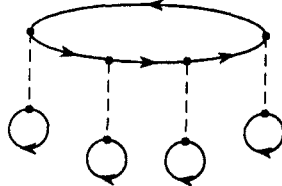

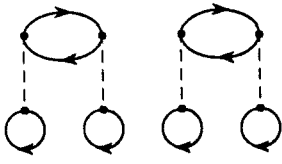
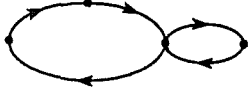
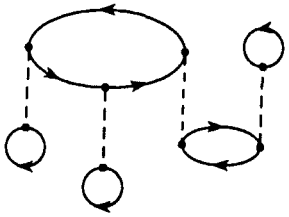
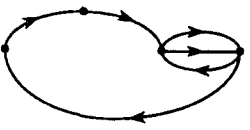
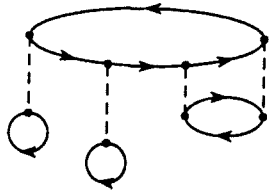
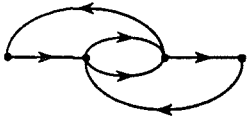
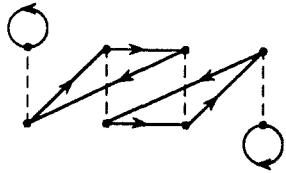
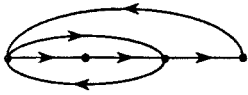
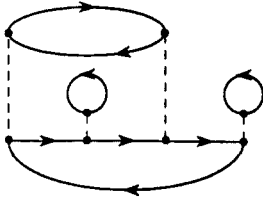

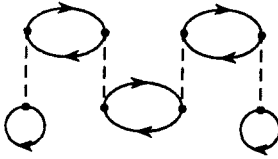
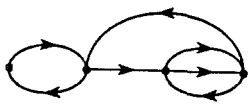
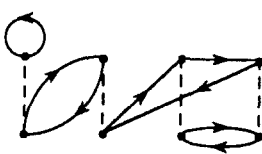
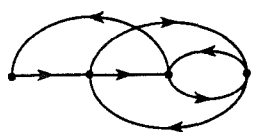
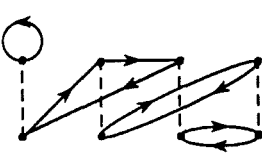
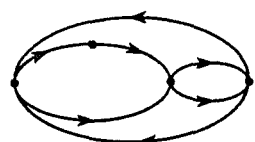
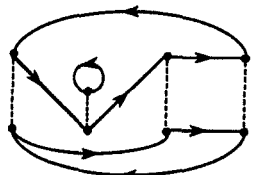
	 <p>(153)(264)</p>	<p>000</p> <p>111</p>	<p>(153)(264)</p> <p>(163254)</p>	<p>{ (2³), (2³), 000 }</p> <p>{ (2³), (2³), 111 }</p>
	 <p>(13)(26)(45)</p>	<p>000</p> <p>100</p> <p>110</p> <p>111</p>	<p>(13)(26)(45)</p> <p>(1623)(45)</p> <p>(162354)</p> <p>(164)(235)</p>	<p>{ (2³), (3³), 000 }</p> <p>{ (2³), (3³), 100 }</p> <p>{ (2³), (3³), 110 }</p> <p>{ (2³), (3³), 111 }</p>


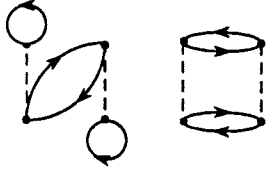


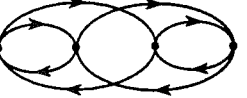
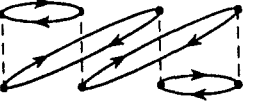
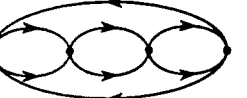
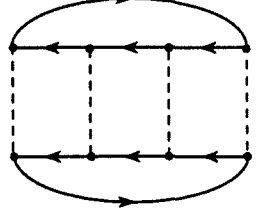
Tabla 4.3.- Factores de interacción para el cuarto momento centrado.

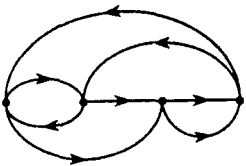
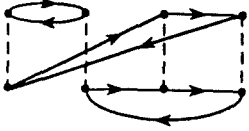
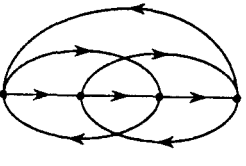
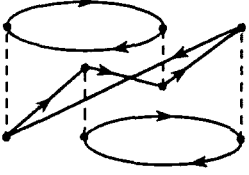
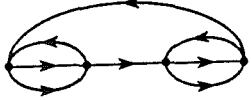

Diag. de Hugenholtz	Diag. G.de ref. y \hat{P} asociada	Nº bin.	$\hat{Q} = \hat{P} \hat{R}$	Etiqueta
	 <p style="text-align: center;">(1864)</p>	<p>0000</p> <p>1000</p> <p>1100</p> <p>1010</p> <p>1110</p> <p>1111</p>	<p>(1864)</p> <p>(12864)</p> <p>(128643)</p> <p>(128654)</p> <p>(1286543)</p> <p>(12876543)</p>	<p>{ (0²,1²), (2⁴), 0000}</p> <p>{ (0²,1²), (2⁴), 1000}</p> <p>{{ (0²,1²), (2⁴), 1100}</p> <p>{ (0²,1²), (2⁴), 1010}</p> <p>{ (0²,1²), (2⁴), 1110}</p> <p>{ (0²,1²), (2⁴), 1111}</p>
	 <p style="text-align: center;">(13)(58)</p>	<p>0000</p> <p>1000</p> <p>1100</p> <p>1010</p> <p>1110</p> <p>1111</p>	<p>(13)(58)</p> <p>((123)(58)</p> <p>(1234)(58)</p> <p>(123)(568)</p> <p>(1234)(568)</p> <p>(1234)(5687)</p>	<p>{ (0⁴,2²), (2⁴), 0000}</p> <p>{ (0⁴,2²), (2⁴), 1000}</p> <p>{ (0⁴,2²), (2⁴), 1100}</p> <p>{ (0⁴,2²), (2⁴), 1010}</p> <p>{ (0⁴,2²), (2⁴), 1110}</p> <p>{ (0⁴,2²), (2⁴), 1111}</p>

	 <p>(153)(68)</p>	0000 1000 0010 0001 1100 1010 1001 0011 1110 1101 1011 1111	(153)(68) (1253)(68) (15863) (153)(687) (12534)(68) (125863) (1253)(687) (158763) (1258634) (12534)(687) (1258763) (12587634)	$\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 0000\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 1000\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 0010\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 0001\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 1100\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 1010\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 1001\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 0011\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 1110\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 1101\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 1011\}$ $\{(0^2, 1^3, 2), (2^3, 3), 0000\}$
	 <p>(2763)(58)</p>	0000 1000 0010 1010 1110 1111	(2763)(58) (17632)(58) (276853) (1768532) (17685342) (175342)(68)	$\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 0000\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 1000\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 0010\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 1010\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 1110\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 1111\}$
	 <p>(2763)(58)</p>	0000 1000 0100 1100 1101 1111	(2763)(58) (1532)(476) (253764) (1537642) (15378642) (1542)(3786)	$\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 0000\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 1000\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 0100\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 1100\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 1101\}$ $\{(0^2, 1^3, 3), (2^3, 3), 1111\}$

	 <p style="text-align: center;">(2853)(16)</p>	0000	(2853)(16)	$\{(0,14,2),(2^2,3^2),0000\}$
		1000	(185326)	$\{(0,14,2),(2^2,3^2),0000\}$
		0100	(28534)(16)	$\{(0,14,2),(2^2,3^2),0000\}$
		1100	(1853426)	$\{(0,14,2),(2^2,3^2),0000\}$
		1010	(185)(263)	$\{(0,14,2),(2^2,3^2),0000\}$
		0101	(287534)(16)	$\{(0,14,2),(2^2,3^2),0000\}$
		1110	(2634)(185)	$\{(0,14,2),(2^2,3^2),0000\}$
		1101	(18753426)	$\{(0,14,2),(2^2,3^2),0000\}$
		1111	(1875)(2634)	$\{(0,14,2),(2^2,3^2),0000\}$
	 <p style="text-align: center;">(23)(45)(76)</p>	0000	(23)(45)(76)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),0000\}$
		1000	(132)(45)(76)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),1000\}$
		0100	(2354)(67)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),0100\}$
		1100	(13542)(67)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),1100\}$
		1010	(4576)(132)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),1010\}$
		1001	(132)(678)(45)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),1001\}$
		0110	(235764)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),0110\}$
		1110	(1357642)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),1110\}$
		1101	(13542)(678)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),1101\}$
1111	(13578642)	$\{(0^3,2^3),(2^2,3^2),1111\}$		

	 <p>(475)(23)(68)</p>	0000 1000 0100 0010 1010 0110 1110 1111	(475)(23)(68) (132)(475)(68) (23754)(68) (47586)(23) (47586)(132) (2375864) (13758642) (137642)(58)	$\{(0^2, 1^2, 2, 3), (2^2, 3^2), 0000\}$ $\{(0^2, 1^2, 2, 3), (2^2, 3^2), 1000\}$ $\{(0^2, 1^2, 2, 3), (2^2, 3^2), 0100\}$ $\{(0^2, 1^2, 2, 3), (2^2, 3^2), 0010\}$ $\{(0^2, 1^2, 2, 3), (2^2, 3^2), 1010\}$ $\{(0^2, 1^2, 2, 3), (2^2, 3^2), 0110\}$ $\{(0^2, 1^2, 2, 3), (2^2, 3^2), 1110\}$ $\{(0^2, 1^2, 2, 3), (2^2, 3^2), 1111\}$
	 <p>(253)(47)(68)</p>	0000 1000 0100 0001 1100 1001 0110 0101 1110 1101 0111 1111	(253)(47)(68) (1532)(47)(68) (25374)(68) (4768)(253) (153742)(68) (1532)(4768) (2586374) (2537684) (15863742) (15376842) (2584)(376) (15842)(376)	$\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 0000\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 1000\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 0100\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 0001\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 1100\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 1001\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 0110\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 0101\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 1110\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 1101\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 0111\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2, 3^3), 1111\}$
	 <p>(1754)(286)</p>	0000 1000 0100 1111	(1754)(286) (1862754) (17543)(286) (18527643)	$\{(0, 1^3, 2^2), (2^3, 3), 0000\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2^3, 3), 1000\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2^3, 3), 0100\}$ $\{(0, 1^3, 2^2), (2^3, 3), 1111\}$

	 <p>(23)(57)(68)</p>	0000 1000 0010 1010 1110 1111	(23)(57)(68) (132)(57)(68) (5867)(23) (5867)(132) (1342)(5867) (1342)(58)(67)	$\{(0^4, 2, 4), (2^4), 0000\}$ $\{(0^4, 2, 4), (2^4), 1000\}$ $\{(0^4, 2, 4), (2^4), 0010\}$ $\{(0^4, 2, 4), (2^4), 1010\}$ $\{(0^4, 2, 4), (2^4), 1110\}$ $\{(0^4, 2, 4), (2^4), 1111\}$
	 <p>(13)(24)(57)(68)</p>	0000 1000 1010	(13)(24)(57)(68) (1423)(57)(68) (1423)(5867)	$\{(0^4, 4^2), (2^4), 0000\}$ $\{(0^4, 4^2), (2^4), 1000\}$ $\{(0^4, 4^2), (2^4), 1010\}$
	 <p>(13)(25)(47)(68)</p>	0000 1000 1100 1001 1110 1111	(13)(25)(47)(68) (1523)(47)(68) (152374)(68) (1523)(4768) (15862374) (1584)(2376)	$\{(0^2, 2^4), (3^4), 0000\}$ $\{(0^2, 2^4), (3^4), 1000\}$ $\{(0^2, 2^4), (3^4), 1100\}$ $\{(0^2, 2^4), (3^4), 1001\}$ $\{(0^2, 2^4), (3^4), 1110\}$ $\{(0^2, 2^4), (3^4), 1111\}$
	 <p>(1753)(2864)</p>	0000 1111	(1753)(2864) (18642753)	$\{(0^2, 2^4), (2^4), 0000\}$ $\{(0^2, 2^4), (2^4), 1111\}$

	 <p>(275)(486)(13)</p>	<p>0000 1000 0010 1100 1010 1110</p>	<p>(275)(486)(13) (17523)(486) (275486)(13) (17523864) (17548623) (1754)(2386)</p>	<p>{{(1⁴,2²),(2,3³),0000} {{(1⁴,2²),(2,3³),1000} {{(1⁴,2²),(2,3³),0010} {{(1⁴,2²),(2,3³),1100} {{(1⁴,2²),(2,3³),1010} {{(1⁴,2²),(2,3³),1110}</p>
	 <p>(2763)(15)(48)</p>	<p>0000 1000 1100 0101 1110 1111</p>	<p>(2763)(15)(48) (176325)(48) (17638425) (274)(386)(15) (25384)(176) (17425386)</p>	<p>{{(1⁴,2²),(3⁴),0000} {{(1⁴,2²),(3⁴),1000} {{(1⁴,2²),(3⁴),1100} {{(1⁴,2²),(3⁴),0101} {{(1⁴,2²),(3⁴),1110} {{(1⁴,2²),(3⁴),1111}</p>
	 <p>(2754)(13)(68)</p>	<p>0000 1000 1010</p>	<p>(2754)(13)(68) (175423)(68) (17586423)</p>	<p>{{(0²,12,3²),(2²,3²),0000} {{(0²,12,3²),(2²,3²),1000} {{(0²,12,3²),(2²,3²),1010}</p>

4.3.-FACTORES DE INTERACCION S_2 -ADAPTADAS.

4.3.1.- $\text{Tr}(H^n)$ expresada en términos de cantidades S_2 -adaptadas

En el capítulo 1 hemos visto cómo el Hamiltoniano puede ser escrito en la forma, ecuación (1.57),

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ijkl}^K \{ij|kl\} \mathbf{E}_{ji}^{ik}$$

donde $\{ij|kl\}$ son las integrales bielectrónicas generalizadas, ecuación (1.56), y \mathbf{E}_{ji}^{ik} son los operadores de densidad reducidos de segundo orden, ecuación (1.32).

De manera alternativa, el Hamiltoniano puede ser expresado en términos de cantidades adaptadas al grupo S_2 de permutaciones de dos partículas:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ijkl}^K ([^+]R_{ji}^{ik} [^+]E_{ji}^{ik} + [^-]R_{ji}^{ik} [^-]E_{ji}^{ik}), \quad (4.10)$$

donde,

$$[^{\pm}]R_{ji}^{ik} = \frac{1}{2} (\{ij|kl\} \pm \{il|kj\}) \quad (4.11)$$

$$[^{\pm}]E_{ji}^{ik} = \frac{1}{2} (\mathbf{E}_{ji}^{ik} \pm \mathbf{E}_{ji}^{ki}). \quad (4.12)$$

(La equivalencia entre las ecuaciones (1.57) y (4.10) resulta inmediata por sustitución de las ecuaciones (4.11) y (4.12) en la ecuación (4.10)).

Las integrales y operadores de densidad S_2 -adaptados $[+]/[-]$ (ecuaciones (4.11) y (4.12) respectivamente) son simétricos/antisimétricos con respecto a la permutación de índices de una misma fila. Estas propiedades de simetría vienen reflejadas en las ecuaciones siguientes:

$$\begin{aligned} [^{\pm}]R_{ji}^{ik} &= \pm [^{\pm}]R_{ji}^{ki} = \pm [^{\pm}]R_{ij}^{ik} = [^{\pm}]R_{ij}^{ki}, \\ [^{\pm}]E_{ji}^{ik} &= \pm [^{\pm}]E_{ji}^{ki} = \pm [^{\pm}]E_{ij}^{ik} = [^{\pm}]E_{ij}^{ki}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

La justificación de las ecuaciones anteriores es inmediata a partir de las simetrías siguientes que presentan las integrales bielectrónicas y los operadores de densidad: $\{i j | k l\} = \{k l | i j\}$ y $E_{j l}^{i k} = E_{i j}^{k l}$.

Por otra parte, puesto que el operador $h(1,2)$ es hermítico, $\{i j | k l\} = \{j i | l k\}$ -ver ecuación (2.1)- y, como consecuencia, :

$${}^{[\pm]}R_{j l}^{i k} = {}^{[\pm]}R_{i k}^{j l}, \quad (4.14)$$

Por el contrario, como los operadores $E_{j l}^{i k}$ son, en general, no hermíticos, no existe para ${}^{[\pm]}E_{j l}^{i k}$ una simetría semejante a la reflejada en la ecuación (4.14). Es decir:

$${}^{[\pm]}E_{j l}^{i k} = \left({}^{[\pm]}E_{i k}^{j l} \right)^+ \neq {}^{[\pm]}E_{i k}^{j l}.$$

Expresando el Hamiltoniano en función de cantidades S_2 -adaptadas, ecuación (4.10), la n -ésima potencia de H resulta:

$$H^n = \frac{1}{2^n} \sum_{\{i\}}^K \sum_{\{j\}}^K \sum_{\{k\}}^K \sum_{\{l\}}^K \sum_s 2^n {}^{[s]}R_{j_1 l_1, j_2 l_2, \dots, j_n l_n}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n} {}^{[s]}E_{j_1 l_1, j_2 l_2, \dots, j_n l_n}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n}. \quad (4.15)$$

donde $[s]$ es una secuencia de símbolos $+$ ó $-$ y el sumatorio se extiende a las 2^n secuencias posibles (por ejemplo, $[s] = ++, +-, -+, --$ en el caso de $n = 2$),

$${}^{[s]}R_{j_1 l_1, j_2 l_2, \dots, j_n l_n}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n} = {}^{[s_1]}R_{j_1 l_1}^{i_1 k_1} {}^{[s_2]}R_{j_2 l_2}^{i_2 k_2} \dots {}^{[s_n]}R_{j_n l_n}^{i_n k_n} \quad (4.16)$$

$${}^{[s]}E_{j_1 l_1, j_2 l_2, \dots, j_n l_n}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n} = {}^{[s_1]}E_{j_1 l_1}^{i_1 k_1} {}^{[s_2]}E_{j_2 l_2}^{i_2 k_2} \dots {}^{[s_n]}E_{j_n l_n}^{i_n k_n} \quad (4.17)$$

siendo s_i ($i = 1, 2, \dots, n$) una etiqueta $+$ ó $-$.

Al igual que ocurre en los productos de 2-RDOs no adaptados, un elemento perteneciente a la diagonal de la representación matricial de cualquier producto de operadores de densidad S_2 -adaptados, resulta igual a cero, a no ser que el conjunto global de aniquiladores coincida con el de creadores. Por tanto, de acuerdo con la ecuación (4.5), podemos escribir el valor esperado de H^n en términos de magnitudes S_2 -adaptadas, como:

$$\langle\langle H^n \rangle\rangle_{Av} = \frac{1}{2^n} \sum_s \sum_{\{i\}} \sum_{\{k\}} \sum_{\hat{P} \in S_{2n}}^{2n!} \left\langle \left[{}^{[s]}R_{\hat{P}}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n} \right] \right\rangle \left\langle \left[{}^{[s]}E_{\hat{P}}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n} \right] \right\rangle_{Av} \quad (4.18)$$

Por tanto la traza de H^n en términos de magnitudes S_2 -adaptadas, vendrá dada por:

$$\langle\langle H^n \rangle\rangle = \frac{1}{2^n} \sum_s \sum_{\hat{P} \in S_{2n}}^{2n!} \left\langle \left\langle \left[{}^{[s]}R_{\hat{P}}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n} \right] \right\rangle \right\rangle \left\langle \left\langle \left[{}^{[s]}E_{\hat{P}}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n} \right] \right\rangle \right\rangle \quad (4.19)$$

donde hemos definido:

$$\left\langle \left\langle \left[{}^{[s]}R_{\hat{P}}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n} \right] \right\rangle \right\rangle = \sum_{\{i\}} \sum_{\{k\}} \left\langle \left[{}^{[s]}R_{\hat{P}}^{i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n} \right] \right\rangle$$

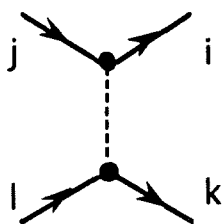
Nótese finalmente que los factores de interacción y coeficientes de propagación S_2 -adaptados son, respectivamente, combinaciones lineales de factores de interacción y coeficientes de propagación no adaptados.

4.3.2.-Clasificación de los factores de interacción S_2 -adaptadas

En el apartado anterior hemos definido una integral bielectrónica generalizada S_2 -adaptada como (ver ecuación (4.11)):

$$R_{ji}^{[\pm]k} = \frac{1}{2} (\{ij|kl\} \pm \{il|kj\}) = \frac{1}{2} (e \pm \hat{P}_{ji}) \{ij|kl\}.$$

Si dibujamos un vértice de Hugenholtz representativo de la integral bielectrónica generalizada $\{ij|kl\}$,



podemos observar que el efecto de \hat{P}_{ji} se traduce en un intercambio de flechas entrantes de un vértice. Por tanto, en el caso de un factor de interacción (es decir, de un producto de integrales representado por un diagrama sin líneas externas), este tipo de permutaciones que adaptan vértices (o integrales) no alteran el diagrama de Hugenholtz asociado con el factor de interacción. En otras palabras, el conjunto de factores de interacción asociados a un diagrama de Hugenholtz dado es cerrado bajo las permutaciones $\{e, (2i - 1, 2i), i = 1, 2, \dots, n, \text{ y sus productos}\}$; que son las que deben ser utilizadas para simetrizar/antisimetrizar vértices (integrales). Por consiguiente, los diagramas de Hugenholtz constituirán una primera etiqueta para clasificar los factores de interacción S_2 -adaptados.

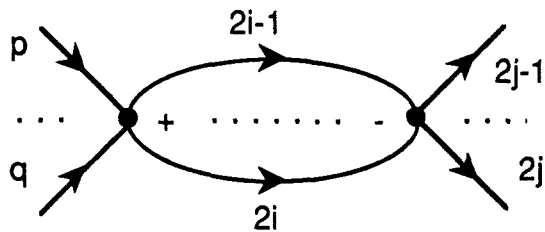
Con objeto de especificar completamente los factores de interacción escritos en términos de vértices (integrales) S_2 -adaptadas, utilizamos una secuencia de símbolos +/- (vértice simétrico/antisimétrico) en lugar de 0/1 (vértice no-permutado/permutado cuando consideramos factores de interacción no adaptados).

Puesto que el producto de integrales S_2 -adaptadas es también conmutativo, podemos utilizar las mismas simetrías y equivalencia que hemos considerado entre los números binarios asociados a vértices no-adaptados en el caso de vértices S_2 -adaptados (teniendo en cuenta que debemos cambiar 0/1 por +/-).

Cuando en un diagrama de Hugenholtz con vértices no adaptados aparecen dos vértices unidos por dos líneas igualmente orientadas resulta de ello las simetrías:

...1...1... \equiv ... 0 ... 0 ... y ...1...0... \equiv ... 0 ... 1 ... En el caso de vértices S_2 -adaptados estas se traducen en ...+...-... \equiv ... - ... + ... \equiv 0, es decir, ambos vértices deben ser del mismo tipo de simetría (++ ó --).

Para demostrar la anterior equivalencia consideramos los dos vértices v_i y v_j integrantes de un determinado diagrama de Hugenholtz de n vértices:



EL producto de integrales S_2 -adaptadas asociado será:

$$\mathbb{R} = \dots [+] R_{p\ q}^{2i-1\ 2i} \dots [-] R_{2i-1\ 2i}^{2j-1\ 2j} \dots$$

Puesto que el producto de integrales S_2 -adaptadas es conmutativo, el anterior producto puede escribirse en la forma:

$$\mathbb{R} = [+] R_{p\ q}^{2i-1\ 2i} [-] R_{2i-1\ 2i}^{2j-1\ 2j} \dots = [+] R_{p\ q}^{2i-1\ 2i} [-] R_{2i-1\ 2i}^{2j-1\ 2j} X \tag{4.20}$$

donde X representa el producto de las $n-2$ restantes integrales bielectrónicas S_2 -adaptadas.

Teniendo en cuenta la ecuación 4.11, podemos reescribir 4.20 como,

$$\mathbb{R} = \frac{1}{4} (e + \hat{P}_{p\ q}) \{2i-1\ p \mid 2i\ q\} (e - \hat{P}_{2i-1\ 2i}) \{2j-1\ 2i-1 \mid 2j\ 2i\} X$$

Una vez desarrollada la expresión y aplicadas las permutaciones obtenemos:

$$\mathbb{R} = \frac{1}{4} X (\{2i-1\ p \mid 2i\ q\} \{2j-1\ 2i-1 \mid 2j\ 2i\} + \{2i-1\ q \mid 2i\ p\} \{2j-1\ 2i-1 \mid 2j\ 2i\} - \{2i-1\ p \mid 2i\ q\} \{2j-1\ 2i \mid 2j\ 2i-1\} - \{2i-1\ q \mid 2i\ p\} \{2j-1\ 2i \mid 2j\ 2i-1\})$$

Si reetiquetamos en la forma $(2i - 1) \Leftrightarrow 2i$, y tenemos en cuenta las simetría de las integrales: $\{a\ b \mid c\ d\} = \{c\ d \mid a\ b\}$, vemos que \mathbb{R} resulta ser idénticamente nulo.


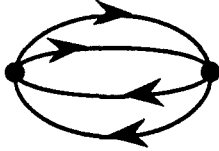
En definitiva, vemos que el mismo tipo de etiquetaje utilizado en la sección 4.2 para los factores de interacción no adaptados, puede ser utilizado (sin más que cambiar 0/1 por +/-) para factores de interacción S_2 -adaptados.

Un factor de interacción S_2 -adaptado $\left\langle \left\{ \begin{matrix} [s] \\ R \\ \hat{P} \end{matrix} \begin{matrix} i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n \\ [i_1 k_1, i_2 k_2, \dots, i_n k_n] \end{matrix} \right\} \right\rangle$, vendrá

inequívocamente caracterizado por un diagrama de Hugenholtz y una secuencia [s] de símbolos +/- indicando qué vértices del diagrama han sido simetrizados/antisimetrizados. Ahora bien, para que el conjunto de secuencias [s] asociadas a un determinado diagrama de Hugenholtz no sea ambiguo hemos de tomar un diagrama de Goldstone compatible con él como referencia (o equivalentemente la permutación que representa dicho diagrama de Goldstone). Al igual que hicimos en la sección anterior, tomaremos como referencia el diagrama de Goldstone que tenga el máximo número posible de ciclos (que vendrá representado por la permutación que siendo compatible con el diagrama de Hugenholtz asociado, presente un número de ciclos máximo).

A continuación presentamos los resultados de la clasificación de los factores de interacción S_2 -adaptados correspondientes al segundo, tercero y cuarto momento centrado.

Tabla 4.4. - Factores de interacción S_2 -adaptados para el segundo momento centrado.

Diagrama de Hugenholtz	Permutación \hat{P} de referencia	Secuencia [s]
 <p>1</p>	(13)	<p>(++)</p> <p>(+-) \equiv (-+)</p> <p>(--)</p>
 <p>2</p>	(13)(24)	<p>(++)</p> <p>(--)</p> <p>{ (+-) \equiv (-+) \equiv 0 }</p>

A título de ejemplo, evaluaremos algunos de los cinco factores de interacción S_2 -adaptados no nulos del segundo momento centrado. Para ello nos vamos a la Tabla 4.4 y llamamos D_1 y D_2 a los diagramas de Hugenholtz allí presentados. Consideremos en primer lugar el factor de interacción

$$\{D_1, (++) , (13)(24)\} \Rightarrow \left\langle \left\langle [^{++}]R_{(13)(24)}^{ik, ac} [i k, ac] \right\rangle \right\rangle = 2 (\langle \{(13)(24)\} \rangle + \langle \{(1324)\} \rangle)$$

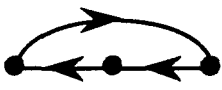

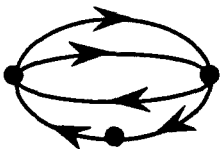
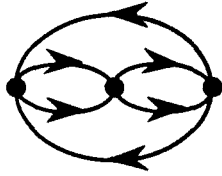
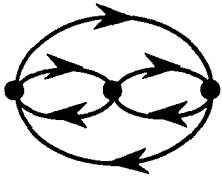
$$= \frac{1}{2} \sum_{ikac} (\{i a | k c\}^2 + \{i a | k c\} \{a k | c i\})$$

$$\{D_1, (--), (13)(24)\} \Rightarrow \left\langle \left\langle [^{--}]R_{(13)(24)}^{ik, ac} [i k, ac] \right\rangle \right\rangle = 2 (\langle \{(13)(24)\} \rangle - \langle \{(1324)\} \rangle)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ikac} (\{i a | k c\}^2 - \{i a | k c\} \{a k | c i\})$$

$$\begin{aligned}
\{D_2, (+-), (13)\} &\Rightarrow \left\langle \left\{ R_{(13)}^{[+ -] i k, a c} [i k, a c] \right\} \right\rangle = \langle \{(13)\} \rangle + 0 \langle \{(134)\} \rangle - \langle \{(1234)\} \rangle \\
&= \frac{1}{4} \sum_{i k a c} (\{i a | k k\} \{a i | c c\} - \{i k | k a\} \{a c | c i\}) \\
&= \frac{1}{4} (\text{Tr} J^2 - \text{Tr} K^2).
\end{aligned}$$

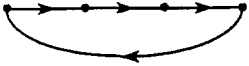

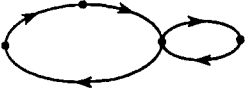
Tabla 4.5.- Factores de interacción S_2 -adaptados para el tercer momento centrado.

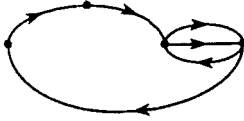
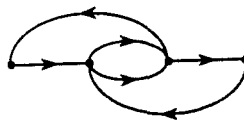
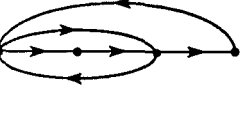
Diagrama de Hugenholtz	Permutación \hat{P} de referencia	Secuencia [s]
 <p style="text-align: center;">1</p>	(135)	(+++) (++) ≡ (++) ≡ (++) (+-) ≡ (++) ≡ (-+) (---)
 <p style="text-align: center;">2</p>	(13)(45)	(+++) (++) ≡ (++) (++) (-+) ≡ (-+) (++) (---)
 <p style="text-align: center;">3</p>	(236)(15)	(+++) (++) (++) (---) {(++) ≡ (++) ≡ (-+) ≡ (-+ ≡ 0)}
 <p style="text-align: center;">4</p>	(153)(264)	(+++) (---) {(++) ≡ (++) ≡ (++) ≡ (-+) ≡ (-+) ≡ (-+) ≡ 0}
 <p style="text-align: center;">5</p>	(13)(26)(45)	(+++) (++) ≡ (++) ≡ (++) (-+) ≡ (-+) ≡ (-+) (---)


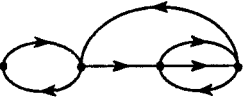
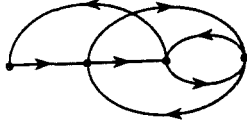
Evaluamos a continuación, alguno de los factores de interacción S_2 -adaptados del tercer momento centrado. Para ello nos vamos a la Tabla 4.5 y llamamos D_1 a D_5 a los cinco diagramas de Hugenholtz que allí aparecen.

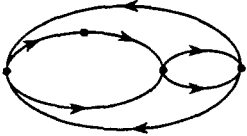



$$\begin{aligned}
 \{D_1, (++), (135)\} &\Rightarrow \left\langle \left\langle [^{++-}] R_{(135)}[ik, ac, pq] \right\rangle \right\rangle \\
 &= \langle \{(135)\} \rangle + \langle \{(1235)\} \rangle - \langle \{(12356)\} \rangle - \langle \{(123456)\} \rangle \\
 &= \frac{1}{8} \sum_{ikacpq} (\{i a | k k\} \{a p | c c\} \{p i | q q\} + \{i k | k a\} \{a p | c c\} \{p i | q q\} \\
 &\quad - \{i k | k a\} \{a p | c c\} \{p q | q i\} - \{i k | k a\} \{a c | c p\} \{p q | q i\}) \\
 &= \text{Tr}J^3 + \text{Tr}KJ^2 - \text{Tr}K^2J - \text{Tr}K^3.
 \end{aligned}$$

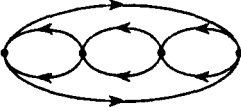
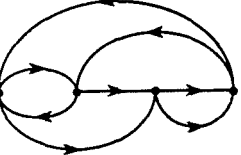
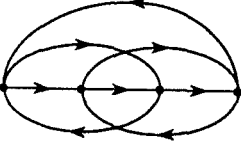
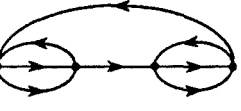
Tabla 4.6.- Factores de interacción S_2 -adaptados para el cuarto momento centrado.

Diagrama de Hugenholtz	Permutación \hat{P} de referencia	Secuencia [s]
 <p style="text-align: center;">1</p>	(1864)	<p style="text-align: center;">(++++)</p> <p>(+++)\equiv(-+++)\equiv(+--+)\equiv(+++)</p> <p>(-++)\equiv(-+-)\equiv(+--+)\equiv(+--)</p> <p style="text-align: center;">(-++)\equiv(+--)</p> <p>(-+-)\equiv(-+-)\equiv(-+-)\equiv(+--)</p> <p style="text-align: center;">(----)</p>
 <p style="text-align: center;">2</p>	(13)(58)	<p style="text-align: center;">(++++)</p> <p>(+++)\equiv(+++) \equiv(+---)\equiv(-+++)</p> <p style="text-align: center;">(-++)\equiv(+--)</p> <p>(-+-)\equiv(-+-)\equiv(+--+)\equiv(+--)</p> <p>(-+-)\equiv(-+-)\equiv(-+-)\equiv(+--)</p> <p style="text-align: center;">(----)</p>
 <p style="text-align: center;">3</p>	(153)(68)	<p style="text-align: center;">(++++)</p> <p>(-+++)\equiv(+---)</p> <p style="text-align: center;">(+--+)</p> <p style="text-align: center;">(++-)</p> <p style="text-align: center;">(-++)</p> <p>(-+-)\equiv(+--+)</p> <p>(-+-)\equiv(+--)</p> <p style="text-align: center;">(+--)</p> <p style="text-align: center;">(-+-)</p> <p style="text-align: center;">(-+-)</p> <p>(-+-)\equiv(+--)</p> <p style="text-align: center;">(----)</p>

 <p style="text-align: center;"><u>4</u></p>	<p>(2763)(58)</p>	<p>(++++) (-+++)\equiv(++++) (---+) (+---) (-++)\equiv(+--) (----) {(+++)\equiv(++--)\equiv(-++)\equiv(---)\equiv (++)\equiv(+-)\equiv(-+)\equiv(--)\equiv0}</p>
 <p style="text-align: center;"><u>5</u></p>	<p>(476)(253)</p>	<p>(++++) (-+++)\equiv(++--) (---+) (+---) (-++)\equiv(+--) (----) {(+++)\equiv(++--)\equiv(-++)\equiv(---)\equiv (++)\equiv(+-)\equiv(-+)\equiv(--)\equiv0}</p>
 <p style="text-align: center;"><u>6</u></p>	<p>(2853)(16)</p>	<p>(++++) (-+++)\equiv(++++) (+---)\equiv(++--) (-++)\equiv(-+-)\equiv(+--)\equiv(+--) (---+) (+---) (-++)\equiv(+--) (-++)\equiv(+--) (----)</p>

 <p style="text-align: center;">7</p>	<p>(23)(45)(67)</p>	<p>(++++) (---+) ≡ (++++) (---+) ≡ (++++) (---+) ≡ (++++) (---+) ≡ (++++) (---+) (---+) (---) ≡ (---) (---) ≡ (---) (---)</p>
 <p style="text-align: center;">8</p>	<p>(475)(23)(68)</p>	<p>(++++) (---+) (---+) (---+) (---+) (---+) (---+) (---+) (---) {(+++) (---) ≡ (---) ≡ (---) ≡ (---) ≡ (---) ≡ (---) ≡ (---) ≡ (---) ≡ 0}</p>
 <p style="text-align: center;">9</p>	<p>(253)(68)(47)</p>	<p>(++++) (---+) (---+) ≡ (---+) (---+) (---) ≡ (---) (---) (---) (---) ≡ (---) (---) (---) ≡ (---) (---) (---)</p>

 <p style="text-align: center;"><u>10</u></p>	<p>(1754)(286)</p>	<p style="text-align: center;">(——)</p> <p style="text-align: center;">(+++)</p> <p style="text-align: center;">(+——)</p> <p style="text-align: center;">(——)</p> <p>{(—+++)\equiv(+++)\equiv(+++—)\equiv(—++)\equiv (—++)\equiv(—++)\equiv(+——)\equiv(++)\equiv (++)\equiv(——)\equiv(——)\equiv(+——)\equiv0}</p>
 <p style="text-align: center;"><u>11</u></p>	<p>(23)(57)(68)</p>	<p style="text-align: center;">(++++)</p> <p style="text-align: center;">(—++)\equiv(++—)</p> <p style="text-align: center;">(—++)</p> <p style="text-align: center;">(+——)</p> <p style="text-align: center;">(+——)\equiv(+——)</p> <p style="text-align: center;">(——)</p> <p>{(++++)\equiv(++++)\equiv(—++)\equiv(—++)\equiv (—++)\equiv(++)\equiv(——)\equiv(——)\equiv0}</p>
 <p style="text-align: center;"><u>12</u></p>	<p>(13)(24)(57)(68)</p>	<p style="text-align: center;">(++++)</p> <p style="text-align: center;">(—++)\equiv(++—)</p> <p style="text-align: center;">(——)</p> <p>{(—+++)\equiv(+++)\equiv(+++)\equiv(+++—)\equiv (—++)\equiv(—++)\equiv(+——)\equiv(++)\equiv (——)\equiv(——)\equiv(+——)\equiv(+——)\equiv0}</p>
 <p style="text-align: center;"><u>13</u></p>	<p>(13)(25)(47)(68)</p>	<p style="text-align: center;">(++++)</p> <p style="text-align: center;">(—++)\equiv(+++)\equiv(+——)\equiv(+++)</p> <p style="text-align: center;">(——)\equiv(—++)\equiv(+——)\equiv(++—)</p> <p style="text-align: center;">(++)\equiv(++)</p> <p style="text-align: center;">(——)\equiv(——)\equiv(+——)\equiv(+——)</p> <p style="text-align: center;">(——)</p>

 <p style="text-align: center;"><u>14</u></p>	<p>(1753)(2864)</p>	<p style="text-align: center;">(++++) (----)</p> <p>{(----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ 0}</p>
 <p style="text-align: center;"><u>15</u></p>	<p>(486)(275)(13)</p>	<p style="text-align: center;">(++++) (----) ≡ (----) (----) (----) (----) ≡ (----) (----)</p> <p>{(----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ 0}</p>
 <p style="text-align: center;"><u>16</u></p>	<p>(2763)(15)(48)</p>	<p style="text-align: center;">(++++) (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) (----) ≡ (----) (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) (----)</p>
 <p style="text-align: center;"><u>17</u></p>	<p>(2754)(13)(68)</p>	<p style="text-align: center;">(++++) (----) ≡ (----) (----)</p> <p>{(----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ (----) ≡ 0}</p>

4.4.-OBTENCION DE LOS COEFICIENTES DE PROPAGACION S₂-ADAPTADOS. FORMULAS FINALES S₂-ADAPTADAS.

En la sección 4.3.2 ya hemos visto que los factores de interacción asociados a un determinado diagrama de Hugenholtz, constituyen un conjunto cerrado y estable bajo aquellas operaciones que conducen a simetrizar/antisimetrizar las integrales bielectrónicas generalizadas (vértices en los diagramas representativos). Por consiguiente, el número de factores de interacción S₂-adaptados compatibles con un determinado diagrama de Hugenholtz coincide con el número de factores de interacción no-adaptados asociados con ese mismo diagrama (compárese por ejemplo las Tablas 4.1, 4.2 y 4.3 con las Tablas 4.4, 4.5 y 4.6). Para un diagrama de Hugenholtz dado, cada uno de los factores de interacción S₂-adaptados es una combinación lineal de los factores de interacción no adaptados correspondientes a este mismo diagrama, lo que podemos expresar por medio de la siguiente ecuación:

$$A_r^k = \sum_{i=1}^{p(k)} \tau_{ri}^k \langle \{i\} \rangle^k \tag{4.21}$$

donde A_r^k representa el r-ésimo factor de interacción S₂-adaptado (r=1,2,...p(k)) asociado al diagrama de Hugenholtz k. ⟨{i}⟩^k es el i-ésimo factor de interacción no-adaptado (i= 1,2,...p(k)) compatible con al diagrama de Hugenholtz k. Finalmente, τ_{r,i}^k representan los coeficientes de la expansión lineal.

La ecuación (4.21) constituye, en realidad, un sistema de ecuaciones lineales. En efecto:

$$A_1^k = \sum_{i=1}^{p(k)} \tau_{1i}^k \langle \{i\} \rangle^k \tag{4.22.a}$$

$$A_2^k = \sum_{i=1}^{p(k)} \tau_{2i}^k \langle \{i\} \rangle^k \tag{4.22.b}$$

.....

$$A_{p(k)}^k = \sum_{i=1}^{p(k)} \tau_{p(k)i}^k \langle \{i\} \rangle^k \tag{4.22.c}$$

Este sistema de ecuaciones lineales puede ser escrito en forma matricial:

$$\mathbf{A}^k = \mathbf{I}^k \mathbf{T}^k \quad (4.23)$$

donde \mathbf{A}^k es una matriz fila conteniendo los $p(k)$ factores de interacción S_2 -adaptados correspondientes al diagrama de Hugenholz k , \mathbf{I}^k es la matriz fila que contiene los $p(k)$ factores de interacción no-adaptados compatibles con el diagrama de Hugenholz k , y \mathbf{T}^k es la matriz de dimensión $p(k) \times p(k)$ que contiene todos los coeficientes de expansión de factores de interacción S_2 -adaptados. Esta matriz está organizada de tal forma que la columna r ($1 \leq r \leq p(k)$) proporciona los coeficientes τ_{ri}^k ($i=1, 2, \dots, p(k)$) de A_r^k .

Para cada momento de la distribución espectral, tendremos tantas matrices del tipo (4.23) como diagramas de Hugenholz distintos podamos considerar. Así, por ejemplo, tenemos 2, 5 y 17 diagramas de Hugenholz (y por tanto, expresiones matriciales) para el segundo, tercer y cuarto momento, respectivamente.

Si en la expresión (4.23) despejamos la matriz \mathbf{I}^k tendremos:

$$\mathbf{I}^k = \mathbf{A}^k (\mathbf{T}^k)^{-1} = \mathbf{A}^k \Theta^k \quad (4.24)$$

donde hemos llamado Θ^k a la inversa de \mathbf{T}^k . Esta expresión representa, a su vez, otro sistema de ecuaciones lineales:

$$\langle\langle i \rangle\rangle^k = \sum_{r=1}^{p(k)} \theta_{ri}^k A_r^k \quad (i=1, 2, \dots, p(k)) \quad (4.25)$$

Por otra parte, ya sabemos cómo obtener qué coeficientes acompañan a un determinado factor de interacción no adaptado y con que peso lo hacen (ver sección 3.5). Recuérdese al respecto la ecuación (3.19), que volvemos a reproducir a continuación:

$$\langle\langle H^n \rangle\rangle = \sum_i^G \langle\langle i \rangle\rangle \sum_j^{v_i} C_{ij} \langle\langle i j \rangle\rangle \quad (3.19)$$

Si llamamos,

$$\tilde{\mathcal{P}}_i = \sum_j^{v_i} C_{ij} \langle\langle i j \rangle\rangle \quad (4.26)$$

la expresión (3.19) queda como:

$$\langle\langle H^n \rangle\rangle = \sum_i^G \langle\{i\}\rangle \tilde{\mathcal{P}}_i \quad (4.27)$$

Los coeficientes $\tilde{\mathcal{P}}_i$ para $\text{Tr}(H^3)$ y $\text{Tr}(H^4)$ quedan reflejados en las Tablas 3.1 y 3.2, respectivamente. En el caso de $\text{Tr}(H^2)$, la expresión (4.27) está explícitamente escrita en la sección 3.6.1.

Agrupando los factores de interacción $\langle\{i\}\rangle$ en m grupos disjuntos (uno para cada diagrama de Hugenholtz distinto), la ecuación (4.27) puede ser reescrita como:

$$\langle\langle H^n \rangle\rangle = \sum_k^m \sum_i^{p(k)} \langle\{i\}\rangle^k \tilde{\mathcal{P}}_i^k \quad (4.28)$$

Si llevamos la ecuación (4.25) a la ecuación (4.28), obtenemos,

$$\langle\langle H^n \rangle\rangle = \sum_k^m \sum_{ir}^{p(k)} A_r^k \theta_{ri}^k \tilde{\mathcal{P}}_i^k$$

a partir de la cual, teniendo en cuenta que para el cálculo del n -ésimo momento basta dividir la $\text{Tr}(H^n)$ por la dimensión del espacio, obtenemos finalmente:

$$\mu_n = \sum_k^m \sum_{ir}^{p(k)} A_r^k \theta_{ri}^k \frac{\tilde{\mathcal{P}}_i^k}{D(N,S,K)} = \sum_k^m \sum_{ir}^{p(k)} A_r^k \theta_{ri}^k \mathcal{P}_i^k \quad (4.29)$$

m es el número de diagramas de Hugenholtz distintos asociados al n -ésimo momento (m toma valor 2, 5 y 17 para el segundo, tercer y cuarto momento, respectivamente).

$p(k)$ es el número de factores de interacción S_2 -adaptados (y por lo tanto el número de los no adaptados) compatibles con el diagrama k -ésimo de Hugenholtz.

$D(N,S,K)$ es la dimensión del espacio FCI, y A_r^k ha sido definida anteriormente.

Matricialmente esta ecuación puede reescribirse como

$$\mu_n = \sum_k^m \mathbf{A}^k \Theta^k \mathbf{P}^k = \sum_k^m \mathbf{A}^k \mathbf{B}^k \quad (4.30a)$$

donde
$$\mathbb{B}^k = \Theta^k \mathbb{P}^k \quad (4.30b)$$

es la matriz de los coeficientes de propagación S_2 -adaptados asociados al k -ésimo diagrama de Hugenholtz.

A continuación vamos a aplicar el anterior procedimiento al segundo, tercer y cuarto momento centrado, con objeto de obtener los coeficientes S_2 -adaptados. De las Tablas 4.1, 4.2 y 4.3 obtenemos los factores de interacción no-adaptados compatibles con cada diagrama de Hugenholtz. Los coeficientes $\tilde{\mathcal{P}}_1$ para el tercer y cuarto momento los obtenemos de las Tablas 3.1 y 3.2, respectivamente. Dichos coeficientes para el segundo momento, los extraemos de la expresión de $\text{Tr}(H^2)$ escrita explícitamente en la sección 3.6.1. Finalmente de las Tablas 4.4, 4.5 y 4.6 obtenemos los factores de interacción S_2 -adaptados.

4.4.1.- Segundo momento centrado

Para este segundo momento, vamos a detallar el procedimiento utilizado en la obtención de los coeficientes S_2 -adaptados. En el caso del tercer y cuarto momento únicamente se darán los resultados sin entrar en detalles intermedios.

1) Diagrama de Hugenholtz 1:



Los factores de interacción no-adaptados $\langle \{i\} \rangle^1$ y los correspondientes coeficientes de propagación $\tilde{\mathcal{P}}_i^1$ - definidos en la ecuación (4.26) - vienen tabulados a continuación:

$I_i^1 = \langle \{i\} \rangle^1$	$\tilde{\mathcal{P}}_i^1$
$I_1^1 = \langle \{(13)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_1^1 = 4 \langle \langle 2_1 \rangle \rangle$
$I_2^1 = \langle \{(123)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_2^1 = 8 \langle \langle 3_1 \rangle \rangle$
$I_3^1 = \langle \{(1234)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_3^1 = 4 \langle \langle 4_1 \rangle \rangle$

En la siguiente tabla podemos ver las expresiones de A_r^1 como combinaciones lineales de I_i^1 (ver ecuación (4.21))[†]:

[†] Para obtener estas expansiones de los factores de interacción S_2 -adaptados en función de factores de interacción no-adaptados, hemos confeccionado un programa Mathematica de cálculo simbólico. No obstante, y a título de ejemplo, vamos a hacer un caso a mano. Téngase en cuenta que las secuencias [s] de símbolos +/- están ligadas a una permutación \hat{P} de referencia. Así,

$$\begin{aligned}
 A_1^{1(++)} &= \left\langle \left\{ \begin{matrix} + \\ + \end{matrix} R_{(13)}^{1k,ac} \right\} \right\rangle = \left\langle \left\{ \begin{matrix} + \\ + \end{matrix} R_{ak,ic}^{1k,ac} \right\} \right\rangle = \left\langle \left(\{ia|kk\} + \{ik|ka\} \right) \left(\{ai|cc\} + \{ac|ci\} \right) \right\rangle = \\
 &= \left\langle \{ia|kk\} \{ai|cc\} + \{ia|kk\} \{ac|ci\} + \{ik|ka\} \{ai|cc\} + \{ik|ka\} \{ac|ci\} \right\rangle = \\
 &= \left\langle \left\{ \begin{matrix} ik, ac \\ ak, ic \end{matrix} \right\} \right\rangle + \left\langle \left\{ \begin{matrix} ik, ac \\ ak, ci \end{matrix} \right\} \right\rangle + \left\langle \left\{ \begin{matrix} ik, ac \\ ka, ic \end{matrix} \right\} \right\rangle + \left\langle \left\{ \begin{matrix} ik, ac \\ ka, ci \end{matrix} \right\} \right\rangle = \\
 &= \langle \{(13)\} \rangle + \langle \{(123)\} \rangle + \langle \{(134)\} \rangle + \langle \{(1234)\} \rangle = I_1^1 + 2I_2^1 + I_3^1
 \end{aligned}$$

	l_1^1	l_2^1	l_3^1
$A_1^1 : ++$	1	2	1
$A_2^1 : +-$	1	0	-1
$A_3^1 : --$	1	-2	1

Por tanto, $(A_1^1 \ A_2^1 \ A_3^1) = (l_1^1 \ l_2^1 \ l_3^1) \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$.

Despejando $(l_1^1 \ l_2^1 \ l_3^1)$ de la ecuación anterior obtenemos:

$$(l_1^1 \ l_2^1 \ l_3^1) = (A_1^1 \ A_2^1 \ A_3^1) \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Si ahora multiplicamos ambas partes de esta última igualdad por la matriz columna de coeficientes \mathcal{P}_i^1 †† tendremos:

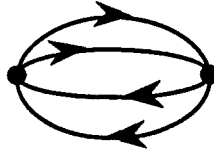
$$(l_1^1 \ l_2^1 \ l_3^1) \begin{pmatrix} \mathcal{P}_1^1 \\ \mathcal{P}_2^1 \\ \mathcal{P}_3^1 \end{pmatrix} = (A_1^1 \ A_2^1 \ A_3^1) \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}_1^1 \\ \mathcal{P}_2^1 \\ \mathcal{P}_3^1 \end{pmatrix}$$

Por tanto, de acuerdo con la ecuación (4.30), los coeficientes adaptados para la contribución del diagrama de Hugenholtz $\underline{1}$ al segundo momento, vendrán dados matricialmente por:

$$B^1 = \begin{pmatrix} B(1,1) \\ B(1,2) \\ B(1,3) \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}_1^1 \\ \mathcal{P}_2^1 \\ \mathcal{P}_3^1 \end{pmatrix}$$

††Téngase en cuenta que según la ecuación (4.29), $\mathcal{P}_i^k = \frac{1}{D(N,S,K)} \tilde{\mathcal{P}}_i^k$.

2) Diagrama de Hugenholtz 2:



Los factores de interacción no-adaptados $\langle \{i\} \rangle^2$ y los correspondientes coeficientes de propagación $\tilde{\mathcal{P}}_i^2$ son:

$I_i^2 = \langle \{i\} \rangle^2$	$\tilde{\mathcal{P}}_i^2$
$I_1^2 = \langle \{(13)(24)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_1^2 = 2 \langle\langle 2_1 2_1 \rangle\rangle$
$I_2^2 = \langle \{(1324)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_2^2 = 2 \langle\langle 4_2 \rangle\rangle$

Expresión de A_r^2 como combinación lineal de I_i^2 :

	I_1^2	I_2^2
$A_1^2 : ++$	2	2
$A_2^2 : --$	2	-2

La tabla anterior puede expresarse matricialmente en la forma

$$\begin{pmatrix} A_1^2 & A_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_1^2 & I_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & -2 \end{pmatrix},$$

de la cual podemos despejar $\begin{pmatrix} I_1^2 & I_2^2 \end{pmatrix}$ y obtener

$$\begin{pmatrix} I_1^2 & I_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1^2 & A_2^2 \end{pmatrix} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Multiplicando ambos miembros de esta última igualdad por la matriz columna de coeficientes \mathcal{P}_i^2 obtenemos la expresión

$$\begin{pmatrix} l_1^2 & l_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}_1^2 \\ \mathcal{P}_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1^2 & A_2^2 \end{pmatrix} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}_1^2 \\ \mathcal{P}_2^2 \end{pmatrix}.$$

De la anterior expresión podemos identificar (de acuerdo con la ecuación (4.30)), la matriz columna de los coeficientes S_2 -adaptados, para la contribución del diagrama de Hugenholtz $\underline{2}$, como

$$\mathbb{B}^2 = \begin{pmatrix} B(2,1) \\ B(2,2) \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}_1^2 \\ \mathcal{P}_2^2 \end{pmatrix}$$

4.4.2.- Tercer momento centrado

En el caso del tercer y cuarto momento centrado, vamos a exponer los resultados de forma mas concisa pero sin perder por ello información. Para lo cual, sintetizaremos los resultados mediante tres tablas para cada uno de los diagramas de Hugenholtz.

— En la primera tabla se representarán los factores de interacción no-adaptados I_i^k y los correspondientes coeficientes de propagación no-adaptados $\tilde{\mathcal{P}}_i^k$ (al igual que hemos hecho para el segundo momento).

— En una segunda tabla, al igual que hemos hecho en el segundo momento, representaremos las expansiones de los factores de interacción S_2 -adaptados, A_r^k , en función de los factores de interacción no-adaptados I_i^k ; es decir, tabularemos la ecuación (4.21).

— Finalmente, en la tercera tabla representaremos los coeficientes S_2 -adaptados $B(k,r)$. Tal y como hemos visto, la matriz de coeficientes S_2 -adaptados es $\mathbb{B}^k = \Theta^k \mathbb{P}^k$, siendo Θ^k la matriz inversa de \mathbb{T}^k . Tal matriz Θ^k siempre puede ponerse en la forma $\frac{1}{2^n} \Theta'^k$, siendo Θ'^k una matriz que solo contiene números enteros sencillos y siendo $n = 2,3,4,..$ para el segundo, tercero, cuarto,.. momento, respectivamente. Por tanto la matriz de los coeficientes S_2 -adaptados podemos escribirla en la forma:

$$\mathbb{B}^k = \Theta'^k \frac{\mathbb{P}^k}{2^n} = \Theta'^k \mathbb{P}'^k.$$

De acuerdo con esta última expresión, en la tercera tabla representaremos los coeficientes S_2 -adaptados $B(k,r)$ como combinaciones lineales de \mathcal{P}'_i^k .

1) Diagrama de Hugenholtz 1:



$l_i^1 = \langle \{i\} \rangle^1$	\tilde{p}_i^1
$l_1^1 = \langle \{(135)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^1 = 8 (\langle\langle 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 3_2 \rangle\rangle)$
$l_2^1 = \langle \{(1235)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^1 = 24 (\langle\langle 4_1 \rangle\rangle + \langle\langle 4_2 \rangle\rangle)$
$l_3^1 = \langle \{(12345)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^1 = 24 (\langle\langle 5_1 \rangle\rangle + \langle\langle 5_2 \rangle\rangle)$
$l_4^1 = \langle \{(123456)\} \rangle$	$\tilde{p}_4^1 = 8 (\langle\langle 6_1 \rangle\rangle + \langle\langle 6_2 \rangle\rangle)$

	l_1^1	l_2^1	l_3^1	l_4^1
$A_1^1 : +++$	1	3	3	1
$A_2^1 : -++$	1	1	-1	-1
$A_3^1 : ---+$	1	-1	-1	1
$A_4^1 : ----$	1	-3	3	-1

	$p'_1{}^1 (*)$	$p'_2{}^1$	$p'_3{}^1$	$p'_4{}^1$
B(1,1)	1	1	1	1
B(1,2)	3	1	-1	-3
B(1,3)	3	-1	-1	3
B(1,4)	1	-1	1	-1

(*) siendo $p'_i{}^k = \frac{1}{2^3 D(N,S,K)} \tilde{p}_i{}^k$

2) Diagrama de Hugenholtz 2:

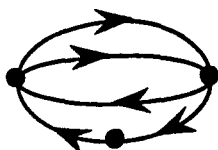


$l_i^2 = \langle \{i\} \rangle^2$	\tilde{p}_i^2
$l_1^2 = \langle \{(13)(45)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^2 = 24 \langle\langle 2_1 2_1 \rangle\rangle$
$l_2^2 = \langle \{(123)(45)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^2 = 48 \langle\langle 3_1 2_1 \rangle\rangle$
$l_3^2 = \langle \{(1354)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^2 = 24 \langle\langle 4_2 \rangle\rangle$
$l_4^2 = \langle \{(12354)\} \rangle$	$\tilde{p}_4^2 = 48 \langle\langle 5_2 \rangle\rangle$
$l_5^2 = \langle \{(123)(456)\} \rangle$	$\tilde{p}_5^2 = 24 \langle\langle 3_1 3_1 \rangle\rangle$
$l_6^2 = \langle \{(123564)\} \rangle$	$\tilde{p}_6^2 = 24 \langle\langle 6_2 \rangle\rangle$

	l_1^2	l_2^2	l_3^2	l_4^2	l_5^2	l_6^2
$A_1^2 : +++$	1	2	1	2	1	1
$A_2^2 : -++$	1	0	1	0	-1	-1
$A_3^2 : +-+$	1	2	-1	-2	1	-1
$A_4^2 : ---+$	1	0	-1	0	-1	1
$A_5^2 : -+-$	1	-2	1	-2	1	1
$A_6^2 : ---$	1	-2	-1	2	1	-1

	ρ_1^2	ρ_2^2	ρ_3^2	ρ_4^2	ρ_5^2	ρ_6^2
B(2,1)	1	1	1	1	1	1
B(2,2)	2	0	2	0	-2	-2
B(2,3)	1	1	-1	-1	1	-1
B(2,4)	2	0	-2	0	-2	2
B(2,5)	1	-1	1	-1	1	1
B(2,6)	1	-1	-1	1	1	-1

3) Diagrama de Hugemholtz 3:

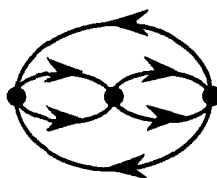


$l_i^3 = \langle \{i\} \rangle^3$	\tilde{p}_i^3
$l_1^3 = \langle \{(236)(15)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^3 = 24 (\langle \langle 3_2 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 3_1 2_1 \rangle \rangle)$
$l_2^3 = \langle \{(13625)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^3 = 24 (\langle \langle 5_3 \rangle \rangle + \langle \langle 5_2 \rangle \rangle)$
$l_3^3 = \langle \{(2346)(15)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^3 = 24 (\langle \langle 4_2 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_1 2_1 \rangle \rangle)$
$l_4^3 = \langle \{(134625)\} \rangle$	$\tilde{p}_4^3 = 24 (\langle \langle 6_3 \rangle \rangle + \langle \langle 6_2 \rangle \rangle)$

	l_1^3	l_2^3	l_3^3	l_4^3
$A_1^3 : +++$	2	2	2	2
$A_2^3 : +-+$	2	2	-2	-2
$A_3^3 : -+-$	2	-2	2	-2
$A_4^3 : ---$	2	-2	-2	2

	\tilde{p}_1^3	\tilde{p}_2^3	\tilde{p}_3^3	\tilde{p}_4^3
B(3,1)	1	1	1	1
B(3,2)	1	1	-1	-1
B(3,3)	1	-1	1	-1
B(3,4)	1	-1	-1	1

4) Diagrama de Hugenholtz 4:

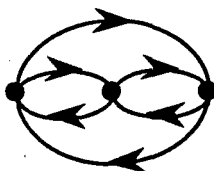


$l_i^4 = \langle \{i\} \rangle^4$	\tilde{p}_i^4
$l_1^4 = \langle \{(153)(264)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^4 = 4 (\langle \langle 3_1 3_1 \rangle \rangle + \langle \langle 3_2 3_2 \rangle \rangle)$
$l_2^4 = \langle \{(163254)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^4 = 4 (\langle \langle 6_2 \rangle \rangle + \langle \langle 6_4 \rangle \rangle)$

	l_1^4	l_2^4
$A_1^4 : +++$	4	4
$A_2^4 : ---$	4	-4

	\tilde{p}'_1^4	\tilde{p}'_2^4
$B(4,1)$	1	1
$B(4,2)$	1	-1

5) Diagrama de Hagemholtz 5:

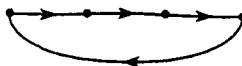


$l_i^5 = \langle \{i\} \rangle^5$	\tilde{p}_i^5
$l_1^5 = \langle \{(13)(26)(45)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^5 = 8 \langle \langle 2_1 2_1 2_1 \rangle \rangle$
$l_2^5 = \langle \{(1623)(45)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^5 = 24 \langle \langle 4_2 2_1 \rangle \rangle$
$l_3^5 = \langle \{(162354)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^5 = 24 \langle \langle 6_3 \rangle \rangle$
$l_4^5 = \langle \{(164)(235)\} \rangle$	$\tilde{p}_4^5 = 8 \langle \langle 3_1 3_2 \rangle \rangle$

	l_1^5	l_2^5	l_3^5	l_4^5
$A_1^5 : +++$	1	3	3	1
$A_2^5 : -++$	1	1	-1	-1
$A_3^5 : ---+$	1	-1	-1	1
$A_4^5 : ----$	1	-3	3	-1

	\tilde{p}'_1^5	\tilde{p}'_2^5	\tilde{p}'_3^5	\tilde{p}'_4^5
B(5,1)	1	1	1	1
B(5,2)	3	1	-1	-3
B(5,3)	3	-1	-1	3
B(5,4)	1	-1	1	-1

4.4.3.- Cuarto momento centrado



1) Diagrama de Hugenholtz $\underline{1}$:

$I_i^1 = \langle \{i\} \rangle^1$	\tilde{P}_i^1
$I_1^1 = \langle \{(1864)\} \rangle$	$\tilde{P}_1^1 = 16 (\langle \langle 4_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_3 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 4_2 \rangle \rangle)$
$I_2^1 = \langle \{(18764)\} \rangle$	$\tilde{P}_2^1 = 64 (\langle \langle 5_1 \rangle \rangle + \langle \langle 5_3 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 5_2 \rangle \rangle)$
$I_3^1 = \langle \{(128643)\} \rangle$	$\tilde{P}_3^1 = 64 (\langle \langle 6_1 \rangle \rangle + \langle \langle 6_3 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 6_2 \rangle \rangle)$
$I_4^1 = \langle \{(128654)\} \rangle$	$\tilde{P}_4^1 = 32 (\langle \langle 6_1 \rangle \rangle + \langle \langle 6_3 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 6_2 \rangle \rangle)$
$I_5^1 = \langle \{(1286543)\} \rangle$	$\tilde{P}_5^1 = 64 (\langle \langle 7_1 \rangle \rangle + \langle \langle 7_3 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 7_2 \rangle \rangle)$
$I_6^1 = \langle \{(12876543)\} \rangle$	$\tilde{P}_6^1 = 16 (\langle \langle 8_1 \rangle \rangle + \langle \langle 8_3 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 8_2 \rangle \rangle)$

	I_1^1	I_2^1	I_3^1	I_4^1	I_5^1	I_6^1
$A_1^1 :++++$	1	4	4	2	4	1
$A_2^1 :+++--$	1	2	0	0	-2	-1
$A_3^1 :---++$	1	0	0	-2	0	1
$A_4^1 :--+++$	1	0	-4	2	0	1
$A_5^1 :----+$	1	-2	0	0	2	-1
$A_6^1 :-----$	1	-4	4	2	-4	1

	\mathcal{P}'_{1*}^1	\mathcal{P}'_2^1	\mathcal{P}'_3^1	\mathcal{P}'_4^1	\mathcal{P}'_5^1	\mathcal{P}'_6^1
B(1,1)	1	1	1	1	1	1
B(1,2)	4	2	0	0	-2	-4
B(1,3)	4	0	0	-4	0	4
B(1,4)	2	0	-2	2	0	2
B(1,5)	4	-2	0	0	2	-4
B(1,6)	1	-1	1	1	-1	1

(*) Siendo $\mathcal{P}'_i^k = \frac{1}{2^4 D(N,S,K)} \tilde{\mathcal{P}}_i^k$

2) Diagrama de Hugenholtz 2:

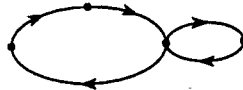


$l_i^2 = \langle \{i\} \rangle^2$	\tilde{p}_i^2
$l_1^2 = \langle \{(13)(58)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^2 = 48 \langle\langle 2_1 2_1 \rangle\rangle$
$l_2^2 = \langle \{(587)(13)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^2 = 192 \langle\langle 3_1 2_1 \rangle\rangle$
$l_3^2 = \langle \{(1234)(58)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^2 = 96 \langle\langle 4_1 2_1 \rangle\rangle$
$l_4^2 = \langle \{(123)(568)\} \rangle$	$\tilde{p}_4^2 = 192 \langle\langle 3_1 3_1 \rangle\rangle$
$l_5^2 = \langle \{(1234)(568)\} \rangle$	$\tilde{p}_5^2 = 192 \langle\langle 4_1 3_1 \rangle\rangle$
$l_6^2 = \langle \{(1234)(5687)\} \rangle$	$\tilde{p}_5^2 = 48 \langle\langle 4_1 4_1 \rangle\rangle$

	l_1^2	l_2^2	l_3^2	l_4^2	l_5^2	l_6^2
$A_1^2 : +++++$	1	4	2	4	4	1
$A_2^2 : ++++-$	1	2	0	0	-2	-1
$A_3^2 : ---++$	1	0	2	-4	0	1
$A_4^2 : -+--+$	1	0	-2	0	0	1
$A_5^2 : ----+$	1	-2	0	0	2	-1
$A_6^2 : -----$	1	-4	2	4	-4	1

	\mathcal{P}'_1^2	\mathcal{P}'_2^2	\mathcal{P}'_3^2	\mathcal{P}'_4^2	\mathcal{P}'_5^2	\mathcal{P}'_6^2
B(2,1)	1	1	1	1	1	1
B(2,2)	4	2	0	0	-2	-4
B(2,3)	2	0	2	-2	0	2
B(2,4)	4	0	-4	0	0	4
B(2,5)	4	-2	0	0	2	-4
B(2,6)	1	-1	1	1	-1	1

3) Diagrama de Hugenholtz 3:

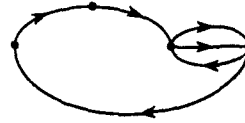


$l_i^3 = \langle \{i\} \rangle^3$	\tilde{p}_i^3
$l_1^3 = \langle \{(153)(68)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^3 = 192 (\langle \langle 3_1 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 3_2 2_1 \rangle \rangle)$
$l_2^3 = \langle \{(1253)(68)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^3 = 384 (\langle \langle 4_1 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_2 2_1 \rangle \rangle)$
$l_3^3 = \langle \{(15863)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^3 = 192 (\langle \langle 5_2 \rangle \rangle + \langle \langle 5_3 \rangle \rangle)$
$l_4^3 = \langle \{(153)(687)\} \rangle$	$\tilde{p}_4^3 = 192 (\langle \langle 3_1 3_1 \rangle \rangle + \langle \langle 3_1 3_2 \rangle \rangle)$
$l_5^3 = \langle \{(12534)(68)\} \rangle$	$\tilde{p}_5^3 = 192 (\langle \langle 5_1 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 5_2 2_1 \rangle \rangle)$
$l_6^3 = \langle \{(125863)\} \rangle$	$\tilde{p}_6^3 = 384 (\langle \langle 6_2 \rangle \rangle + \langle \langle 6_3 \rangle \rangle)$
$l_7^3 = \langle \{(1253)(687)\} \rangle$	$\tilde{p}_7^3 = 384 (\langle \langle 4_1 3_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_2 3_1 \rangle \rangle)$
$l_8^3 = \langle \{(158763)\} \rangle$	$\tilde{p}_8^3 = 192 (\langle \langle 6_2 \rangle \rangle + \langle \langle 6_3 \rangle \rangle)$
$l_9^3 = \langle \{(1258634)\} \rangle$	$\tilde{p}_9^3 = 192 (\langle \langle 7_2 \rangle \rangle + \langle \langle 7_3 \rangle \rangle)$
$l_{10}^3 = \langle \{(12534)(687)\} \rangle$	$\tilde{p}_{10}^3 = 192 (\langle \langle 5_1 3_1 \rangle \rangle + \langle \langle 5_2 3_1 \rangle \rangle)$
$l_{11}^3 = \langle \{(1258763)\} \rangle$	$\tilde{p}_{11}^3 = 384 (\langle \langle 7_2 \rangle \rangle + \langle \langle 7_3 \rangle \rangle)$
$l_{12}^3 = \langle \{(12587634)\} \rangle$	$\tilde{p}_{12}^3 = 192 (\langle \langle 8_2 \rangle \rangle + \langle \langle 8_3 \rangle \rangle)$

	l_1^3	l_2^3	l_3^3	l_4^3	l_5^3	l_6^3	l_7^3	l_8^3	l_9^3	l_{10}^3	l_{11}^3	l_{12}^3
$A_1^3 :++++$	1	2	1	1	1	2	2	1	1	1	2	1
$A_2^3 :----$	1	0	1	1	-1	0	0	1	-1	-1	0	-1
$A_3^3 :+++$	1	2	-1	1	1	-2	2	-1	-1	1	-2	-1
$A_4^3 :+++$	1	2	1	-1	1	2	-2	-1	1	-1	-2	-1
$A_5^3 :---+$	1	-2	1	1	1	-2	-2	1	1	1	-2	1
$A_6^3 :---+$	1	0	-1	1	-1	0	0	-1	1	-1	0	1
$A_7^3 :---$	1	0	1	-1	-1	0	0	-1	-1	1	0	1
$A_8^3 :++-$	1	2	-1	-1	1	-2	-2	1	-1	-1	2	1
$A_9^3 :---+$	1	-2	-1	1	1	2	-2	-1	-1	1	2	-1
$A_{10}^3 :--+$	1	-2	1	-1	1	-2	2	-1	1	-1	2	-1
$A_{11}^3 :--+$	1	0	-1	-1	-1	0	0	1	1	1	0	-1
$A_{12}^3 :----$	1	-2	-1	-1	1	2	2	1	-1	-1	-2	1

	$\rho'_1{}^3$	$\rho'_2{}^3$	$\rho'_3{}^3$	$\rho'_4{}^3$	$\rho'_5{}^3$	$\rho'_6{}^3$	$\rho'_7{}^3$	$\rho'_8{}^3$	$\rho'_9{}^3$	$\rho'_{10}{}^3$	$\rho'_{11}{}^3$	$\rho'_{12}{}^3$
B(3,1)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B(3,2)	2	0	2	2	-2	0	0	2	-2	-2	0	-2
B(3,3)	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1
B(3,4)	1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1
B(3,5)	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	1
B(3,6)	2	0	-2	2	-2	0	0	-2	2	-2	0	2
B(3,7)	2	0	2	-2	-2	0	0	-2	-2	2	0	2
B(3,8)	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
B(3,9)	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	-1
B(3,10)	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
B(3,11)	2	0	-2	-2	-2	0	0	2	2	2	0	-2
B(3,12)	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1

4) Diagrama de Hugenholtz 4:

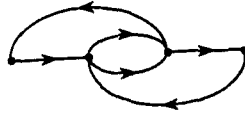


$l_i^4 = \langle \{i\} \rangle^4$	\tilde{p}_i^4
$l_1^4 = \langle \{(2763)(58)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^4 = 64 (\langle\langle 4_1 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 4_3 2_1 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 4_2 2_1 \rangle\rangle)$
$l_2^4 = \langle \{(17632)(58)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^4 = 128 (\langle\langle 5_1 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 5_3 2_1 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 5_2 2_1 \rangle\rangle)$
$l_3^4 = \langle \{(276853)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^4 = 64 (\langle\langle 6_2 \rangle\rangle + \langle\langle 6_4 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 6_3 \rangle\rangle)$
$l_4^4 = \langle \{(1768532)\} \rangle$	$\tilde{p}_4^4 = 128 (\langle\langle 7_2 \rangle\rangle + \langle\langle 7_4 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 7_3 \rangle\rangle)$
$l_5^4 = \langle \{(17685342)\} \rangle$	$\tilde{p}_5^4 = 64 (\langle\langle 8_2 \rangle\rangle + \langle\langle 8_4 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 8_3 \rangle\rangle)$
$l_6^4 = \langle \{(175342)(68)\} \rangle$	$\tilde{p}_6^4 = 64 (\langle\langle 6_1 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 6_3 2_1 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 6_2 2_1 \rangle\rangle)$

	l_1^4	l_2^4	l_3^4	l_4^4	l_5^4	l_6^4
$A_1^4 :++++$	2	4	2	4	2	2
$A_2^4 :---++$	2	0	2	0	-2	-2
$A_3^4 :--++$	2	-4	2	-4	2	2
$A_4^4 :++--$	2	4	-2	-4	-2	2
$A_5^4 :-+--$	2	0	-2	0	2	-2
$A_6^4 :----$	2	-4	-2	4	-2	2

	\mathcal{P}'_1^4	\mathcal{P}'_2^4	\mathcal{P}'_3^4	\mathcal{P}'_4^4	\mathcal{P}'_5^4	\mathcal{P}'_6^4
B(4,1)	1	1	1	1	1	1
B(4,2)	2	0	2	0	-2	-2
B(4,3)	1	-1	1	-1	1	1
B(4,4)	1	1	-1	-1	-1	1
B(4,5)	2	0	-2	0	2	-2
B(4,6)	1	-1	-1	1	-1	1

5) Diagrama de Hugenholtz 5:

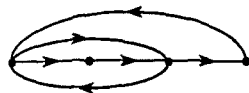


$l_i^5 = \langle \{i\} \rangle^5$	\tilde{p}_i^5
$l_1^5 = \langle \{(253)(476)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^5 = 64 (\langle\langle 3_1 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 3_2 3_2 \rangle\rangle + \langle\langle 3_2 3_1 \rangle\rangle)$
$l_2^5 = \langle \{(1532)(476)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^5 = 64 (2 \langle\langle 4_1 3_1 \rangle\rangle + 2 \langle\langle 4_2 3_2 \rangle\rangle + \langle\langle 4_1 3_2 \rangle\rangle + \langle\langle 4_2 3_1 \rangle\rangle)$
$l_3^5 = \langle \{(253764)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^5 = 64 (\langle\langle 6_2 \rangle\rangle + \langle\langle 6_4 \rangle\rangle + \langle\langle 6_3 \rangle\rangle)$
$l_4^5 = \langle \{(1537642)\} \rangle$	$\tilde{p}_4^5 = 128 (\langle\langle 7_2 \rangle\rangle + \langle\langle 7_4 \rangle\rangle + \langle\langle 7_3 \rangle\rangle)$
$l_5^5 = \langle \{(15378642)\} \rangle$	$\tilde{p}_5^5 = 64 (\langle\langle 8_2 \rangle\rangle + \langle\langle 8_4 \rangle\rangle + \langle\langle 8_3 \rangle\rangle)$
$l_6^5 = \langle \{(1542)(3786)\} \rangle$	$\tilde{p}_6^5 = 64 (\langle\langle 4_1 4_1 \rangle\rangle + \langle\langle 4_2 4_2 \rangle\rangle + \langle\langle 4_2 4_1 \rangle\rangle)$

	l_1^5	l_2^5	l_3^5	l_4^5	l_5^5	l_6^5
$A_1^5 : +++++$	2	4	2	4	2	2
$A_2^5 : -+++$	2	0	2	0	-2	-2
$A_3^5 : -++-$	2	-4	2	-4	2	2
$A_4^5 : +---$	2	4	-2	-4	-2	2
$A_5^5 : ----$	2	0	-2	0	2	-2
$A_6^5 : -----$	2	-4	-2	4	-2	2

	\mathcal{P}'_1^5	\mathcal{P}'_2^5	\mathcal{P}'_3^5	\mathcal{P}'_4^5	\mathcal{P}'_5^5	\mathcal{P}'_6^5
B(5,1)	1	1	1	1	1	1
B(5,2)	2	0	2	0	-2	-2
B(5,3)	1	-1	1	-1	1	1
B(5,4)	1	1	-1	-1	-1	1
B(5,5)	2	0	-2	0	2	-2
B(5,6)	1	-1	-1	1	-1	1

6) Diagrama de Hugenholtz $\underline{6}$:



$I_i^6 = \langle \{i\} \rangle^6$	\tilde{P}_i^6
$I_1^6 = \langle \{ (2853)(16) \} \rangle$	$\tilde{P}_1^6 = 32 (\langle \langle 4_1 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_3 2_1 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 4_2 2_1 \rangle \rangle)$
$I_2^6 = \langle \{ (185326) \} \rangle$	$\tilde{P}_2^6 = 64 (\langle \langle 6_2 \rangle \rangle + \langle \langle 6_4 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 6_3 \rangle \rangle)$
$I_3^6 = \langle \{ (28534)(16) \} \rangle$	$\tilde{P}_3^6 = 64 (\langle \langle 5_1 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 5_3 2_1 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 5_2 2_1 \rangle \rangle)$
$I_4^3 = \langle \{ (1853426) \} \rangle$	$\tilde{P}_4^6 = 128 (\langle \langle 7_2 \rangle \rangle + \langle \langle 7_4 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 7_3 \rangle \rangle)$
$I_5^6 = \langle \{ (185)(263) \} \rangle$	$\tilde{P}_5^6 = 32 (\langle \langle 3_1 3_1 \rangle \rangle + \langle \langle 3_2 3_2 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 3_1 3_2 \rangle \rangle)$
$I_6^6 = \langle \{ (287534)(16) \} \rangle$	$\tilde{P}_6^6 = 32 (\langle \langle 6_1 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 6_3 2_1 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 6_2 2_1 \rangle \rangle)$
$I_7^6 = \langle \{ (2634)(185) \} \rangle$	$\tilde{P}_7^6 = 64 (\langle \langle 4_1 3_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_2 3_2 \rangle \rangle + 2 \langle \langle 4_1 3_2 \rangle \rangle + 2 \langle \langle 4_2 3_1 \rangle \rangle)$
$I_8^6 = \langle \{ (18753426) \} \rangle$	$\tilde{P}_8^6 = 64 (\langle \langle 8_2 \rangle \rangle + \langle \langle 8_4 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 8_3 \rangle \rangle)$
$I_9^6 = \langle \{ (1875)(2634) \} \rangle$	$\tilde{P}_9^6 = 32 (\langle \langle 4_1 4_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_2 4_2 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 4_1 4_2 \rangle \rangle)$

	l_1^6	l_2^6	l_3^6	l_4^6	l_5^6	l_6^6	l_7^6	l_8^6	l_9^6
$A_1^6 :++++$	1	2	2	4	1	1	2	2	1
$A_1^6 :++++$	1	0	2	0	-1	1	-2	0	-1
$A_3^6 :+---$	1	2	0	0	1	-1	0	-2	-1
$A_4^6 :----$	1	0	0	0	-1	-1	0	0	1
$A_5^6 :--++$	1	-2	2	-4	1	1	2	-2	1
$A_6^6 :+--+$	1	2	-2	-4	1	1	-2	2	1
$A_7^6 :----$	1	-2	0	0	1	-1	0	2	-1
$A_8^6 :---+$	1	0	-2	0	-1	1	2	0	-1
$A_9^6 :-----$	1	-2	-2	4	1	1	-2	-2	1

	$p'_1{}^6$	$p'_2{}^6$	$p'_3{}^6$	$p'_4{}^6$	$p'_5{}^6$	$p'_6{}^6$	$p'_7{}^6$	$p'_8{}^6$	$p'_9{}^6$
B(6,1)	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B(6,2)	2	0	2	0	-2	2	-2	0	-2
B(6,3)	2	2	0	0	2	-2	0	-2	-2
B(6,4)	4	0	0	0	-4	-4	0	0	4
B(6,5)	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1
B(6,6)	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1
B(6,7)	2	-2	0	0	2	-2	0	2	-2
B(6,8)	2	0	-2	0	-2	2	2	0	-2
B(6,9)	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1

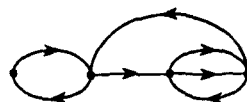
7) Diagrama de Hugenholtz Z: 

$I_i^7 = \langle \{i\} \rangle^7$	\tilde{P}_i^7
$I_1^7 = \langle \{ (23)(45)(67) \} \rangle$	$\tilde{P}_1^7 = 192 \langle \langle 2_1 2_1 2_1 \rangle \rangle$
$I_2^7 = \langle \{ (132)(45)(67) \} \rangle$	$\tilde{P}_2^7 = 384 \langle \langle 3_1 2_1 2_1 \rangle \rangle$
$I_3^7 = \langle \{ (2354)(67) \} \rangle$	$\tilde{P}_3^7 = 384 \langle \langle 4_2 2_1 \rangle \rangle$
$I_4^7 = \langle \{ (13542)(67) \} \rangle$	$\tilde{P}_4^7 = 384 \langle \langle 5_2 2_1 \rangle \rangle$
$I_5^7 = \langle \{ (4576)(132) \} \rangle$	$\tilde{P}_5^7 = 384 \langle \langle 4_2 3_1 \rangle \rangle$
$I_6^7 = \langle \{ (132)(678)(45) \} \rangle$	$\tilde{P}_6^7 = 192 \langle \langle 3_1 3_1 2_1 \rangle \rangle$
$I_7^7 = \langle \{ (235764) \} \rangle$	$\tilde{P}_7^7 = 192 \langle \langle 6_3 \rangle \rangle$
$I_8^7 = \langle \{ (1357642) \} \rangle$	$\tilde{P}_8^7 = 384 \langle \langle 7_3 \rangle \rangle$
$I_9^7 = \langle \{ (13542)(768) \} \rangle$	$\tilde{P}_9^7 = 384 \langle \langle 5_2 3_1 \rangle \rangle$
$I_{10}^7 = \langle \{ (13578642) \} \rangle$	$\tilde{P}_{10}^7 = 192 \langle \langle 8_3 \rangle \rangle$

	l_1^7	l_2^7	l_3^7	l_4^7	l_5^7	l_6^7	l_7^7	l_8^7	l_9^7	l_{10}^7
$A_1^7 :++++$	1	2	2	2	2	1	1	2	2	1
$A_2^7 :--+++$	1	0	2	0	0	-1	1	0	-2	-1
$A_3^7 :+---+$	1	2	0	0	0	1	-1	-2	0	-1
$A_4^7 :---++$	1	0	0	2	-2	-1	-1	0	0	1
$A_5^7 :--+++$	1	0	0	-2	2	-1	-1	0	0	1
$A_6^7 :---+-$	1	-2	2	-2	-2	1	1	-2	2	1
$A_7^7 :+---+$	1	2	-2	-2	-2	1	1	2	-2	1
$A_8^7 :----+$	1	0	-2	0	0	-1	1	0	2	-1
$A_9^7 :---+-$	1	-2	0	0	0	1	-1	2	0	-1
$A_{10}^7 :-----$	1	-2	-2	2	2	1	1	-2	-2	1

	$p'_1{}^7$	$p'_2{}^7$	$p'_3{}^7$	$p'_4{}^7$	$p'_5{}^7$	$p'_6{}^7$	$p'_7{}^7$	$p'_8{}^7$	$p'_9{}^7$	$p'_{10}{}^7$
B(7,1)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B(7,2)	2	0	2	0	0	-2	2	0	-2	-2
B(7,3)	2	2	0	0	0	2	-2	-2	0	-2
B(7,4)	2	0	0	2	-2	-2	-2	0	0	2
B(7,5)	2	0	0	-2	2	-2	-2	0	0	2
B(7,6)	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1
B(7,7)	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1
B(7,8)	2	0	-2	0	0	-2	2	0	2	-2
B(7,9)	2	-2	0	0	0	2	-2	2	0	-2
B(7,10)	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1

8) Diagrama de Hugenholtz \mathcal{Q} :

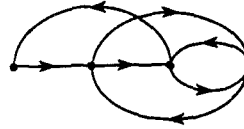


$l_i^8 = \langle \{i\} \rangle^8$	$\tilde{\mathcal{P}}_i^8$
$l_1^8 = \langle \{(475)(23)(68)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_1^8 = 192 (\langle\langle 3_1 2_1 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 3_2 2_1 2_1 \rangle\rangle)$
$l_2^8 = \langle \{(132)(475)(68)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_2^8 = 192 (\langle\langle 3_1 3_1 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 3_2 3_1 2_1 \rangle\rangle)$
$l_3^8 = \langle \{(23754)(68)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_3^8 = 192 (\langle\langle 5_2 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 5_3 2_1 \rangle\rangle)$
$l_4^8 = \langle \{(47586)(23)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_4^8 = 192 (\langle\langle 5_2 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 5_3 2_1 \rangle\rangle)$
$l_5^8 = \langle \{(47586)(132)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_5^8 = 192 (\langle\langle 5_2 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 5_3 3_1 \rangle\rangle)$
$l_6^8 = \langle \{(2375864)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_6^8 = 192 (\langle\langle 7_3 \rangle\rangle + \langle\langle 7_4 \rangle\rangle)$
$l_7^8 = \langle \{(13758642)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_7^8 = 192 (\langle\langle 8_3 \rangle\rangle + \langle\langle 8_4 \rangle\rangle)$
$l_8^8 = \langle \{(137642)(58)\} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_8^8 = 192 (\langle\langle 6_2 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 6_3 2_1 \rangle\rangle)$

	l_1^8	l_2^8	l_3^8	l_4^8	l_5^8	l_6^8	l_7^8	l_8^8
$A_1^8 : +++++$	2	2	2	2	2	2	2	2
$A_2^8 : -++++$	2	-2	2	2	-2	2	-2	-2
$A_3^8 : +-+++$	2	2	-2	2	2	-2	-2	-2
$A_4^8 : ---++$	2	-2	-2	2	-2	-2	2	2
$A_5^8 : ++---$	2	2	2	-2	-2	-2	-2	2
$A_6^8 : -+---$	2	-2	2	-2	2	-2	2	-2
$A_7^8 : +----$	2	2	-2	-2	-2	2	2	-2
$A_8^8 : ----$	2	-2	-2	-2	2	2	-2	2

	$\rho'_1{}^8$	$\rho'_2{}^8$	$\rho'_3{}^8$	$\rho'_4{}^8$	$\rho'_5{}^8$	$\rho'_6{}^8$	$\rho'_7{}^8$	$\rho'_8{}^8$
B(8,1)	1	1	1	1	1	1	1	1
B(8,2)	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1
B(8,3)	1	1	-1	1	1	-1	-1	-1
B(8,4)	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
B(8,5)	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
B(8,6)	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
B(8,7)	1	1	-1	-1	-1	1	1	-1
B(8,8)	1	-1	-1	-1	1	1	-1	1

9) Diagrama de Hugenholtz \mathfrak{g} :

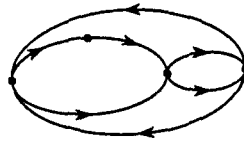


$I_i^9 = \langle \{i\} \rangle^9$	$\tilde{\mathcal{P}}_i^9$
$I_1^9 = \langle \{ (253)(47)(68) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_1^9 = 192 (\langle \langle 3_1 2_1 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 3_2 2_1 2_1 \rangle \rangle)$
$I_2^9 = \langle \{ (1532)(47)(68) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_2^9 = 192 (\langle \langle 4_1 2_1 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_2 2_1 2_1 \rangle \rangle)$
$I_3^9 = \langle \{ (25374)(68) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_3^9 = 384 (\langle \langle 5_2 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 5_3 2_1 \rangle \rangle)$
$I_4^9 = \langle \{ (4768)(253) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_4^9 = 192 (\langle \langle 4_2 3_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_2 3_2 \rangle \rangle)$
$I_5^9 = \langle \{ (153742)(68) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_5^9 = 384 (\langle \langle 6_2 2_1 \rangle \rangle + \langle \langle 6_3 3_1 \rangle \rangle)$
$I_6^9 = \langle \{ (1532)(4768) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_6^9 = 192 (\langle \langle 4_2 4_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_2 4_2 \rangle \rangle)$
$I_7^9 = \langle \{ (2586374) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_7^9 = 192 (\langle \langle 7_3 \rangle \rangle + \langle \langle 7_4 \rangle \rangle)$
$I_8^9 = \langle \{ (2537684) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_8^9 = 384 (\langle \langle 7_3 \rangle \rangle + \langle \langle 7_4 \rangle \rangle)$
$I_9^9 = \langle \{ (15863742) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_9^9 = 192 (\langle \langle 8_3 \rangle \rangle + \langle \langle 8_4 \rangle \rangle)$
$I_{10}^9 = \langle \{ (15376842) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_{10}^9 = 384 (\langle \langle 8_3 \rangle \rangle + \langle \langle 8_4 \rangle \rangle)$
$I_{11}^9 = \langle \{ (2584)(376) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_{11}^9 = 128 (\langle \langle 4_2 3_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_2 3_2 \rangle \rangle)$ $+ 64 (\langle \langle 4_1 3_2 \rangle \rangle + \langle \langle 4_3 3_1 \rangle \rangle)$
$I_{12}^9 = \langle \{ (15842)(376) \} \rangle$	$\tilde{\mathcal{P}}_{12}^9 = 128 (\langle \langle 5_2 3_1 \rangle \rangle + \langle \langle 5_2 3_2 \rangle \rangle)$ $+ 64 (\langle \langle 5_1 3_2 \rangle \rangle + \langle \langle 5_3 3_1 \rangle \rangle)$

	l_1^9	l_2^9	l_3^9	l_4^9	l_5^9	l_6^9	l_7^9	l_8^9	l_9^9	l_{10}^9	l_{11}^9	l_{12}^9
$A_1^9 :++++$	1	1	2	1	2	1	1	2	1	2	1	1
$A_2^9 :--+++$	1	-1	2	1	-2	-1	1	2	-1	-2	1	-1
$A_3^9 :+---+$	1	1	0	1	0	1	-1	0	-1	0	-1	-1
$A_4^9 :+++--$	1	1	2	-1	2	-1	1	-2	1	-2	-1	-1
$A_5^9 :---++$	1	-1	0	1	0	-1	-1	0	1	0	-1	1
$A_6^9 :--+-$	1	-1	2	-1	-2	1	1	-2	-1	2	-1	1
$A_7^9 :+--+$	1	1	-2	1	-2	1	1	-2	1	-2	1	1
$A_8^9 :+-+-$	1	1	0	-1	0	-1	-1	0	-1	0	1	1
$A_9^9 :----+$	1	-1	-2	1	2	-1	1	-2	-1	2	1	-1
$A_{10}^9 :---+-$	1	-1	0	-1	0	1	-1	0	1	0	1	-1
$A_{11}^9 :+----$	1	1	-2	-1	-2	-1	1	2	1	2	-1	-1
$A_{12}^9 :-----$	1	-1	-2	-1	2	1	1	2	-1	-2	-1	1

	$p'_1{}^9$	$p'_2{}^9$	$p'_3{}^9$	$p'_4{}^9$	$p'_5{}^9$	$p'_6{}^9$	$p'_7{}^9$	$p'_8{}^9$	$p'_9{}^9$	$p'_{10}{}^9$	$p'_{11}{}^9$	$p'_{12}{}^9$
B(9,1)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B(9,2)	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1
B(9,3)	2	2	0	2	0	2	-2	0	-2	0	-2	-2
B(9,4)	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1
B(9,5)	2	-2	0	2	0	-2	-2	0	2	0	-2	2
B(9,6)	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1
B(9,7)	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1
B(9,8)	2	2	0	-2	0	-2	-2	0	-2	0	2	2
B(9,9)	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
B(9,10)	2	-2	0	-2	0	2	-2	0	2	0	2	-2
B(9,11)	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1
B(9,12)	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1

10) Diagrama de Hugenholtz 10:

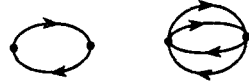


$I_i^{10} = \langle \{i\} \rangle^{10}$	\tilde{P}_i^{10}
$I_1^{10} = \langle \{(1754)(286)\} \rangle$	$\tilde{P}_1^{10} = 64 (\langle\langle 4_1 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 4_3 3_2 \rangle\rangle) + 128 (\langle\langle 4_2 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 4_2 3_2 \rangle\rangle)$
$I_2^{10} = \langle \{(1862754)\} \rangle$	$\tilde{P}_2^{10} = 64 (\langle\langle 7_2 \rangle\rangle + \langle\langle 7_5 \rangle\rangle + 2 \langle\langle 7_3 \rangle\rangle + 2 \langle\langle 7_4 \rangle\rangle)$
$I_3^{10} = \langle \{(17543)(286)\} \rangle$	$\tilde{P}_3^{10} = 64 (\langle\langle 5_1 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 5_3 3_2 \rangle\rangle) + 128 (\langle\langle 5_2 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 5_2 3_2 \rangle\rangle)$
$I_4^{10} = \langle \{(18527643)\} \rangle$	$\tilde{P}_4^{10} = 64 (\langle\langle 8_2 \rangle\rangle + \langle\langle 8_5 \rangle\rangle + 2 \langle\langle 8_3 \rangle\rangle + 2 \langle\langle 8_4 \rangle\rangle)$

	I_1^{10}	I_2^{10}	I_3^{10}	I_4^{10}
$A_1^{10} : +++++$	4	4	4	4
$A_2^{10} : +---+$	4	4	-4	-4
$A_3^{10} : -+---$	4	-4	4	-4
$A_4^{10} : ----$	4	-4	-4	4

	P'_1^{10}	P'_2^{10}	P'_3^{10}	P'_4^{10}
$B(10,1)$	1	1	1	1
$B(10,2)$	1	1	-1	-1
$B(10,3)$	1	-1	1	-1
$B(10,4)$	1	-1	-1	1

11) Diagrama de Hugenholtz 11:



$l_i^{11} = \langle \{i\} \rangle^{11}$	\tilde{p}_i^{11}
$l_1^{11} = \langle \{(23)(57)(68)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^{11} = 48 \langle \langle 2_1 2_1 2_1 \rangle \rangle$
$l_2^{11} = \langle \{(132)(57)(68)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^{11} = 96 \langle \langle 3_1 2_1 2_1 \rangle \rangle$
$l_3^{11} = \langle \{(5867)(23)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^{11} = 48 \langle \langle 4_2 2_1 \rangle \rangle$
$l_4^{11} = \langle \{(5867)(132)\} \rangle$	$\tilde{p}_4^{11} = 96 \langle \langle 4_2 3_1 \rangle \rangle$
$l_5^{11} = \langle \{(1342)(5867)\} \rangle$	$\tilde{p}_5^{11} = 48 \langle \langle 4_2 4_1 \rangle \rangle$
$l_6^{11} = \langle \{(1342)(58)(67)\} \rangle$	$\tilde{p}_6^{11} = 48 \langle \langle 4_1 2_1 2_1 \rangle \rangle$

	l_1^{11}	l_2^{11}	l_3^{11}	l_4^{11}	l_5^{11}	l_6^{11}
$A_1^{11} : ++++$	2	4	2	4	2	2
$A_2^{11} : -+++$	2	0	2	0	-2	-2
$A_3^{11} : ---+$	2	-4	2	-4	2	2
$A_4^{11} : ++--$	2	4	-2	-4	-2	2
$A_5^{11} : -+--$	2	0	-2	0	2	-2
$A_6^{11} : ----$	2	-4	-2	4	-2	2

	\mathcal{P}'_1^{11}	\mathcal{P}'_2^{11}	\mathcal{P}'_3^{11}	\mathcal{P}'_4^{11}	\mathcal{P}'_5^{11}	\mathcal{P}'_6^{11}
B(11,1)	1	1	1	1	1	1
B(11,2)	2	0	2	0	-2	-2
B(11,3)	1	-1	1	-1	1	1
B(11,4)	1	1	-1	-1	-1	1
B(11,5)	2	0	-2	0	2	-2
B(11,6)	1	-1	-1	1	-1	1

12) Diagrama de Hugenholtz 12:

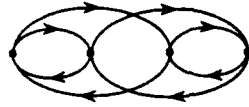


$I_i^{12} = \langle \{i\} \rangle^{12}$	\tilde{P}_i^{12}
$I_1^{12} = \langle \{(13)(24)(57)(68)\} \rangle$	$\tilde{P}_1^{12} = 12 \langle\langle 2_1 2_1 2_1 2_1 \rangle\rangle$
$I_2^{12} = \langle \{(1423)(57)(68)\} \rangle$	$\tilde{P}_2^{12} = 24 \langle\langle 4_2 2_1 2_1 \rangle\rangle$
$I_3^{12} = \langle \{(1423)(5867)\} \rangle$	$\tilde{P}_3^{12} = 12 \langle\langle 4_2 4_2 \rangle\rangle$

	I_1^{12}	I_2^{12}	I_3^{12}
$A_1^{12} :++++$	4	8	4
$A_2^{12} :--++$	4	0	-4
$A_3^{12} :----$	4	-8	4

	\tilde{P}'_1^{12}	\tilde{P}'_2^{12}	\tilde{P}'_3^{12}
B(12,1)	1	1	1
B(12,2)	2	0	-2
B(12,3)	1	-1	1

13) Diagrama de Hugenholtz 13:

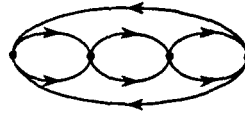


$I_i^{13} = \langle \{i\} \rangle^{13}$	\tilde{P}_i^{13}
$I_1^{13} = \langle \{(13)(25)(47)(68)\} \rangle$	$\tilde{P}_1^{13} = 48 \langle \langle 2_1 2_1 2_1 2_1 \rangle \rangle$
$I_2^{13} = \langle \{(1523)(47)(68)\} \rangle$	$\tilde{P}_2^{13} = 192 \langle \langle 4_2 2_1 2_1 \rangle \rangle$
$I_3^{13} = \langle \{(152374)(68)\} \rangle$	$\tilde{P}_3^{13} = 192 \langle \langle 6_3 2_1 \rangle \rangle$
$I_4^{13} = \langle \{(1523)(4768)\} \rangle$	$\tilde{P}_4^{13} = 96 \langle \langle 4_2 4_2 \rangle \rangle$
$I_5^{13} = \langle \{(15862374)\} \rangle$	$\tilde{P}_5^{13} = 192 \langle \langle 8_4 \rangle \rangle$
$I_6^{13} = \langle \{(1584)(2376)\} \rangle$	$\tilde{P}_6^{13} = 16 (\langle \langle 4_1 4_3 \rangle \rangle + 2 \langle \langle 4_2 4_2 \rangle \rangle)$

	I_1^{13}	I_2^{13}	I_3^{13}	I_4^{13}	I_5^{13}	I_6^{13}
$A_1^{13} : +++++$	1	4	4	2	4	1
$A_2^{13} : -+++$	1	2	0	0	-2	-1
$A_3^{13} : --++$	1	0	0	-2	0	1
$A_4^{13} : -+-$	1	0	-4	2	0	1
$A_5^{13} : ----+$	1	-2	0	0	2	-1
$A_6^{13} : -----$	1	-4	4	2	-4	1

	\mathcal{P}'_1^{13}	\mathcal{P}'_2^{13}	\mathcal{P}'_3^{13}	\mathcal{P}'_4^{13}	\mathcal{P}'_5^{13}	\mathcal{P}'_6^{13}
B(13,1)	1	1	1	1	1	1
B(13,2)	4	2	0	0	-2	-4
B(13,3)	4	0	0	-4	0	4
B(13,4)	2	0	-2	2	0	2
B(13,5)	4	-2	0	0	2	-4
B(13,6)	1	-1	1	1	-1	1

14) Diagrama de Hugenholtz 14:

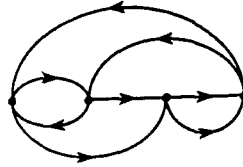


$l_i^{14} = \langle \{i\} \rangle^{14}$	\tilde{p}_i^{14}
$l_1^{14} = \langle \{ (1753)(2864) \} \rangle$	$\tilde{p}_1^{14} = 8 (\langle \langle 4_1 4_1 \rangle \rangle + \langle \langle 4_3 4_3 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 4_2 4_2 \rangle \rangle)$
$l_2^{14} = \langle \{ (18642753) \} \rangle$	$\tilde{p}_2^{14} = 8 (\langle \langle 8_2 \rangle \rangle + \langle \langle 8_6 \rangle \rangle + 4 \langle \langle 8_4 \rangle \rangle)$

	l_1^{14}	l_2^{14}
$A_1^{14} : + + + +$	8	8
$A_2^{14} : - - - -$	8	-8

	$p'_1{}^{14}$	$p'_2{}^{14}$
B(14,1)	1	1
B(14,2)	1	-1

15) Diagrama de Hugenholtz 15:

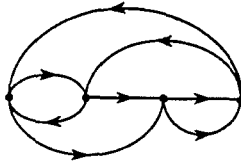


$I_i^{15} = \langle \{i\} \rangle^{15}$	\tilde{P}_i^{15}
$I_1^{15} = \langle \{(275)(486)(13)\} \rangle$	$\tilde{P}_1^{15} = 64 (\langle\langle 3_1 3_1 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 3_2 3_2 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 3_2 3_1 2_1 \rangle\rangle)$
$I_2^{15} = \langle \{(17523)(486)\} \rangle$	$\tilde{P}_2^{15} = 128 (\langle\langle 5_2 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 5_3 3_2 \rangle\rangle) + 64 (\langle\langle 5_2 3_2 \rangle\rangle + \langle\langle 5_3 3_1 \rangle\rangle)$
$I_3^{15} = \langle \{(275486)(13)\} \rangle$	$\tilde{P}_3^{15} = 64 (\langle\langle 6_2 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 6_4 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 6_3 2_1 \rangle\rangle)$
$I_4^{15} = \langle \{(17523864)\} \rangle$	$\tilde{P}_4^{15} = 64 (\langle\langle 8_3 \rangle\rangle + \langle\langle 8_5 \rangle\rangle + \langle\langle 8_4 \rangle\rangle)$
$I_5^{15} = \langle \{(17548623)\} \rangle$	$\tilde{P}_5^{15} = 128 (\langle\langle 8_3 \rangle\rangle + \langle\langle 8_5 \rangle\rangle + \langle\langle 8_4 \rangle\rangle)$
$I_6^{15} = \langle \{(1754)(2386)\} \rangle$	$\tilde{P}_6^{15} = 64 (\langle\langle 4_2 4_1 \rangle\rangle + \langle\langle 4_2 4_3 \rangle\rangle + \langle\langle 4_2 4_2 \rangle\rangle)$

	I_1^{15}	I_2^{15}	I_3^{15}	I_4^{15}	I_5^{15}	I_6^{15}
$A_1^{15} :++++$	2	4	2	2	4	2
$A_2^{15} : -+++$	2	0	2	-2	0	-2
$A_3^{15} : ---+$	2	-4	2	2	-4	2
$A_4^{15} : ++--$	2	4	-2	2	-4	-2
$A_5^{15} : -+--$	2	0	-2	-2	0	2
$A_6^{15} : ----$	2	-4	-2	2	4	-2

	\mathcal{P}'_1^{15}	\mathcal{P}'_2^{15}	\mathcal{P}'_3^{15}	\mathcal{P}'_4^{15}	\mathcal{P}'_5^{15}	\mathcal{P}'_6^{15}
B(15,1)	1	1	1	1	1	1
B(15,2)	2	0	2	-2	0	-2
B(15,3)	1	-1	1	1	-1	1
B(15,4)	1	1	-1	1	-1	-1
B(15,5)	2	0	-2	-2	0	2
B(15,6)	1	-1	-1	1	1	-1

16) Diagrama de Hugenholtz 16:



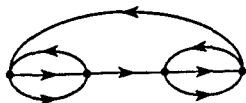
$I_i^{16} = \langle \{i\} \rangle^{16}$	\tilde{P}_i^{16}
$I_1^{16} = \langle \{(2763)(15)(48)\} \rangle$	$\tilde{P}_1^{16} = 16 (\langle\langle 4_1 2_1 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 4_3 2_1 2_1 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 4_2 2_1 2_1 \rangle\rangle)$
$I_2^{16} = \langle \{(176325)(48)\} \rangle$	$\tilde{P}_2^{16} = 64 (\langle\langle 6_2 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 6_4 2_1 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 6_3 2_1 \rangle\rangle)$
$I_3^{16} = \langle \{(17638425)\} \rangle$	$\tilde{P}_3^{16} = 64 (\langle\langle 8_3 \rangle\rangle + \langle\langle 8_5 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 8_4 \rangle\rangle)$
$I_4^{16} = \langle \{(274)(386)(15)\} \rangle$	$\tilde{P}_4^{16} = 32 (\langle\langle 3_1 3_1 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 3_2 3_2 2_1 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 3_2 3_1 2_1 \rangle\rangle)$
$I_5^{16} = \langle \{(25384)(176)\} \rangle$	$\tilde{P}_5^{16} = 64 (\langle\langle 5_2 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 5_3 3_2 \rangle\rangle) + 128 (\langle\langle 5_2 3_2 \rangle\rangle + \langle\langle 5_3 3_1 \rangle\rangle)$
$I_6^{16} = \langle \{(17425386)\} \rangle$	$\tilde{P}_6^{16} = 16 (\langle\langle 8_3 \rangle\rangle + \langle\langle 8_5 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 8_4 \rangle\rangle)$

	I_1^{16}	I_2^{16}	I_3^{16}	I_4^{16}	I_5^{16}	I_6^{16}
$A_1^{16} :++++$	1	4	4	2	4	1
$A_2^{16} : -+++$	1	2	0	0	-2	-1
$A_3^{16} : --++$	1	0	0	-2	0	1
$A_4^{16} : +-+-$	1	0	-4	2	0	1
$A_5^{16} : ----+$	1	-2	0	0	2	-1
$A_6^{16} : ----$	1	-4	4	2	-4	1

	\mathcal{P}'_1^{16}	\mathcal{P}'_2^{16}	\mathcal{P}'_3^{16}	\mathcal{P}'_4^{16}	\mathcal{P}'_5^{16}	\mathcal{P}'_6^{16}
B(16,1)	1	1	1	1	1	1
B(16,2)	4	2	0	0	-2	-4
B(16,3)	4	0	0	-4	0	4
B(16,4)	2	0	-2	2	0	2
B(16,5)	4	-2	0	0	2	-4
B(16,6)	1	-1	1	1	-1	1

Sum $\begin{matrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \lambda 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$

17) Diagrama de Hugenholtz 17:



$l_i^{17} = \langle \{i\} \rangle^{17}$	\tilde{p}_i^{17}
$l_1^{17} = \langle \{(2754)(13)(68)\} \rangle$	$\tilde{p}_1^{17} = 32 (\langle\langle 4_1 2_1 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 4_3 2_1 2_1 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 4_2 2_1 2_1 \rangle\rangle)$
$l_2^{17} = \langle \{(175423)(68)\} \rangle$	$\tilde{p}_2^{17} = 64 (\langle\langle 6_2 2_1 \rangle\rangle + \langle\langle 6_4 2_1 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 6_3 2_1 \rangle\rangle)$
$l_3^{17} = \langle \{(17586423)\} \rangle$	$\tilde{p}_3^{17} = 32 (\langle\langle 8_3 \rangle\rangle + \langle\langle 8_5 \rangle\rangle + 4 \langle\langle 8_4 \rangle\rangle)$

	l_1^{17}	l_2^{17}	l_3^{17}
$A_1^{17} :++++$	4	8	4
$A_2^{17} :---++$	4	0	-4
$A_3^{17} :-----$	4	-8	4

	p'_1^{17}	p'_2^{17}	p'_3^{17}
$B(17,1)$	1	1	1
$B(17,2)$	2	0	-2
$B(17,3)$	1	-1	1

4.5.- COEFICIENTES S_2 -ADAPTADOS EN FUNCION DE S, N, K.

En la sección 4.4 hemos definido las matrices \mathbb{B}^k de coeficientes de propagación S_2 -adaptados, asociadas a un diagrama k de Hugenholtz dado. Podemos reunir, para cada momento, el conjunto de coeficientes en una única matriz $\mathbb{B}(k, r)$ en la que el índice k corre sobre diagramas y r sobre los coeficientes concretos que aparecen para cada diagrama. La ecuación (4.30b) podemos reescribirla pues como

$$B(k, r) = \sum_i \theta_{ri}^k \rho_i^k \quad (4.31)$$

Por ejemplo, para el diagrama de Hugenholtz 1 del tercer momento (ver sección 4.4.2), el coeficiente adaptado $B(1,1)$ viene dado por:

$$B(1,1) = \frac{1}{D(S, N, K)} (\langle\langle 3_1 \rangle\rangle + \langle\langle 3_2 \rangle\rangle + 3 \langle\langle 4_1 \rangle\rangle + 3 \langle\langle 4_2 \rangle\rangle + 3 \langle\langle 5_1 \rangle\rangle + \\ + 3 \langle\langle 5_2 \rangle\rangle + \langle\langle 6_1 \rangle\rangle + \langle\langle 6_2 \rangle\rangle). \quad (4.32)$$

Para evaluar estos coeficientes $B(k, r)$ como funciones de N, S, y K se procede del siguiente modo:

(a) Efectuamos los productos de operadores de densidad (aplicación del teorema de Wick con objeto de escribir los coeficientes $B(k, r)$ como combinaciones lineales de trazas de un único operador de densidad). Por ejemplo, la primera traza, $\langle\langle 3_1 \rangle\rangle$, contenida en el coeficiente anterior, ecuación (4.32), da lugar a.

$$\langle\langle 3 \rangle\rangle_{6E} + \langle\langle 2 \rangle\rangle_{5E}$$

(b) Cada una de las trazas de operadores de densidad obtenidas en el punto anterior (a) se escribe en función de trazas de productos de números de ocupación (ecuación 1.44 de la sección 1.8.2). Por ejemplo:

$$\langle\langle 3 \rangle\rangle_{6E} = \langle\langle 3 \rangle\rangle_{6E, SNK} = \left\langle\left\langle E_{\begin{matrix} 123456 \\ 231456 \end{matrix}} \right\rangle\right\rangle_{SNK} = \\ = \langle\langle n_1 n_2 \dots n_6 \rangle\rangle_{SNK} - \langle\langle n_1 n_2 n_2 n_4 \rangle\rangle_{S, N-2, K-1} \quad (4.33)$$

(c) La ecuación 1.42 nos permite escribir las trazas de productos de números de ocupación en función de la dimensión del espacio y ciertos números combinatorios. Es decir:

$$\langle\langle n_1 n_2 \dots n_q \rangle\rangle_{S, N-2j, K-j} = \sum_{\ell}^{\xi} (-1)^{\ell} \frac{\binom{(N-2j)-2\ell}{q-2\ell}}{\binom{(K-j)-\ell}{q-\ell}} D(S, (N-2j-2\ell), (K-j-\ell)) \quad (4.34)$$

donde $\xi = \frac{q - \delta(q)}{2}$; $\delta(q)$ asume el valor 0/1 si q es par/impar, y el resto de magnitudes mantienen su definición usual. Quizás merezca la pena especificar que $D(S, (N-2j-2\ell), (K-j-\ell))$ es la dimensión de un espacio FCI de $(N-2j-2\ell)$ electrones, $(K-j-\ell)$ orbitales y que presenta un acoplamiento de spin S . Dicha dimensión viene dada por la fórmula de Weyl-Paldus (ecuación i.2).

Ni que decir tiene que la evaluación de estos coeficientes $B(k,r)$ hace necesario la programación de un algoritmo en lenguaje MATHEMATICA. Los resultados obtenidos para el segundo y tercer momento vienen dados a continuación. (No hemos incluido en la presente memoria los coeficientes para el cuarto momento debido a su extensión. Únicamente hemos incluido en la sección siguiente su límite asintótico en un espacio de Hilbert infinito-dimensional). La forma en que estos coeficientes vienen presentados es:

$$B(k, r) = \frac{1}{g(k, r)} \sum_{p=0}^{2n} N^p \sum_{q=0}^n [S(S+1)]^q f(k, r, p, q) \quad (4.35)$$

donde $n = 2, 3, \dots$ para segundo, tercer momento, etc., y f y g son polinomios en K :

$$f(k, r, p, q) = a_0 + a_1 K + a_2 K^2 + \dots \quad (4.36a)$$

$$g(k, r) = c (K-r_1) (K-r_2) (K-r_3) \dots \quad (4.36b)$$

Coefficientes adaptados a S_2 para el segundo momento centrado

$$\begin{aligned}
 B[1,1] = & (-16*S^2*(1+S)^2+K*16*S*(S+1)- \\
 & N^4+ \\
 & 2*K*N^3 + \\
 & N^2*(4+8*S+8*S^2)+ \\
 & N*(-8*K-8*K*S*(S+1)))/ \\
 & (8*K^2*(-1+K)*(1+K));
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B[1,2] = & (48*K*S*(S+1)+16*S^2*(S+1)^2 - \\
 & 3*N^4 + \\
 & 6*K*N^3+ \\
 & N^2*(12+8*S*(S+1))+ \\
 & N*(-32*S*(S+1)+K*(-24-24*S*(S+1)))/ \\
 & (4*K*(-2+K)*(-1+K)*(1+K));
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B[1,3] = & (S^2*(S+1)^2*(96-112*K-16*K^2)+ \\
 & S*(S+1)*(-96*K-400*K^2-112*K^3)+ \\
 & N^4*(6-15*K-9*K^2)+ \\
 & N^3*(84*K+78*K^2+18*K^3)+ \\
 & N^2*(-24-132*K-252*K^2-96*K^3+ \\
 & S*(S+1)*(-48-40*K-88*K^2)) + \\
 & N*(48*K+264*K^2+120*K^3+ \\
 & S*(S+1)*(240*K+392*K^2+56*K^3)))/ \\
 & (8*K^2*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)*(1+K));
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[2,1] = & (16*S^2*(S+1)^2+S*(S+1)*(-16*K-16*K^2) + \\
& N^4 - \\
& 4*K*N^3+ \\
& N^2*(-4-4*K+4*K^2-8*S*(S+1))+ \\
& N*(8*K+8*K^2+16*K*S*(S+1)))/ \\
& (16*K^2*(-1+K)*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[2,2]= & (16*K^4*S+16*K^4*S^2+ \\
& S^2*(S+1)^2*(96-112*K+48*K^2)+ \\
& S*(S+1)*(-96*K-16*K^2+96*K^3)+ \\
& N^4*(6+9*K+3*K^2)+ \\
& N^3*(-24*K-36*K^2-12*K^3)+ \\
& N^2*(-24-12*K+48*K^2+48*K^3+12*K^4+ \\
& S*(S+1)*(-48+56*K+40*K^2)) + \\
& N*(48*K+24*K^2-48*K^3-24*K^4+ \\
& S*(S+1)*(96*K-112*K^2-80*K^3)))/ \\
& (16*K^2*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)*(1+K));
\end{aligned}$$

Coeficientes adaptados a S_2 para el tercer momento centrado

$$\begin{aligned}
 B[1,1] = & ((96*K-96*K^2)*S*(S+1)+ \\
 & (-96+256*K-32*K^2)*(S*(S+1))^2-64*(S*(S+1))^3 + \\
 & N^6 + \\
 & N^5*(-3-3*K)+ \\
 & N^4*(-10+12*K+2*K^2-12*S*(S+1))+ \\
 & N^3*(12+24*K-12*K^2+(24+24*K)*S*(S+1))+ \\
 & N^2*(24-48*K-8*K^2+(64-112*K)*S*(S+1)+48*(S*(S+1))^2)+ \\
 & N*(-48*K+48*K^2+(-80*K+80*K^2)*S*(S+1)+ \\
 & (16*K^2*(-2+K)*(-1+K)^2*(1+K));
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B[1,2] = & ((864*K-288*K^2)*S*(S+1)+ \\
 & (-864+1152*K+96*K^2)*(S*(S+1))^2+192*(S*(S+1))^3+ \\
 & 9*N^6+ \\
 & N^5*(-9-27*K)+ \\
 & N^4*(-90+36*K+18*K^2-60*S*(S+1))+ \\
 & N^3*(36+216*K-36*K^2+(72+216*K)*S*(S+1))+ \\
 & N^2*(216-144*K-72*K^2+ \\
 & (384-432*K-96*K^2)*S*(S+1)+ \\
 & 48*(S*(S+1))^2)+ \\
 & N*(-432*K+144*K^2+(-720*K+240*K^2)*S*(S+1)+ \\
 & (-144-432*K)*(S*(S+1))^2))/ \\
 & (16*K^2*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)*(1+K));
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B[1,3]} = & ((8064*K-4320*K^2-2304*K^3-1440*K^4)*S*(S+1)+ \\
& (-8064+13152*K-3744*K^2-3552*K^3- 96*K^4)*(S*(S+1))^2+ \\
& (2304-960*K-192*K^2)*(S*(S+1))^3+ \\
& N^5*(324-45*K-90*K^2-81*K^3)+ \\
& N^6*(-36-9*K+27*K^2)+ \\
& N^4*(-360-342*K+270*K^2+306*K^3+ 54*K^4+ \\
& (432-372*K+156*K^2)*S*(S+1))+ \\
& N^3*(-1296+1188*K-180*K^2+36*K^3- 180*K^4+ \\
& (-2592+1896*K-240*K^2+72*K^3)*S*(S+1))+ \\
& N^2*(2016+1512*K-1512*K^2-1224*K^3-216*K^4+ \\
& (3456+3072*K-3984*K^2-1488*K^3-192*K^4)*S*(S+1)+ \\
& (-1728+1872*K-1008*K^2)*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(-4032*K+2160*K^2+1152*K^3+720*K^4+ \\
& (-13632*K+7056*K^2+5376*K^3+1200*K^4)*S*(S+1)+ \\
& (5184-9936*K+5472*K^2+1008*K^3)*(S*(S+1))^2))/ \\
& (16*K^2*(-4+K)*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[1,4] = & ((-28800*K-6240*K^2+15456*K^3+17760*K^4+ \\
& 1824*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (28800-34848*K-10304*K^2+20224*K^3+2240*K^4+ \\
& 32*K^5)*(S*(S+1))^2+ \\
& (-3840-448*K+1152*K^2+64*K^3)*(S*(S+1))^3 + \\
& N^6*(300-333*K+54*K^2+27*K^3)+ \\
& N^5*(-1620+1629*K+297*K^2-513*K^3-81*K^4)+ \\
& N^4*(600-1470*K-3144*K^2+3072*K^3+1080*K^4+54*K^5+ \\
& (-2640+2508*K-1128*K^2+684*K^3)*S*(S+1))+ \\
& N^3*(6480+3324*K+6096*K^2-8688*K^3-5520*K^4-540*K^5+ \\
& (12960-5352*K+1272*K^2-5496*K^3-1080*K^4)*S*(S+1))+ \\
& N^2*(-7200-15672*K-5568*K^2+12240*K^3+12960*K^4+1704*K^5+ \\
& (-13440-27584*K+7472*K^2+22400*K^3+ \\
& 8560*K^4+288*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (6720-8688*K+3360*K^2+912*K^3)*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(14400*K+5424*K^2-6960*K^3-11184*K^4-1680*K^5+ \\
& (58560*K+6352*K^2-40528*K^3-22864*K^4-1520*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (-25920+41424*K-9840*K^2-9744*K^3-528*K^4)*(S*(S+1))^2))/ \\
& (16*K^2*(-5+K)*(-4+K)*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[2,1] = & ((192*K+192*K^2)*(S*(S+1))^2 - 192*(S*(S+1))^3 \\
& 3*N^6 + (-6-12*K)*N^5 + \\
& N^4*(-12+12*K+12*K^2-36*S*(S+1)) + \\
& N*(-96-192*K)*(S*(S+1))^2 + \\
& N^3*(24+48*K + (48+96*K)*S*(S+1)) + \\
& N^2*(-48*K-48*K^2+(48-96*K-96*K^2)*S*(S+1)+144*(S*(S+1))^2))/ \\
& (32*K^2*(-2+K)*(-1+K)^2*(1+K))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[2,2] = & ((-1152*K-1152*K^2)*S*(S+1) + \\
& (1152-192*K-192*K^2)*(S*(S+1))^2 + 192*(S*(S+1))^3 + \\
& 9*N^6 + N^5(-54-36*K)N^5 + \\
& N^4*(36+180*K+36*K^2-60*S*(S+1)) + \\
& N^3*(216-144*K^2+(432+96*K)*S*(S+1)) + \\
& N^2*(-288-720*K-144*K^2 + \\
& (-624-1056*K-96*K^2)*S*(S+1)+48*(S*(S+1))^2) + \\
& N*(576*K+576*K^2 + \\
& (2112*K+960*K^2)*S*(S+1) + \\
& (-864+192*K)*(S*(S+1))^2))/ \\
& (16*K^2*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)*(1+K))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[23] = & ((-576*K+576*K^2)*(S*(S+1))^2 + \\
& (288-576*K)*N*(S*(S+1))^2 + 192*(S*(S+1))^3 + \\
& 9*N^6 + N^5(18-36*K) + \\
& N^4*(-36-36*K+36*K^2-60*S*(S+1)) + \\
& N^3*(-72+144*K+(-144+288*K)*S*(S+1)) + \\
& N^2*(144*K-144*K^2+(-48+288*K-288*K^2)*S*(S+1) + \\
& 48*(S*(S+1))^2))/ \\
& (32*K^2*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)*(1+K))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[2,4] = & ((-4608*K+3456*K^2+4608*K^3-3456*K^4)*S*(S+1)+ \\
& (4608-13440*K+10944*K^2-3840*K^3-576*K^4)*(S*(S+1))^2+ \\
& (2304-960*K-192*K^2)*(S*(S+1))^3+ \\
& N^6*(-36-9*K+27*K^2)+ \\
& N^5*(72+162*K-18*K^2-108*K^3)+ \\
& N^4*(432-324*K-576*K^2+288*K^3+108*K^4+ \\
& (432-372*K+156*K^2)*S*(S+1))+ \\
& N^3*(-288-1224*K+504*K^2+1008*K^3-432*K^4+ \\
& (-576-1296*K+1104*K^2-96*K^3)*S*(S+1))+ \\
& N^2*(-1152+1440*K+1872*K^2-1152*K^3-432*K^4+ \\
& (-2880+6576*K-432*K^2-2112*K^3-288*K^4)*S*(S+1)+ \\
& (-1728+1872*K-1008*K^2)*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(2304*K-1728*K^2-2304*K^3+1728*K^4+ \\
& (6144*K-10944*K^2+1920*K^3+2880*K^4)*S*(S+1)+ \\
& (1152-480*K-1056*K^2+2112*K^3)*(S*(S+1))^2))/ \\
& (16*K^2*(-4+K)*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[25] = & ((2304*K - 2304*K^3)*S*(S+1) + \\
& (-2304 + 960*K - 1152*K^2 + 192*K^3)*(S*(S+1))^2 + \\
& (1344 - 192*K)*(S*(S+1))^3 + \\
& N^6*(-45 + 27*K) + \\
& N^5*(162 + 54*K - 108*K^2) + \\
& N^4*(36 - 432*K + 216*K^2 + 108*K^3 + (444 - 228*K)*S*(S+1)) + \\
& N^3*(-648 + 72*K + 432*K^2 - 288*K^3 + \\
& (-1296 - 48*K + 480*K^2)*S*(S+1)) + \\
& N^2*(576 + 1296*K - 864*K^2 - 432*K^3 + \\
& (816 + 1872*K - 1344*K^2 - 480*K^3)*S*(S+1) + \\
& (-1392 + 528*K)*(S*(S+1))^2) + \\
& N*(-1152*K + 1152*K^3 + \\
& (-4224*K + 2304*K^2 + 1920*K^3)*S*(S+1) + \\
& (2592 - 672*K - 192*K^2)*(S*(S+1))^2) / \\
& (32*K^2*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)^2*(1+K))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[2,6] = & ((46080*K-43776*K^2-57600*K^3+ \\
& 43776*K^4+11520*K^5)*S*(S+1) + \\
& (-46080+95232*K-122688*K^2+44736*K^3+ \\
& 9792*K^4+576*K^5)*(S*(S+1))^2+ \\
& (26880-24384*K+6528*K^2+192*K^3)*(S*(S+1))^3+ \\
& N^6(-180-63*K+18*K^2+81*K^3) + \\
& N^5*(1080+1674*K-864*K^2-702*K^3-324*K^4)+ \\
& N^4*(-2160-5508*K-1404*K^2+5256*K^3+2916*K^4+324*K^5+ \\
& (3120-3324*K+264*K^2+1668*K^3)*S*(S+1))+ \\
& N^3*(-4320+10584*K+16416*K^2-11304*K^3-11664*K^4-3168*K^5+ \\
& (-8640+17328*K+1920*K^2 -13584*K^3-3936*K^4)*S*(S+1))+ \\
& N^2*(11520-29232*K^2-10800*K^3+22896*K^4+10224*K^5+ \\
& (16320-37680*K-33984*K^2+29424*K^3+ \\
& 31200*K^4+1632*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (-16320+8112*K-2976*K^2+4272*K^3)*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(-23040*K+17280*K^2+33408*K^3-17280*K^4-10368*K^5+ \\
& (-61440*K+140160*K^2+1920*K^3- \\
& 71040*K^4-9600*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (17280-3936*K+30720*K^2-26592*K^3- \\
& 3648*K^4)*(S*(S+1))^2))/ \\
& (32*K^2*(-5+K)*(-4+K)*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[3,1] = & ((-96*K+96*K^3)*S*(S+1)+ \\
& (96-288*K-192*K^2)*(S*(S+1))^2+192*(S*(S+1))^3- \\
& 3*N^6 + \\
& N^5*(3+15*K) + \\
& N^4*(18-6*K-24*K^2+36*S*(S+1))+ \\
& N^3*(-12-72*K+12*K^3+(-24-120*K)*S*(S+1))+ \\
& N^2*(-24+24*K+96*K^2+ \\
& (-96+96*K+144*K^2)*S*(S+1)-144*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(48*K-48*K^3+(144*K-96*K^2-48*K^3)*S*(S+1)+ \\
& (48+240*K)*(S*(S+1))^2)/ \\
& (16*(-2+K)*(-1+K)^2*K^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[3,2] = & ((288*K+576*K^2+288*K^3)*S*(S+1)+ \\
& (-288-96*K+192*K^2)*(S*(S+1))^2-192*(S*(S+1))^3- \\
& 9*N^6 + \\
& N^5*(27+45*K) + \\
& N^4*(18-90*K-72*K^2+60*S*(S+1))+ \\
& N^3*(-108-144*K+72*K^2+36*K^3+ \\
& (-216-168*K)*S*(S+1))+ \\
& N^2*(72+360*K+288*K^2+ \\
& (192+768*K+240*K^2)*S*(S+1)-48*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(-144*K-288*K^2-144*K^3+ \\
& (-816*K-960*K^2-144*K^3)*S*(S+1)+ \\
& (432-48*K)*(S*(S+1))^2)/ \\
& (16*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)*K^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[3,3] = & ((-1152*K+288*K^2+864*K^3-288*K^4+288*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (1152-4512*K+576*K^2-96*K^3+576*K^4)*(S*(S+1))^2+ \\
& (3072-2496*K+576*K^2)*(S*(S+1))^3+ \\
& N^6*(-9*K-9*K^2)+ \\
& N^5*(36+9*K+18*K^2+45*K^3)+ \\
& N^4*(72-54*K-36*K^2+18*K^3-72*K^4+ \\
& (192+108*K-84*K^2)*S*(S+1))+ \\
& N^3*(-144-180*K-36*K^2-72*K^3-36*K^4+36*K^5+ \\
& (-288-72*K-624*K^2+120*K^3)*S*(S+1))+ \\
& N^2*(-288+360*K+288*K^2-72*K^3+288*K^4+ \\
& (-1344+1344*K-192*K^2+912*K^3+144*K^4)*S*(S+1)+ \\
& (-1536+336*K+336*K^2)*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(576*K-144*K^2-432*K^3+144*K^4-144*K^5+ \\
& (2112*K-1008*K^2-240*K^3-720*K^4-144*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (576+1680*K+672*K^2-1200*K^3)*(S*(S+1))^2))/ \\
& (16*(-4+K)*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)^2*K^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[3,4] = & ((5760*K+7008*K^2-5088*K^3-7008*K^4-672*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (-5760-480*K+9792*K^2-9888*K^3-576*K^4)*(S*(S+1))^2+ \\
& (576*K-576*K^2)*(S*(S+1))^3+ \\
& N^6*(-117*K-27*K^2)+ \\
& N^5*(540+567*K+702*K^2+135*K^3)+ \\
& N^4*(-360-2538*K-3204*K^2-1602*K^3-216*K^4+ \\
& (-1140*K-780*K^2)*S*(S+1)) + \\
& N^3*(-2160+1332*K+5940*K^2+6120*K^3+1620*K^4+108*K^5+ \\
& (-4320+6984*K+6576*K^2+2472*K^3) *S*(S+1))+ \\
& N^2*(1440+6264*K-2304*K^2-7992*K^3-4320*K^4-576*K^5+ \\
& (2880+9696*K-20736*K^2-13200*K^3-2064*K^4)*S*(S+1)+ \\
& (144*K-2448*K^2)*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(-2880*K-3888*K^2+2160*K^3+3888*K^4+720*K^5+ \\
& (-14400*K-1104*K^2+22320*K^3+8208*K^4+336*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (8640-13968*K+10080*K^2+3312*K^3)*(S*(S+1))^2)/ \\
& (16*(-5+K)*(-4+K)*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)*K^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[4,1] = & ((32*K^2-32*K^4)*S*(S+1)+(32*K+96*K^2)*(S*(S+1))^2- \\
& 64*(S*(S+1))^3+ \\
& N^6-N^5*6*K + \\
& N^4*(-4-6*K+14*K^2-12*S*(S+1))+ \\
& N^3*(16*K+24*K^2-16*K^3+48*K*S*(S+1))+ \\
& N^2*(8*K-16*K^2-32*K^3+8*K^4+ \\
& (16+16*K-80*K^2)*S*(S+1)+48*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(-16*K^2+16*K^4+(-32*K-32*K^2+64*K^3)*S*(S+1)- \\
& 96*K*(S*(S+1))^2)/ \\
& (32*(-2+K)*(-1+K)^2*K^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[4,2] = & ((-1920*K^2+608*K^3+1728*K^4-640*K^5+ \\
& 192*K^6+32*K^7)*S*(S+1)+ \\
& (-1152*K-6240*K^2+5984*K^3-2208*K^4+544*K^5)*(S*(S+1))^2+ \\
& (3840-2752*K+384*K^2+64*K^3)*(S*(S+1))^3+ \\
& N^6*(-60+15*K+18*K^2+3*K^3)+ \\
& N^5*(360*K-90*K^2-108*K^3-18*K^4)+ \\
& N^4*(240-228*K-630*K^2+258*K^3+222*K^4+42*K^5+ \\
& (720-804*K+264*K^2+108*K^3)*S*(S+1))+ \\
& N^3*(-960*K+912*K^2+120*K^3-432*K^4-168*K^5-48*K^6+ \\
& (-2880*K+3216*K^2-1056*K^3-432*K^4)*S*(S+1))+ \\
& N^2*(-288*K+840*K^2-576*K^3+456*K^4+264*K^5+48*K^6+24*K^7+ \\
& (-960-656*K+4464*K^2-3488*K^3+1200*K^4+592*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (-2880+2640*K-1440*K^2+528*K^3)*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(576*K^2+240*K^3-672*K^4-192*K^5+96*K^6-48*K^7+ \\
& (1920*K+1312*K^2-3168*K^3+544*K^4-288*K^5 - \\
& 320*K^6)*S*(S+1)+ \\
& (5760*K-5280*K^2+2880*K^3-1056*K^4)*(S*(S+1))^2)/ \\
& (32*(-5+K)*(-4+K)*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)^2*K^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B[5,1]} = & ((64*K-64*K^3)*S*(S+1)+ \\
& (-64+128*K+64*K^2)*(S*(S+1))^2-64*(S*(S+1))^3+ \\
& N^6- \\
& N^5*6*K + \\
& N^4*(-8+12*K^2- 12*S*(S+1))+ \\
& N^3*(32*K-8*K^3+48*K*S*(S+1))+ \\
& N^2*(16-48*K^2+(48-32*K-64*K^2)*S*(S+1)+48*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(-32*K+32*K^3+(-96*K+64*K^2+32*K^3)*S*(S+1)- \\
& 96*K*(S*(S+1))^2))/ \\
& (32*(-2+K)*(-1+K)^2*K^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B[5,2]} = & ((-576*K+576*K^3)*S*(S+1)+ \\
& (576-384*K+192*K^2)*(S*(S+1))^2-192*(S*(S+1))^3- \\
& 9*N^6 \\
& N^5*54*K + \\
& N^4*(72-108*K^2+60*S*(S+1))+ \\
& N^3*(-288*K+72*K^3-240*K*S*(S+1))+ \\
& N^2*(-144+432*K^2+ \\
& (-240+480*K+384*K^2)*S*(S+1)-48*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(288*K-288*K^3+(480*K-960*K^2-288*K^3)*S*(S+1)+ \\
& 96*K*(S*(S+1))^2))/ \\
& (32*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)*K^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B[5,3]} = & ((-576*K-576*K^2+576*K^3+576*K^4)*S*(S+1) + \\
& (576-2112*K-1728*K^2+960*K^3)*(S*(S+1))^2+ \\
& (2112-960*K)*(S*(S+1))^3+ \\
& N^6*(-9-9*K)+ \\
& N^5*(54*K+54*K^2)+ \\
& N^4*(72+72*K-108*K^2-108*K^3+ \\
& (204+12*K)*S*(S+1))+ \\
& N^3*(-288*K-288*K^2+72*K^3+72*K^4+(-816*K-48*K^2)*S*(S+1))+ \\
& N^2*(-144-144*K+432*K^2+432*K^3+ \\
& (-816-144*K+1632*K^2+192*K^3)*S*(S+1)+ \\
& (-1200+336*K)*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(288*K+288*K^2-288*K^3-288*K^4+ \\
& (1632*K+288*K^2-1632*K^3-288*K^4)*S*(S+1)+ \\
& (2400*K-672*K^2)*(S*(S+1))^2))/ \\
& (32*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)^2*K^2*(1+K));
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B[5,4] = & ((3840*K-10688*K^2-1152*K^3+11776*K^4- \\
& 2688*K^5-1088*K^6)*S*(S+1)+ \\
& (-3840+5056*K-19456*K^2+15360*K^3- \\
& 2048*K^4-1216*K^5)*(S*(S+1))^2+ \\
& (11520-12608*K+4992*K^2-832*K^3)*(S*(S+1))^3+ \\
& N^6*(60-39*K-54*K^2-15*K^3)+ \\
& N^5*(-360*K+234*K^2+324*K^3+90*K^4)+ \\
& N^4*(-480+696*K+1344*K^2-732*K^3-840*K^4-180*K^5+ \\
& (240+1572*K-792*K^2-444*K^3)*S*(S+1))+ \\
& N^3*(1920*K-2784*K^2-2976*K^3+1368*K^4+1200*K^5+120*K^6+ \\
& (-960*K-6288*K^2+3168*K^3+1776*K^4)*S*(S+1))+ \\
& (S*(S+1))^3 \\
& N^2*(960-2160*K-2976*K^2+5472*K^3+2592*K^4-1584*K^5-768*K^6+ \\
& (-960-8976*K+11776*K^2+9008*K^3- \\
& 6496*K^4-2048*K^5)*S*(S+1)+ \\
& (-4800+1584*K+2784*K^2-1872*K^3)*(S*(S+1))^2)+ \\
& N*(-1920*K+4320*K^2+2112*K^3-5376*K^4-192*K^5+1056*K^6+ \\
& (1920*K+17952*K^2-21632*K^3-5440*K^4+ \\
& 6656*K^5+544*K^6)*S*(S+1)+ \\
& (9600*K-3168*K^2-5568*K^3+3744*K^4)*(S*(S+1))^2)/ \\
& (32*(-5+K)*(-4+K)*(-3+K)*(-2+K)*(-1+K)^2*K^2*(1+K))
\end{aligned}$$

4.6.- LIMITE DE BASE COMPLETA

4.6.1.- Coeficientes de propagación S_2 -adaptados en base completa.

En la sección anterior hemos obtenido los coeficientes de propagación S_2 -adaptados correspondientes a los momentos centrados segundo, tercero y cuarto. Tales coeficientes han sido evaluados en función de S , N y K . EN el presente apartado nos interesa el valor de los mismos en el límite ($K \rightarrow \infty$) de base completa para poder, a continuación, analizar el comportamiento de los momentos también en la situación límite de base completa. Puesto que en el límite $K \rightarrow \infty$ los coeficientes de propagación S_2 -adaptados resultan ser sumas de infinitésimos de distinto orden, nosotros escogemos únicamente el de menor orden (es decir, el que tiende a cero menos rápidamente al aumentar K)[†] y los expresamos en función de las cantidades $a^{\pm}(N,S)$ definidas en la ecuación 4.2. Si suponemos despreciables como sumandos los infinitésimos de orden superior al menor, podemos admitir que el infinitésimo de menor orden resulta ser el coeficiente de propagación S_2 -adaptado en el límite de base completa. Tales coeficientes vienen dados en la Tablas 4.7, 4.8 y 4.9 para el segundo tercer y cuarto momento respectivamente.

[†] Nótese que aunque los coeficientes de propagación tienden a cero en el límite de base completa, los momentos deben permanecer finitos. Ello es posible porque los momentos son sumas de productos de coeficientes de propagación por factores de interacción (los cuales tienden a infinito en este mismo límite) de modo que los momentos resultan ser sumas de numeros finitos y, eventualmente, infinitésimos.

Tabla 4.7.- Coeficientes de propagación S_2 -adaptados en el límite de base completa para el segundo momento centrado.


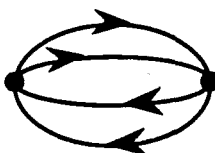


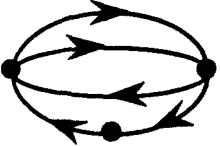
Diagrama H. y \hat{P} de referencia	[s]	$\mathfrak{B}[i,j]$
<p style="text-align: center;">1</p>  <p style="text-align: center;">(13)</p>	<p>(++)</p> <p>(+-)</p> <p>(--)</p>	<p>$\mathfrak{B}[1,1]=2 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[1,2]=12 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[1,3]=2 (-2 + N) (4 a^- - 3 a^+)/K^3$</p>
<p style="text-align: center;">2</p>  <p style="text-align: center;">(13)(24)</p>	<p>(++)</p> <p>(--)</p>	<p>$\mathfrak{B}[2,1]=2 a^+/K^2$</p> <p>$\mathfrak{B}[2,2]=2 a^-/K^2$</p>

Tabla 4.8.- Coeficientes de propagación S_2 -adaptados en el límite de base completa para el tercer momento centrado.

Diag. de H. y \hat{P} de referencia	[s]	$\mathfrak{B}[i,j]$
<p style="text-align: center;">1</p>  <p style="text-align: center;">(135)</p>	<p>(+++)</p> <p>(++-)</p> <p>(+--)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[1,1] = -4 a^+ (-3 + N - a^- + a^+)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[1,2] = 12 a^+ (3 - 3 N + a^- + 3 a^+)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[1,3] = 12 a^+ (15 - 9 N + 5 a^- + 3 a^+)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[1,4] = (96 a^- - 64 N a^- + 32 a^{-2} - 132 a^+ + 84 N a^+ - 12 a^- a^+ - 36 a^{+2})/(16 K^4)$</p>
<p style="text-align: center;">2</p>  <p style="text-align: center;">(13)(45)</p>	<p>(+++)</p> <p>(-++)</p> <p>(+-+)</p> <p>(---)</p> <p>(--+)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[2,1] = (-12 N a^+ + 24 a^{+2})/K^2$</p> <p>$\mathfrak{B}[2,2] = -24 a^+ (-6 + 3 N - 2 a^-)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[2,3] = (-36 N a^+ + 72 a^{+2})/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[2,4] = -72 a^+ (-6 + 3 N - 2 a^-)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[2,5] = 12 a^+ (12 - 9 N + 4 a^- + 6 a^+)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[2,6] = (288 a^- - 192 N a^- + 96 a^{-2} - 432 a^+ + 252 N a^+ - 48 a^- a^+ - 72 a^{+2})/K^4$</p>
<p style="text-align: center;">3</p>  <p style="text-align: center;">(236)(15)</p>	<p>(+++)</p> <p>(+-+)</p> <p>(--+)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[3,1] = 6 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,2] = 18 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,3] = 18 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,4] = 6 (-2 + N) (4 a^- - 3 a^+)/K^3$</p>

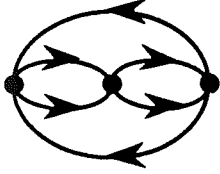
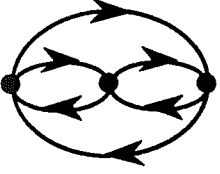
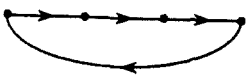
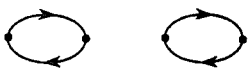
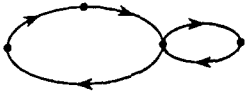
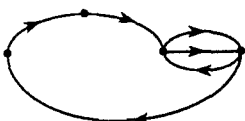
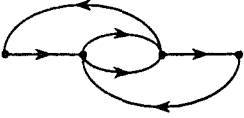
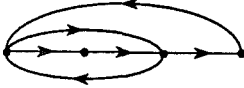
<p style="text-align: center;"><u>4</u></p>  <p style="text-align: center;">(153)(264)</p>	<p>(+++)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[4,1]=2 a^+/K^2$</p> <p>$\mathfrak{B}[4,2]=2 a^-/K^2$</p>
<p style="text-align: center;"><u>5</u></p>  <p style="text-align: center;">(13)(26)(45)</p>	<p>(+++)</p> <p>(-++)</p> <p>(---+)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[5,1]=-2 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[5,2]=18 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[5,3]=18 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[5,4]=2 (-2 + N) (8 a^- - 9 a^+)/K^3$</p>


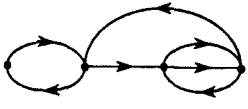
Tabla 4.9.- Coeficientes de propagación S_2 -adaptados en el límite de base completa para el cuarto momento centrado.

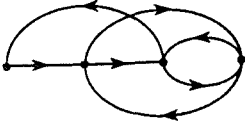
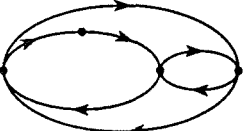

Diagr. de H. y \hat{P} de referencia	[s]	$\mathfrak{B}[i,j]$
<p style="text-align: center;">1</p>  <p style="text-align: center;">(1864)</p>	(++++)	$\mathfrak{B}[1,1]=2 a^+ (-24 - 10 a^- + 14 a^+ + 9 N + 2 a^- N - 4 a^+ N)/K^5$
	(+++)	$\mathfrak{B}[1,2]=8 a^+ (-24 - 14 a^- - 6 a^+ + 15 N + 2 a^- N)/K^5$
	(---+)	$\mathfrak{B}[1,3]=8 a^+ (-24 - 26 a^- - 66 a^+ + 33 N + 2 a^- N + 12 a^+ N)/K^5$
	(-+++)	$\mathfrak{B}[1,4]=4 a^+ (-24 - 26 a^- - 66 a^+ + 33 N + 2 a^- N + 12 a^+ N)/K^5$
	(---)	$\mathfrak{B}[1,5]=72 a^+ (-24 - 14 a^- - 6 a^+ + 15 N + 2 a^- N)/K^5$
	(---)	$\mathfrak{B}[1,6]=2 (-384 a^- - 256 a^{-2} + 744 a^+ + 214 a^- a^+ + 366 a^{+2} + 288 a^- N + 32 a^{-2} N - 519 a^+ N - 30 a^- a^+ N - 36 a^{+2} N)/K^5$


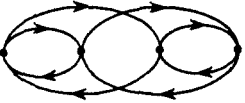
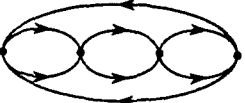
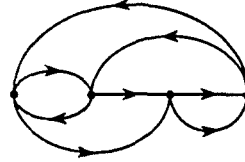
<p style="text-align: center;">2</p>  <p style="text-align: center;">(13)(58)</p>	<p>(++++)</p>	$\mathfrak{B}[2,1]=12 a^+ (8 a^- + 28 a^+ + 2 a^- a^+ + 2 a^{+2} - 6 N - a^- N - 9 a^+ N)/K^6$
	<p>(+++—)</p>	$\mathfrak{B}[2,2]=144 a^+ (8 a^- + 28 a^+ + 2 a^- a^+ + 2 a^{+2} - 6 N - a^- N - 9 a^+ N)/K^6$
	<p>(—++)</p>	$\mathfrak{B}[2,3]=24 a^+ (240 + 176 a^- + 8 a^{-2} + 36 a^+ + 2 a^- a^+ - 6 a^{+2} - 150 N - 41 a^- N + 15 a^+ N)/K^6$
	<p>(—+—)</p>	$\mathfrak{B}[2,4]=432 a^+ (8 a^- + 28 a^+ + 2 a^- a^+ + 2 a^{+2} - 6 N - a^- N - 9 a^+ N)/K^6$
	<p>(—+—)</p>	$\mathfrak{B}[2,5]=144 a^+ (240 + 176 a^- + 8 a^{-2} + 36 a^+ + 2 a^- a^+ - 6 a^{+2} - 150 N - 41 a^- N + 15 a^+ N)/K^6$
	<p>(——)</p>	$\mathfrak{B}[2,6]=12 (960 a^- + 928 a^{-2} + 32 a^{-3} - 2400 a^+ - 1000 a^- a^+ - 16 a^{-2} a^+ - 948 a^{+2} - 30 a^- a^{+2} + 18 a^{+3} - 768 a^- N - 192 a^{-2} N + 1626 a^+ N + 239 a^- a^+ N + 39 a^{+2} N)/K^6$

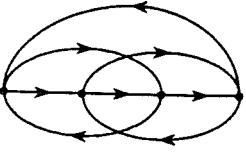
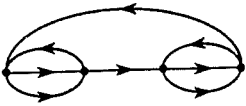
<p style="text-align: center;">3</p>  <p style="text-align: center;">(153)(68)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(++++)</p> <p>(+++)</p> <p>(---+)</p> <p>(-++)</p> <p>(+--)</p> <p>(--+)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[3,1]=24 a^+ (-2 a^- - 10 a^+ + 3 N + 2 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,2]=144 a^+ (-2 a^- - 10 a^+ + 3 N + 2 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,3]=72 a^+ (-2 a^- - 10 a^+ + 3 N + 2 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,4]=24 a^+ (-48 - 22 a^- + 18 a^+ + 21 N + 4 a^- N - 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,5]=24 a^+ (-96 - 50 a^- + 6 a^+ + 51 N + 8 a^- N - 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,6]=432 a^+ (-2 a^- - 10 a^+ + 3 N + 2 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,7]=48 a^+ (-48 - 34 a^- - 42 a^+ + 39 N + 4 a^- N + 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,8]=24 a^+ (-48 - 34 a^- - 42 a^+ + 39 N + 4 a^- N + 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,9]=72 a^+ (-96 - 50 a^- + 6 a^+ + 51 N + 8 a^- N - 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,10]=72 a^+ (-48 - 34 a^- - 42 a^+ + 39 N + 4 a^- N + 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,11]=48 a^+ (-240 - 134 a^- - 30 a^+ + 141 N + 20 a^- N - 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[3,12]=24 (-384 a^- - 256 a^{-2} + 816 a^+ + 238 a^- a^+ + 294 a^{+2} + 288 a^- N + 32 a^{-2} N - 537 a^+ N - 36 a^- a^+ N - 18 a^{+2} N)/K^5$</p>
<p style="text-align: center;">4</p>  <p style="text-align: center;">(2763)(58)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(---+)</p> <p>(+--)</p> <p>(--+)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[4,1]=16 a^+ (3 + a^- - a^+ - N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[4,2]=32 a^+ (3 + a^- + 3 a^+ - 3 N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[4,3]=16 a^+ (15 + 5 a^- + 3 a^+ - 9 N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[4,4]=16 a^+ (3 + a^- + 3 a^+ - 3 N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[4,5]=32 a^+ (15 + 5 a^- + 3 a^+ - 9 N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[4,6]=16 (24 a^- + 8 a^{-2} - 33 a^+ - 3 a^- a^+ - 9 a^{+2} - 16 a^- N + 21 a^+ N)/K^4$</p>

<p style="text-align: center;">5</p>  <p style="text-align: center;">(476)(253)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(-++)</p> <p>(+--)</p> <p>(---)</p> <p>(----)</p>	$\mathfrak{B}[5,1]=16 a^+ (2 a^- - N)/K^4$ $\mathfrak{B}[5,2]=32 a^+ (6 + 2 a^- - 3 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[5,3]=16 a^+ (12 + 4 a^- + 6 a^+ - 9 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[5,4]=48 a^+ (2 a^+ - N)/K^4$ $\mathfrak{B}[5,5]=96 a^+ (6 + 2 a^- - 3 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[5,6]=16 (24 a^- + 8 a^{-2} - 36 a^+ - 4 a^- a^+ - 6 a^{+2} - 16 a^- N + 21 a^+ N)/K^4$
<p style="text-align: center;">6</p>  <p style="text-align: center;">(2853)(16)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(+--)</p> <p>(---)</p> <p>(+--)</p> <p>(+--)</p> <p>(---)</p> <p>(---)</p> <p>(---)</p>	$\mathfrak{B}[6,1]=8 a^+ (3 + a^- + a^+ - 2 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[6,2]=16 (3 + a^- - 3 a^+) a^+/K^4$ $\mathfrak{B}[6,3]=48 a^+ (3 + a^- + a^+ - 2 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[6,4]=32 a^+ (-3 - a^- + 3 a^+)/K^4$ $\mathfrak{B}[6,5]=8 a^+ (3 + a^- + 9 a^+ - 6 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[6,6]=72 a^+ (3 + a^- + a^+ - 2 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[6,7]=16 a^+ (33 + 11 a^- + 3 a^+ - 18 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[6,8]=16 (3 + a^- - 3 a^+) a^+/K^4$ $\mathfrak{B}[6,9]=8 (48 a^- + 16 a^{-2} - 69 a^+ - 7 a^- a^+ - 15 a^{+2} - 32 a^- N + 42 a^+ N)/K^4$

<p style="text-align: center;">Z</p>  <p style="text-align: center;">(23)(45)(67)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(+---)</p> <p>(----)</p> <p>(-+-)</p> <p>(--+)</p> <p>(-+-)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[7,1]=24 a^+ (-2 a^- - 10 a^+ + 3 N + 2 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[7,2]=144 a^+ (-2 a^- - 10 a^+ + 3 N + 2 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[7,3]=144 a^+ (-2 a^- - 10 a^+ + 3 N + 2 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[7,4]=48 a^+ (-96 - 50 a^- + 6 a^+ + 51 N + 8 a^- N - 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[7,5]=432 a^+ (-2 a^- - 10 a^+ + 3 N + 2 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[7,6]=24 a^+ (-96 - 50 a^- + 6 a^+ + 51 N + 8 a^- N - 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[7,7]=216 a^+ (-2 a^- - 10 a^+ + 3 N + 2 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[7,8]=144 a^+ (-96 - 50 a^- + 6 a^+ + 51 N + 8 a^- N - 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[7,9]=48 a^+ (-192 - 118 a^- - 78 a^+ + 129 N + 16 a^- N + 6 a^+ N)/K^5$</p> <p>$\mathfrak{B}[7,10]=24 (-384 a^- - 256 a^{-2} + 864 a^+ + 254 a^- a^+ + 246 a^{+2} + 288 a^- N + 32 a^{-2} N - 549 a^+ N - 40 a^- a^+ N - 6 a^{+2} N)/K^5$</p>
<p style="text-align: center;">g</p>  <p style="text-align: center;">(475)(23)(68)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(+---)</p> <p>(----)</p> <p>(-+-)</p> <p>(--+)</p> <p>(-+-)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[8,1]=48 a^+ (2 a^+ - N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[8,2]=48 a^+ (6 + 2 a^- - 3 N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[8,3]=144 a^+ (2 a^+ - N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[8,4]=144 a^+ (6 + 2 a^- - 3 N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[8,5]=48 a^+ (6 + 2 a^- - 3 N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[8,6]=48 a^+ (12 + 4 a^- + 6 a^+ - 9 N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[8,7]=144 a^+ (6 + 2 a^- - 3 N)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[8,8]=48 (24 a^- + 8 a^{-2} - 36 a^+ - 4 a^- a^+ - 6 a^{+2} - 16 a^- N + 21 a^+ N)/K^4$</p>

<p style="text-align: center;"><u>9</u></p>  <p style="text-align: center;">(253)(68)(47)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(+---)</p> <p>(+++)</p> <p>(---)</p> <p>(-+-)</p> <p>(+-+)</p> <p>(-++)</p> <p>(--+)</p> <p>(-+-)</p> <p>(+--)</p> <p>(---)</p>	$\mathfrak{B}[9,1]=16 a^+ (-3 - a^- - 3 a^+ + 3 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,2]=16 a^+ (-15 - 5 a^- - 3 a^+ + 9 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,3]=32 a^+ (3 + a^- + 15 a^+ - 9 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,4]=16 a^+ (21 + 7 a^- - 3 a^+ - 9 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,5]=32 a^+ (51 + 17 a^- + 3 a^+ - 27 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,6]=16 a^+ (33 + 11 a^- + 21 a^+ - 27 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,7]=16 a^+ (-3 - a^- + 21 a^+ - 9 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,8]=32 a^+ (15 + 5 a^- + 3 a^+ - 9 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,9]=16 a^+ (57 + 19 a^- - 3 a^+ - 27 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,10]=32 a^+ (39 + 13 a^- + 15 a^+ - 27 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,11]=16 a^+ (93 + 31 a^- - 3 a^+ - 45 N)/K^4$ $\mathfrak{B}[9,12]=16 (144 a^- + 48 a^{-2} - 255 a^+ - 37 a^- a^+ - 51 a^{+2} - 96 a^- N + 153 a^+ N)/K^4$
<p style="text-align: center;"><u>10</u></p>  <p style="text-align: center;">(1754)(286)</p>	<p>(---)</p> <p>(+---)</p> <p>(-+-)</p> <p>(---)</p>	$\mathfrak{B}[10,1]=8 a^+ (-2 + N)/K^3$ $\mathfrak{B}[10,2]=24 a^+ (-2 + N)/K^3$ $\mathfrak{B}[10,3]=24 a^+ (-2 + N)/K^3$ $\mathfrak{B}[10,4]=8 (-2 + N) (4 a^- - 3 a^+) /K^3$
<p style="text-align: center;"><u>11</u></p>  <p style="text-align: center;">(23)(57)(68)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(-+-)</p> <p>(-+-)</p> <p>(---)</p>	$\mathfrak{B}[11,1]=12 a^+ (3 N - 2 a^- - 10 a^+ + 2 N a^+) /K^5$ $\mathfrak{B}[11,2]=72 a^+ (3 N - 2 a^- - 10 a^+ + 2 N a^+) /K^5$ $\mathfrak{B}[11,3]= -12 a^+ (96 - 51 N + 50 a^- - 8 N a^- - 6 a^+ + 6 N a^+) /K^5$ $\mathfrak{B}[11,4]= -12 a^+ (24 - 15 N + 14 a^- - 2 N a^- + 6 a^+) /K^5$ $\mathfrak{B}[11,5]= -72 a^+ (24 - 15 N + 14 a^- - 2 N a^- + 6 a^+) /K^5$ $\mathfrak{B}[11,6]= (-1152 a^- + 864 N a^- - 768 a^{-2} + 96 N a^{-2} + 2016 a^+ - 1260 N a^+ + 408 a^- a^+ - 72 N a^- a^+ + 504 a^{+2}) /K^5$

<p style="text-align: center;"><u>12</u></p>  <p style="text-align: center;">(13)(24)(57)(68)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-++)</p> <p>(——)</p>	<p>$\mathfrak{B}[12,1]=(-6 N a^+ + 12 a^+ ^2)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[11,2]=-12 a^+ (-6 + 3 N - 2 a^-)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[11,3]=(36 a^- - 24 N a^- + 12 a^-^2 - 36 a^+ + 18 N a^+)/K^4$</p>
<p style="text-align: center;"><u>13</u></p>  <p style="text-align: center;">(13)(25)(47)(68)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(-++)</p> <p>(-++)</p> <p>(——+)</p> <p>(——)</p>	<p>$\mathfrak{B}[13,1]=4 a^+ (3 - 6 N + a^- + 9 a^+)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[13,2]=16 a^+ (-3 - a^- + 3 a^+)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[13,3]=-16 a^+ (-39 + 18 N - 13 a^- + 3 a^+)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[13,4]=8 a^+ (3 - 18 N + a^- + 33 a^+)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[13,5]=16 a^+ (69 - 36 N + 23 a^- + 3 a^+)/K^4$</p> <p>$\mathfrak{B}[13,6]= (576 a^- - 384 N a^- + 192 a^-^2 - 1140 a^+ + 648 N a^+ - 188 a^- a^+ - 156 a^+ ^2)/K^4$</p>
<p style="text-align: center;"><u>14</u></p>  <p style="text-align: center;">(1753)(2864)</p>	<p>(++++)</p> <p>(——)</p>	<p>$\mathfrak{B}[14,1]=2 a^+/K^2$</p> <p>$\mathfrak{B}[14,2]=2 a^-/K^2$</p>
<p style="text-align: center;"><u>15</u></p>  <p style="text-align: center;">(486)(275)(13)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(-++)</p> <p>(+——)</p> <p>(+——)</p> <p>(——)</p>	<p>$\mathfrak{B}[15,1]=-8 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[15,2]=48 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[15,3]=24 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[15,4]=24 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[15,5]=48 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[15,6]=8 (-2 + N) (8 a^- - 9 a^+)/K^3$</p>

<p style="text-align: center;"><u>16</u></p>  <p style="text-align: center;">(2763)(15)(48)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-+++)</p> <p>(-++)</p> <p>(+--)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[16,1]=2 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[16,2]=24 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[16,3]=-24 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[16,4]=36 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[16,5]=24 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[16,6]=2 (-2 + N) (16 a^- - 15 a^+)/K^3$</p>
<p style="text-align: center;"><u>17</u></p>  <p style="text-align: center;">(2754)(13)(68)</p>	<p>(++++)</p> <p>(-++)</p> <p>(---)</p>	<p>$\mathfrak{B}[17,1]=4 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[17,1]=24 a^+ (-2 + N)/K^3$</p> <p>$\mathfrak{B}[17,1]=4 (-2 + N) (4 a^- - 3 a^+)/K^3$</p>

De las tablas anteriores se infiere que cualquier coeficiente S_2 -adaptado (correspondiente a cualquier momento) viene dado, en el límite de base completa, por:

$$\mathfrak{B}(i, j) = \frac{f(N, a^+, a^-)}{K^h} \quad (4.37)$$

Para cualquier momento, los infinitésimos $\mathfrak{B}(i, j)$ asociados a un diagrama de Hugenholtz i , tienen un valor del exponente h que coincide con la diferencia entre $2n$ ($n = 2, 3, 4$, para segundo, tercer y cuarto momento, respectivamente) y el máximo número de enganches superiores que presentan los coeficientes de propagación no adaptados asociados a dicho diagrama.

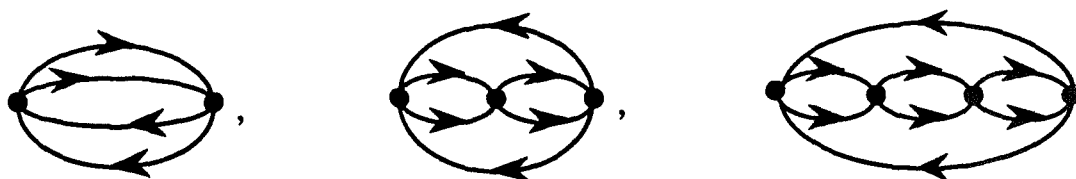
Por ejemplo, en el caso del diagrama de Hugenholtz 3 del tercer momento (ver sección 4.4.2), los coeficientes de propagación no-adaptados tienen a lo sumo tres enganches superiores. Tenemos que $h = 2 \cdot 3 - 3 = 3$ y, por tanto, en el límite de base completa, los coeficientes de propagación S_2 -adaptados presentarán un infinitésimo de menor orden dado por:

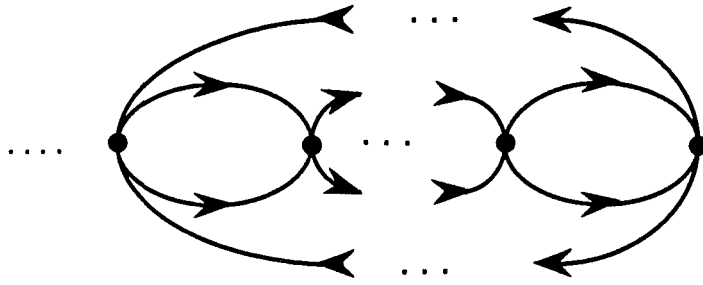
$$\mathfrak{B}(i, j) = \frac{f(N, a^+, a^-)}{K^3}$$

como puede comprobarse en la tabla 4.8.

Una demostración general de esta propiedad de los coeficientes de propagación S_2 -adaptados en el límite de base completa resulta directa a partir de la aplicación de (i) Teorema de Wick, (ii) ecuación (1.44) y (iii) ecuación (1.42), por este orden.

Resulta especialmente llamativo el hecho de que para cada momento, tenemos un único diagrama de Hugenholtz cuyos coeficientes de propagación S_2 -adaptados tienen, en el límite de base completa, un infinitésimo de menor orden cuyo denominador es K^2 ($h = 2$); siendo este valor de h el menor posible. Tal diagrama es, como puede comprobarse,





para el segundo, tercer, cuarto y un momento arbitrario superior, respectivamente. Tales diagramas tienen asociados coeficientes de propagación no adaptados que presentan un número máximo posible de enganches superiores. Es decir, $\langle\langle 2n_{2n2} \rangle\rangle$ (ciclo de $2n$ índices con $(2n-2)$ enganches superiores) y $\langle\langle n_{n-1} n_{n-1} \rangle\rangle$ (dos ciclos de n índices con $n-1$ enganches superiores cada uno de ellos). Dado que las anteriores trazas presentan el número máximo de enganches superiores, resulta que aquellos coeficientes de propagación S_2 -adaptados que las contengan, presentarán el menor valor posible de h en el límite de base completa (ver ecuación (4.37)).

4.6.2- Momentos en el límite de base completa.

Una situación interesante relacionada con el problema de la reducción se presenta cuando estudiamos el comportamiento de los momentos en el límite de base completa.

El primer momento o energía promedio de un sistema N-electrónico, acoplado a un spin S y determinado en un espacio FCI, ha sido expresado (Bancewic y Karwowski 1987) en función de las energías promedio de un par efectivo singulete de electrones, $\bar{\xi}(2,0)$, y de un par de electrones con acoplamiento triplete, $\bar{\xi}(2,1)$. Puesto que la energía promedio de un par de electrones con acoplamiento singulete o triplete debe ser finita en el límite de base completa, de la ecuación (4.3) se deduce que

$$\lim_{K \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{K(K + \delta)} \sum_{p,q}^K (\{p p | q q\} + \delta \{p p | q q\}) \right)$$

debe ser finito; lo cual implica que $\sum_{p,q}^K \{p p | q q\}$ y $\sum_{p,q}^K \{p q | q p\}$ son proporcionales a K^2 en dicho límite[†].

Consideremos ahora el segundo momento. La Tabla 4.7 nos indica que hay dos diagramas de Hugenholtz a considerar. Los factores de interacción asociados al primero de ellos son los que multiplican los coeficientes de propagación $\mathfrak{B}(1,i)$, $i=1,2,3$, y sus expresiones son:

$$\text{Tr} (J^2 + K^2 + 2 J K); \quad \text{Tr} (J^2 - K^2); \quad \text{Tr} (J^2 + K^2 - 2 J K),$$

donde las matrices J_{pq} y K_{pq} representan $\frac{1}{2} \sum_a^K \{p q | a a\}$ y $\frac{1}{2} \sum_a^K \{a p | q a\}$.

Puesto que en el límite de base completa estas matrices son matrices escalares (Bancewicz y Karwowski 1987), esto es, un escalar multiplicado por la matriz unidad, los tres factores de interacción anteriores son, en dicho límite de orden $\mathcal{O}(K^2)$ (siendo K el número de orbitales), esto es, infinitos de segundo orden.

[†] Una demostración directa de ello viene dada en J. Karwowski, C. Valdemoro and L.Lain, Phys. Rev A 39 (1988) 4967

La tabla 4.7 nos indica que los coeficientes de propagación $\mathfrak{B}(1,i)$, $i = 1,2,3$, son infinitésimos de tercer orden en este mismo límite y, en consecuencia, concluimos que el diagrama de Hugenholtz etiquetado como 1 en la Tabla 4.7 presenta una contribución nula al segundo momento en el límite de base completa.

La contribución del otro diagrama de Hugenholtz de la Tabla 4.7 debe ser, pues, no nula. Vemos en dicha tabla que los coeficientes de propagación $\mathfrak{B}(2,i)$, $i = 1,2$, son infinitésimos de segundo orden. En consecuencia los factores de interacción asociados,

$$\sum_{ijkl}^K \{ \{ij|kl\} + (-1)^s \{ij|lk\} \}^2, \quad s = 0,1$$

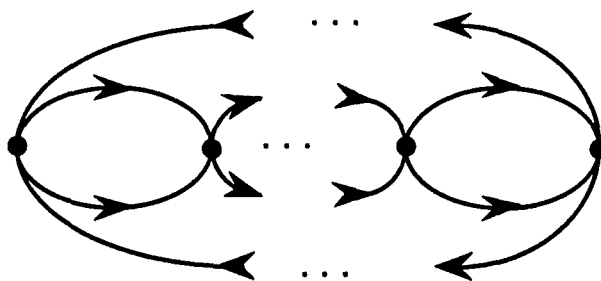
deben ser, de nuevo, infinitos de segundo orden.

Si consideramos el tercer momento, el factor de interacción asociado al diagrama 4 de la Tabla 4.8,

$$\sum_{ijklpq}^K \{ \{ij|kl\} + (-1)^s \{ij|lk\} \} \{ \{pq|ij\} + (-1)^s \{pq|ji\} \} \{ \{jp|iq\} + (-1)^s \{jp|qi\} \}$$

donde $s = 0,1$, también debe ser un infinitésimo de orden 2 (puesto que el tercer momento de un sistema de 2 electrones debe ser finito), etc.

Vemos que en el límite de base completa, los factores de interacción resultan ser infinitos de orden $\mathcal{O}(K^2)$. Por consiguiente, en dicho límite, las únicas contribuciones al momento μ_n son aquellas que derivan de los diagramas de Hugenholtz tipo "paralelo" siguientes:



Esto es así debido a que los coeficientes de propagación S_2 -adaptados en el límite de base completa asociados a dicho tipo de diagramas, son los únicos que tiene K^2 en el denominador (los restantes tienen K^h con $h > 2$).

Llegados a este punto vamos a demostrar que las expresiones 4.1 y 4.4 encontrada para el primer y segundo momentos en el límite de base completa son casos particulares de una única ecuación general en dicho límite que relaciona el n-ésimo momento μ_n (n arbitrario) del sistema N electrónico S_2 -adaptado con los correspondientes momentos μ_n del par efectivo de electrones con acoplamiento de spin singulete y triplete, respectivamente.

En efecto, si partimos de la ecuación (4.30),

$$\mu_n(N, S, K) = \sum_k^m \mathbf{A}^k \mathbf{B}^k$$

extrayendo del sumatorio el término ℓ correspondiente al diagrama de Hugenholtz "paralelo", tenemos que:

$$\mu_n(N, S, K) = \mathbf{A}^\ell \mathbf{B}^\ell + \sum_{k \neq \ell}^{m-1} \mathbf{A}^k \mathbf{B}^k \quad (4.38)$$

Al imponer la restricción de base completa, el sumatorio según $k \neq \ell$ de la ecuación anterior se anula, ya que cualquier coeficiente $\mathfrak{B}(i,j)$, $i \neq \ell$, en el límite de base completa, resulta ser proporcional a K^{-h} ($h > 2$), mientras que los factores de interacción lo son a K^2 . Por consiguiente podemos escribir,

$$\begin{aligned} \mu_n(N, S, K \rightarrow \infty) &= \lim_{K \rightarrow \infty} (\mathbf{A}^\ell \mathbf{B}^\ell) \\ &= \alpha_\ell(++++\dots+) \mathfrak{B}(\ell, 1) + \alpha_\ell(-\dots- -) \mathfrak{B}(\ell, 2) \\ &= \alpha_\ell(++++\dots+) \frac{2 a^+(N, S)}{K^2} + \alpha_\ell(-\dots- -) \frac{2 a^-(N, S)}{K^2} \end{aligned} \quad (4.39)$$

Si particularizamos la ecuación (4.39) para $(N=2, S=0)$, y $(N=2, S=1)$ y tenemos en cuenta que, (ver ecuación (4.2)),

$$a^+(2,0) = 1, \quad a^+(2,1) = 0, \quad a^-(2,0) = 0, \quad \text{y} \quad a^-(2,1) = 1,$$

obtenemos

$$\mu_n(2, 0, K \rightarrow \infty) = \frac{2}{K^2} \alpha_\ell(++++\dots+) \quad (4.40)$$

$$\mu_n(2, 1, K \rightarrow \infty) = \frac{2}{K^2} \mathcal{Q}_\ell(\dots) . \quad (4.41)$$

Llevando las ecuaciones (4.40) y (4.41) a la ecuación (4.39) podemos, finalmente, escribir:

$$\mu_n(N, S, K \rightarrow \infty) = a^+(N, S) \mu_n(2, 0, K \rightarrow \infty) + a^-(N, S) \mu_n(2, 1, K \rightarrow \infty) \quad (4.42)$$

APENDICES

APENDICE 1

· APENDICE 1.- Trazas de q-RDOs no diagonales. Deducción de la ecuación (1.44) y construcción de la tabla de coeficientes $C_{j([\hat{P}]})$ hasta S_8 .

Teniendo en cuenta las ecuaciones (1.37) y (1.40), obtenemos

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle {}^q E_{|kji\dots}^{ijkl\dots} \right\rangle\right\rangle &= \left\langle\left\langle {}^q E_{\hat{P}[ijkl\dots]}^{ijkl\dots} \right\rangle\right\rangle = \\ &\varepsilon(\hat{P}) \sum_S \chi^S(\hat{P}) \left\langle\left\langle \sum_M B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0}^+ B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0} \right\rangle\right\rangle \end{aligned} \quad (a1.1)$$

Puesto que sabemos evaluar la traza de ${}^q E_{\hat{P}[ijkl\dots]}^{ijkl\dots}$ cuando \hat{P} es la identidad (sección 1.8.1), hacemos

$$\chi^S(\hat{P}) = \chi^S(\hat{E}) + [\chi^S(\hat{P}) - \chi^S(\hat{E})] \quad (a1.2)$$

(siendo $\chi^S(\hat{E})$ el carácter del operador identidad).

De (a1.1) y (a1.2) obtenemos

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle {}^q E_{\hat{P}[ijkl\dots]}^{ijkl\dots} \right\rangle\right\rangle &= \varepsilon(\hat{P}) \sum_S \chi^S(\hat{E}) \left\langle\left\langle \sum_M B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0}^+ B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0} \right\rangle\right\rangle + \\ &\varepsilon(\hat{P}) \sum_S (\chi^S(\hat{P}) - \chi^S(\hat{E})) \left\langle\left\langle \sum_M B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0}^+ B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0} \right\rangle\right\rangle \end{aligned} \quad (a1.3)$$

Notese que

$$\sum_S \chi^S(\hat{E}) \left\langle\left\langle \sum_M B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0}^+ B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0} \right\rangle\right\rangle \equiv$$

$$\left\langle\left\langle \sum_{S, M, \lambda} B_{(ijkl\dots)SM\lambda}^+ B_{(ijkl\dots)SM\lambda} \right\rangle\right\rangle \equiv \left\langle\left\langle {}^q E_{|kji\dots}^{ijkl\dots} \right\rangle\right\rangle \equiv \left\langle\left\langle n_1 n_2 \dots n_q \right\rangle\right\rangle_{N, K, S} \quad (\text{a1.4})$$

Por otra parte, para el valor máximo de S, las funciones de spin son totalmente simétricas y, por tanto, todos los caracteres son iguales a 1. Si hacemos:

$$\chi^S(\hat{P}) - \chi^S(\hat{E}) = C_q^S \quad (\text{a1.5})$$

tendremos

$$\chi^{S_{\max}}(\hat{P}) - \chi^{S_{\max}}(\hat{E}) = C_q^{S_{\max}} = 0 \quad (\text{a1.6})$$

Por consiguiente, si tenemos en cuenta (a1.4), (a1.5) y (a1.6), la ecuación (a1.3) queda:

$$\left\langle\left\langle {}^q E_{\hat{P}[ijkl\dots]}^{ijkl\dots} \right\rangle\right\rangle = \varepsilon(\hat{P}) \left\langle\left\langle n_1 n_2 \dots n_q \right\rangle\right\rangle_{N, K, S} + \varepsilon(\hat{P}) \sum_S^{S_{\max}-1} C_q^S \left\langle\left\langle \sum_M B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0}^+ B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0} \right\rangle\right\rangle. \quad (\text{a1.7})$$

Consideremos ahora el segundo sumando de la derecha de la ecuación anterior (a1.7). Si le llamamos T_1 tendremos

$$T_1 = \varepsilon(\hat{P}) \sum_S^{S_{\max}-1} C_q^S \left\langle\left\langle \sum_M B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0}^+ B_{(ijkl\dots)SM\lambda_0} \right\rangle\right\rangle$$

Puesto que el término correspondiente a S_{\max} no existe, podemos expresar T_1 como

$$T_1 = \varepsilon(\hat{P}) \sum_S^{S_{\max}-1} C_q^S \left\langle \left\langle B_{IJ;0,0}^+ \sum_M B_{(kl\dots)SM\lambda_0}^+ B_{(kl\dots)SM\lambda_0} B_{IJ;0,0} \right\rangle \right\rangle$$

Teniendo en cuenta la relación de "freezing" (ver apartado 1.7.6), la expresión anterior queda

$$T_1 = \varepsilon(\hat{P}) \sum_S^{S_{\max}-1} C_q^S \left\langle \left\langle \sum_M B_{(kl\dots)SM\lambda_0}^+ B_{(kl\dots)SM\lambda_0} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1} \quad (a1.8)$$

Si en (a1.8) multiplicamos y dividimos por $C_q^{S_{\max}-1}$ y a continuación extraemos del sumatorio \sum_S , el término correspondiente a $S_{\max}-1$, tendremos:

$$T_1 = \varepsilon(\hat{P}) C_q^{S_{\max}-1} \left(\frac{C_q^{S_{\max}-1}}{C_q^{S_{\max}-1}} \left\langle \left\langle \sum_M B_{(kl\dots)(S_{\max}-1)M\mu_0}^+ B_{(kl\dots)(S_{\max}-1)M\mu_0} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1} + \right. \\ \left. \sum_S^{S_{\max}-2} \frac{C_q^S}{C_q^{S_{\max}-1}} \left\langle \left\langle \sum_M B_{(kl\dots)SM\mu_0}^+ B_{(kl\dots)SM\mu_0} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1} \right) \quad (a1.9)$$

Haciendo $\mathcal{S} = S - 1$ ($\mathcal{S}_{\max} = S_{\max} - 1$) y sumando y restando

$$\sum_{\mathcal{S}}^{\mathcal{S}_{\max}-1} \chi^{\mathcal{S}}(\hat{E}) \left\langle \left\langle \sum_M B_{(kl\dots)\mathcal{S}M\mu_0}^+ B_{(kl\dots)\mathcal{S}M\mu_0} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1}$$

en el lado derecho de la ecuación (a1.9) obtenemos:

$$T_1 = \varepsilon(\hat{P}) C_q^{S_{\max}-1} \left(\left\langle \left\langle \sum_M B_{(kl\dots)\mathcal{S}_{\max}M\mu_0}^+ B_{(kl\dots)\mathcal{S}_{\max}M\mu_0} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1} + \right.$$

$$\sum_{\delta}^{\delta_{\max}^{-1}} \chi^{\delta}(\hat{E}) \left\langle \left\langle \sum_M B_{(kl\dots)}^{+} \delta_{M\mu_0} B_{(kl\dots)} \delta_{M\mu_0} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1} +$$

$$\varepsilon(\hat{P}) C_q^{S_{\max}^{-1}} \sum_{\delta}^{\delta_{\max}^{-1}} \left(\frac{C_q^{\delta}}{C_q^{S_{\max}^{-1}}} - \chi^{\delta}(\hat{E}) \right) \left\langle \left\langle \sum_M B_{(kl\dots)}^{+} \delta_{M\mu_0} B_{(kl\dots)} \delta_{M\mu_0} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1}$$

La expresión anterior puede escribirse como

$$T_1 = C_1([\hat{P}]) \left\langle \left\langle n_1 n_2 \dots n_{q-2} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1} +$$

$$\sum_{\delta}^{\delta_{\max}^{-1}} C_{q-2}^{\delta} \left\langle \left\langle \sum_M B_{(kl\dots)}^{+} \delta_{M\mu_0} B_{(kl\dots)} \delta_{M\mu_0} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1} \quad (a1.10)$$

donde

$$C_1([\hat{P}]) = \varepsilon(\hat{P}) C_q^{S_{\max}^{-1}}$$

$$C_{q-2}^{\delta} = \varepsilon(\hat{P}) C_q^{S_{\max}^{-1}} \left(\frac{C_q^{\delta}}{C_q^{S_{\max}^{-1}}} - \chi^{\delta}(\hat{E}) \right)$$

Llevando la ecuación (a1.10) a la (a1.7) obtenemos:

$$\left\langle \left\langle {}^q E_{\hat{P}[(kl)\dots]}^{ijkl\dots} \right\rangle \right\rangle = C_0([\hat{P}]) \left\langle \left\langle n_1 n_2 \dots n_q \right\rangle \right\rangle_{N, K, S^+}$$

$$C_1([\hat{P}]) \left\langle \left\langle n_1 n_2 \dots n_{q-2} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1, S^+} + T_2 \quad (a1.11)$$

siendo

$$T_2 = \sum_{\delta}^{\delta_{\max}^{-1}} C_{q-2}^{\delta} \left\langle \left\langle \sum_M B_{(kl\dots)}^{+} \delta_{M\mu_0} B_{(kl\dots)} \delta_{M\mu_0} \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1}$$

y

$$C_0([\hat{P}]) = \varepsilon(\hat{P})$$

Ahora deberíamos proceder con T_2 de forma análoga a como hemos hecho con T_1 . El número de veces que debe llevarse a cabo este procedimiento, es igual al de valores de S compatibles con un número de partículas igual al de índices involucrados por la permutación \hat{P} . Vemos, por tanto, que $\left\langle \left\langle {}^q E_{\hat{P}[\dots]}^{ijkl\dots} \right\rangle \right\rangle$ puede expresarse como:

$$\left\langle \left\langle E_{\hat{P}[k_1 \dots k_q]}^{k_1 \dots k_q} \right\rangle \right\rangle_{N, K, S} = \sum_{j=0}^{\xi} C_j([\hat{P}]) \left\langle \left\langle n_1 n_2 \dots n_{q-2j} \right\rangle \right\rangle_{N-2j, K-j, S}$$

A continuación vamos a ilustrar, mediante un ejemplo, el procedimiento que hemos llevado a cabo para la ampliación de la tabla de coeficientes $C_j([\hat{P}])$ (ver Planelles et al.1990), con objeto de incluir todas las clases de los grupos simétricos S_7 y S_8 . Para este propósito, necesitamos las tablas de caracteres hasta el grupo simétrico S_8 incluido (pueden encontrarse, por ejemplo, en Kaplan 1975).

Veamos, pues, **como ejemplo**, la obtención de $\left\langle \left\langle {}^7 E_{3526714}^{1234567} \right\rangle \right\rangle$. donde $(3526714) = \hat{P}[1234567]$ (con $\hat{P} = (1325746) \in [7]$). Las permutaciones de la clase $[7]$ pueden descomponerse como productos de 6 transposiciones. Por tanto, la paridad será $\varepsilon(\hat{P}) = (-1)^6 = 1$.

De acuerdo con la ecuación (a1.7) tenemos:

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle {}^7 E_{[7](1234567)}^{1234567} \right\rangle\right\rangle &= (-1)^6 \left\langle\left\langle n_1 n_2 \dots n_7 \right\rangle\right\rangle + \\ &(-1)^6 \sum_S C_q^S \left\langle\left\langle \sum_{|M| \leq 5/2} B_{(12\dots 7)SM\lambda_0}^+ B_{(12\dots 7)SM\lambda_0} \right\rangle\right\rangle \end{aligned} \quad (a1.12)$$

Los valores de C_q^S - ver ecuación (a1.5) - los obtenemos directamente de la tabla de caracteres de S_7 :

	$\chi^S([7])$	$\chi^S(E)$	C_q^S
$S = 7/2$	1	1	-
$S = 5/2$	-1	6	-7
$S = 3/2$	0	14	-14
$S = 1/2$	0	14	-14

Llevando estos valores de C_q^S a la ecuación (a1.12), obtenemos:

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle {}^7 E_{[7](1234567)}^{1234567} \right\rangle\right\rangle &= \\ &\left\langle\left\langle n_1 n_2 \dots n_7 \right\rangle\right\rangle - 7 \sum_{|M| \leq 5/2} \left\langle\left\langle B_{(12\dots 7)5/2 M\lambda_0}^+ B_{(12\dots 7)5/2 M\lambda_0} \right\rangle\right\rangle - \\ &14 \sum_{|M| \leq 3/2} \left\langle\left\langle B_{(12\dots 7)3/2 M\lambda_0}^+ B_{(12\dots 7)3/2 M\lambda_0} \right\rangle\right\rangle - \\ &14 \sum_{|M| \leq 1/2} \left\langle\left\langle B_{(12\dots 7)1/2 M\lambda_0}^+ B_{(12\dots 7)1/2 M\lambda_0} \right\rangle\right\rangle. \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la relación de "freezing" (sección (1.7.6)), la anterior expresión queda:

$$\begin{aligned}
 \left\langle\left\langle {}^7 E_{[7](1234567)}^{1234567} \right\rangle\right\rangle &= \left\langle\left\langle n_1 n_2 \dots n_7 \right\rangle\right\rangle_{N,K,S}^- \\
 &= \sum_{|M| \leq 5/2}^7 \left\langle\left\langle B_{(12\dots 5)5/2 M \lambda_0}^+ B_{(12\dots 5)5/2 M \lambda_0} \right\rangle\right\rangle_{N-2,K-1,S}^- \\
 &= \sum_{|M| \leq 3/2}^{14} \left\langle\left\langle B_{(12\dots 5)3/2 M \lambda_0}^+ B_{(12\dots 5)3/2 M \lambda_0} \right\rangle\right\rangle_{N-2,K-1,S}^- \\
 &= \sum_{|M| \leq 1/2}^{14} \left\langle\left\langle B_{(12\dots 5)1/2 M \lambda_0}^+ B_{(12\dots 5)1/2 M \lambda_0} \right\rangle\right\rangle_{N-2,K-1,S} \quad (a1.13)
 \end{aligned}$$

De la tabla de caracteres de S_5 , obtenemos los $\chi^S(\hat{E})$ para $S = 5/2, 3/2$ y $1/2$. Estos son, respectivamente, 1, 4 y 5. Por tanto:

$$\begin{aligned}
 \left\langle\left\langle n_1 n_2 \dots n_5 \right\rangle\right\rangle_{N-2,K-1,S} &= \sum_{S=5/2}^{1/2} \chi^S(\hat{E}) \sum_{|M| \leq 5/2} \left\langle\left\langle B_{(12..5)S M \lambda_0}^+ B_{(12..5)S M \lambda_0} \right\rangle\right\rangle = \\
 &= \sum_{|M| \leq 5/2} \left\langle\left\langle B_{(12..5)5/2 M \lambda_0}^+ B_{(12..5)5/2 M \lambda_0} \right\rangle\right\rangle + 4 \sum_{|M| \leq 3/2} \left\langle\left\langle B_{(12..5)3/2 M \lambda_0}^+ B_{(12..5)3/2 M \lambda_0} \right\rangle\right\rangle + \\
 &= 5 \sum_{|M| \leq 1/2} \left\langle\left\langle B_{(12..5)1/2 M \lambda_0}^+ B_{(12..5)1/2 M \lambda_0} \right\rangle\right\rangle \quad (a1.14)
 \end{aligned}$$

Despejando $\sum_{|M| \leq 5/2} \left\langle\left\langle B_{(12..5)5/2 M \lambda_0}^+ B_{(12..5)5/2 M \lambda_0} \right\rangle\right\rangle$ de la ecuación (a1.14),

sustituyendo en la ecuación (a1.13), agrupando términos iguales y teniendo en cuenta, nuevamente, la relación de "freezing", llegamos a

$$\left\langle\left\langle {}^7 E_{[7](1234567)}^{1234567} \right\rangle\right\rangle = \left\langle\left\langle n_1 n_2 \dots n_7 \right\rangle\right\rangle_{N,K,S}^- - 7 \left\langle\left\langle n_1 n_2 \dots n_5 \right\rangle\right\rangle_{N-2,K-1,S}^+$$

$$\begin{aligned}
& 14 \sum_{|M| \leq 3/2} \left\langle \left\langle B_{(123) 3/2 M \lambda_0}^+ B_{(123) 3/2 M \lambda_0} \right\rangle \right\rangle_{N-4, K-1}^+ \\
& 21 \sum_{|M| \leq 1/2} \left\langle \left\langle B_{(123) 1/2 M \lambda_0}^+ B_{(123) 1/2 M \lambda_0} \right\rangle \right\rangle_{N-4, K-2} \quad (a1.15)
\end{aligned}$$

Recurriendo, ahora, a la tabla de caracteres para S_3 , obtenemos

$$\chi^{3/2}(\hat{E}) = 1 \text{ y } \chi^{1/2}(\hat{E}) = 2.$$

Por consiguiente:

$$\begin{aligned}
\left\langle \left\langle n_1 n_2 n_3 \right\rangle \right\rangle_{N-4, K-2, S} &= \sum_{|M| \leq 3/2} \left\langle \left\langle B_{(123) 3/2 M \lambda_0}^+ B_{(123) 3/2 M \lambda_0} \right\rangle \right\rangle_{N-4, K-2}^+ \\
& 2 \sum_{|M| \leq 1/2} \left\langle \left\langle B_{(123) 1/2 M \lambda_0}^+ B_{(123) 1/2 M \lambda_0} \right\rangle \right\rangle_{N-4, K-2} \quad (a1.16)
\end{aligned}$$

Despejando $\sum_{|M| \leq 3/2} \left\langle \left\langle B_{(123) 3/2 M \lambda_0}^+ B_{(123) 3/2 M \lambda_0} \right\rangle \right\rangle_{N-4, K-2}$ de (a1.16),

sustituyendo en (a1.15), agrupando términos iguales y teniendo en cuenta la relación de "freezing" obtenemos:

$$\begin{aligned}
\left\langle \left\langle {}_7 E_{[7](1234567)}^{1234567} \right\rangle \right\rangle &= \left\langle \left\langle n_1 n_2 \dots n_7 \right\rangle \right\rangle_{N, K, S} - 7 \left\langle \left\langle n_1 n_2 \dots n_5 \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1, S}^+ \\
14 \left\langle \left\langle n_1 n_2 n_3 \right\rangle \right\rangle_{N-4, K-2, S} &- 7 \sum_{|M| \leq 1/2} \left\langle \left\langle B_{(1) 1/2 M \lambda_0}^+ B_{(1) 1/2 M \lambda_0} \right\rangle \right\rangle_{N-6, K-1} \quad (a1.17)
\end{aligned}$$

Finalmente, puesto que

$$\sum_{|M| \leq 1/2} \left\langle \left\langle B_{(1)1/2}^{+M\lambda_0} B_{(1)1/2}^{M\lambda_0} \right\rangle \right\rangle_{N-6, K-1} = \left\langle \left\langle n_1 \right\rangle \right\rangle_{N-6, K-3, S},$$

concluimos

$$\begin{aligned} \left\langle \left\langle {}^7 E_{[7](1234567)}^{1234567} \right\rangle \right\rangle &= \left\langle \left\langle n_1 n_2 \dots n_7 \right\rangle \right\rangle_{N, K, S} - 7 \left\langle \left\langle n_1 n_2 \dots n_5 \right\rangle \right\rangle_{N-2, K-1, S} + \\ &14 \left\langle \left\langle n_1 n_2 n_3 \right\rangle \right\rangle_{N-4, K-2, S} - 7 \left\langle \left\langle n_1 \right\rangle \right\rangle_{N-6, K-3, S} \end{aligned} \quad (a1.18)$$

De forma análoga hemos obtenido los restantes casos de S_7 ([3,4], [2²,3] y [2,5]), así como los de S_8 ([8], [4²], [3,5], [2⁴], [2,3²], [2,6], y [2²,4]).

Puede observarse como la ecuación (a1.18) se ajusta a la ecuación (1.44):

$$\left\langle \left\langle E_{\hat{P}[k_1 \dots k_q]}^{k_1 \dots k_q} \right\rangle \right\rangle_{N, K, S} = \sum_{j=0}^{\xi} C_j([\hat{P}]) \left\langle \left\langle n_1 n_2 \dots n_{q-2j} \right\rangle \right\rangle_{N-2j, K-j, S}$$

En el ejemplo que hemos tomado, $\xi = (7-1)/2 = 3$. Asimismo, los coeficientes $C_j([\hat{P}])$ serán,

$$C_0([7]) = 1; C_1([7]) = -7; C_2([7]) = 14 \text{ y } C_3([7]) = -7.$$

En la tabla siguiente se proporcionan los resultados de las evaluaciones de $\left\langle \left\langle {}^q E_{\hat{P}(12 \dots q)}^{12 \dots q} \right\rangle \right\rangle$ con $[\hat{P}]$ perteneciente a S_8 máximo:

clase ↓	j = 0	j = 1	j = 2	j = 3	j = 4
[1]	1				
[2]	-1	2			
[3]	1	-3			
[2 ²]	1	-4	4		
[4]	-1	4	-2		
[23]	-1	5	-6		
[5]	1	-5	5		
[2 ³]	-1	6	-12	8	
[24]	1	-6	10	-4	
[3 ²]	1	-6	9	0	
[6]	-1	6	-9	2	
[7]	1	-7	14	-7	
[34]	-1	7	-14	6	
[2 ² 3]	1	-7	16	-12	
[25]	-1	7	-15	10	
[8]	-1	8	-20	16	-2
[4 ²]	1	-8	20	-16	4
[35]	1	-8	20	-15	0
[2 ⁴]	1	-8	24	-32	16
[23 ²]	-1	8	-21	18	0
[26]	1	-8	21	-20	4
[2 ² 4]	-1	8	-22	24	-4

Para finalizar este apéndice, ejemplifiquemos el uso de esta tabla en un caso concreto. Si $[\hat{P}] = [3^2]$, los coeficientes que proporciona la tabla para la entrada $[3^2]$ son: (1, -6, 9, 0).

Así pues,

$$\left\langle\left\langle {}^8 E_{[3^2]}^{1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8} (1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8) \right\rangle\right\rangle = \left\langle\left\langle n_1 \dots n_8 \right\rangle\right\rangle_{N, K, S} -$$

$$6 \left\langle\left\langle n_1 \dots n_6 \right\rangle\right\rangle_{N-2, K-1, S} + 9 \left\langle\left\langle n_1 \dots n_4 \right\rangle\right\rangle_{N-4, K-2, S}$$

La evaluación completa de $\left\langle\left\langle {}^8 E_{[3^2]}^{1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8} (1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8) \right\rangle\right\rangle$ requeriría, ahora, la evaluación de las trazas de los números de ocupación tal como se indica en la sección (1.8.1).

APENDICE 2



APENDICE 2.- Ilustración mediante un ejemplo del cumplimiento de la ecuación (2.23).

Vamos a justificar que la traza de productos de 2-RDOs

$$\left\langle\left\langle \begin{array}{c} 1\ 1, 1\ \tilde{4}, \tilde{5}\ 1 \\ 1\ 1, \tilde{5}\ \tilde{4}, 1\ 1 \end{array} \right\rangle\right\rangle,$$

de acuerdo con la ecuación (2.23), puede ser expresada como una suma extendida a todas las permutaciones \hat{R} de trazas $\left\langle\left\langle \begin{array}{c} 1\ 2, 3\ \tilde{4}, \tilde{5}\ 6 \\ \hat{R}[1\ 2, \tilde{5}\ \tilde{4}, 3\ 6] \end{array} \right\rangle\right\rangle$.

Teniendo en cuenta que

$$\left\langle\left\langle \begin{array}{c} 1\ 2, 3\ \tilde{4}, \tilde{5}\ 6 \\ \hat{R}[1\ 2, \tilde{5}\ \tilde{4}, 3\ 6] \end{array} \right\rangle\right\rangle = \left\langle\left\langle \begin{array}{c} 1\ 2, 3\ \tilde{4}, \tilde{5}\ 6 \\ \hat{R}(35)[1\ 2, 3\ \tilde{4}, \tilde{5}\ 6] \end{array} \right\rangle\right\rangle,$$

se trata, por tanto, de probar que

$$\left\langle\left\langle \begin{array}{c} 1\ 1, 1\ \tilde{4}, \tilde{5}\ 1 \\ 1\ 1, \tilde{5}\ \tilde{4}, 1\ 1 \end{array} \right\rangle\right\rangle = \sum_{\hat{R} \in G_4} \left\langle\left\langle \begin{array}{c} 1\ 2, 3\ \tilde{4}, \tilde{5}\ 6 \\ \hat{R}(35)[1\ 2, 3\ \tilde{4}, \tilde{5}\ 6] \end{array} \right\rangle\right\rangle. \quad (\text{a3.1})$$

Donde para mayor claridad los índices correspondientes al "string" X, han sido marcados con una tilde. La permutación \hat{R} actúa únicamente sobre los índices no marcados (G_4 es, por tanto, el grupo de permutaciones de $\{1,2,3,6\}$ - grupo isomorfo a S_4 -. Nótese que las permutaciones de G_4 se obtienen a partir de las de S_4 sin más que cambiar el índice 4 por el 6). En el ejemplo tomado la permutación \hat{P} ($\hat{P} \in S_6$) es la transposición (35).

Comenzaremos desarrollando la parte izquierda de la ecuación (a3.1), realizando los productos de los operadores de densidad (para ello haremos uso del teorema de Wick).

$$\left\langle\left\langle \begin{array}{c} 1\ 1, 1\ \tilde{4}, \tilde{5}\ 1 \\ 1\ 1, \tilde{5}\ \tilde{4}, 1\ 1 \end{array} \right\rangle\right\rangle \equiv \left\langle\left\langle \begin{array}{c} {}^2E_{11}^{11} {}^2E_{\tilde{5}\tilde{4}}^{\tilde{1}\tilde{4}} {}^2E_{11}^{\tilde{5}1} \end{array} \right\rangle\right\rangle =$$

$$\left\langle \left\langle \left({}^4E_{11\tilde{5}\tilde{4}}^{111\tilde{4}} + {}^3E_{\tilde{5}1\tilde{4}}^{11\tilde{4}} + {}^3E_{1\tilde{5}\tilde{4}}^{11\tilde{4}} \right) \cdot {}^2E_{11}^{\tilde{5}1} \right\rangle \right\rangle. \quad (\text{a3.2})$$

Puesto que ${}^3E_{\tilde{5}1\tilde{4}}^{11\tilde{4}} = {}^3E_{1\tilde{5}\tilde{4}}^{11\tilde{4}}$, la igualdad (a3.2) queda:

$$\left\langle \left\langle \begin{matrix} 11, 1\tilde{4}, \tilde{5}1 \\ 11, \tilde{5}\tilde{4}, 11 \end{matrix} \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle {}^4E_{11\tilde{5}\tilde{4}}^{111\tilde{4}} \cdot {}^2E_{11}^{\tilde{5}1} \right\rangle \right\rangle + 2 \left\langle \left\langle {}^3E_{1\tilde{5}\tilde{4}}^{11\tilde{4}} \cdot {}^2E_{11}^{\tilde{5}1} \right\rangle \right\rangle. \quad (\text{a3.3})$$

En virtud del Lema 3 (sección 2.3.2) cualquier término procedente de $\left\langle \left\langle {}^4E_{11\tilde{5}\tilde{4}}^{111\tilde{4}} \cdot {}^2E_{11}^{\tilde{5}1} \right\rangle \right\rangle$ al efectuar el producto de los operadores de densidad, será nulo. Por tanto,

$$\left\langle \left\langle {}^4E_{11\tilde{5}\tilde{4}}^{111\tilde{4}} \cdot {}^2E_{11}^{\tilde{5}1} \right\rangle \right\rangle = 0$$

y la ecuación (a3.3) queda

$$\begin{aligned} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 11, 1\tilde{4}, \tilde{5}1 \\ 11, \tilde{5}\tilde{4}, 11 \end{matrix} \right\rangle \right\rangle &= 2 \left\langle \left\langle {}^5E_{1\tilde{5}\tilde{4}11}^{11\tilde{4}\tilde{5}1} \right\rangle \right\rangle + 2 \left\langle \left\langle {}^4E_{11\tilde{4}1}^{11\tilde{4}1} \right\rangle \right\rangle + 2 \left\langle \left\langle {}^4E_{1\tilde{5}\tilde{4}1}^{11\tilde{4}\tilde{5}} \right\rangle \right\rangle + \\ &2 \left\langle \left\langle {}^3E_{11\tilde{4}}^{11\tilde{4}} \right\rangle \right\rangle = 2 \left\langle \left\langle {}^4E_{1\tilde{5}\tilde{4}1}^{11\tilde{4}\tilde{5}} \right\rangle \right\rangle + 2 \left\langle \left\langle {}^3E_{11\tilde{4}}^{11\tilde{4}} \right\rangle \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{a3.4})$$

(Nótese que los sumandos $\left\langle \left\langle {}^5E_{1\tilde{5}\tilde{4}11}^{11\tilde{4}\tilde{5}1} \right\rangle \right\rangle$ y $\left\langle \left\langle {}^4E_{11\tilde{4}1}^{11\tilde{4}1} \right\rangle \right\rangle$ son nulos en virtud del Lema 3).

Teniendo en cuenta la ecuación (22) de Planelles et al. 1991, la ecuación (a3.4) puede ser escrita como

$$\left\langle\left\langle \begin{matrix} 1 & 1, & 1 & \tilde{4}, & \tilde{5} & 1 \\ 1 & 1, & \tilde{5} & \tilde{4}, & 1 & 1 \end{matrix} \right\rangle\right\rangle = 2 \sum_{\hat{Q} \in S_2} \left\langle\left\langle {}^4 E_{1 \tilde{5} \tilde{4} 2}^{1 2 \tilde{4} \tilde{5}} \right\rangle\right\rangle + 2 \sum_{\hat{Q} \in S_2} \left\langle\left\langle {}^4 E_{1 2 \tilde{4}}^{1 2 \tilde{4}} \right\rangle\right\rangle \quad (a3.5)$$

donde $\hat{Q} \in S_2$ actúa únicamente sobre los índices no marcados (es decir, 1 y 2).

A continuación, utilizando la nueva formulación del teorema de Wick (sección 2.2), vamos a obtener las expansiones de los 24 términos (4!) de que consta la parte derecha de la ecuación (a3.1). Una vez obtenidas dichas expansiones procederemos a reagrupar, de forma más conveniente, los términos resultantes.

$\hat{R} \in G_4$	$\left\langle\left\langle \hat{R} \cdot (35) \right\rangle\right\rangle$	Expansiones de Wick: $\sum \left\langle\left\langle (\hat{P}) \right\rangle\right\rangle_{qE}$
e	$\left\langle\left\langle (35) \right\rangle\right\rangle$	$\llcorner\llcorner(35)\ggg_{6E} + \llcorner\llcorner\emptyset\ggg_{5E}$
(12)	$\left\langle\left\langle (12)(35) \right\rangle\right\rangle$	$\llcorner\llcorner(12)(35)\ggg_{6E} + \llcorner\llcorner(12)\ggg_{5E}$
(13)	$\left\langle\left\langle (13\dot{5}) \right\rangle\right\rangle$	$\llcorner\llcorner(135)\ggg_{6E} + \llcorner\llcorner(13)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner(15)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner\emptyset\ggg_{4E}$
(16)	$\left\langle\left\langle (1\dot{6})(35) \right\rangle\right\rangle$	$\llcorner\llcorner(16)(35)\ggg_{6E} + \llcorner\llcorner(35)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner(16)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner\emptyset\ggg_{4E}$
(23)	$\left\langle\left\langle (23\dot{5}) \right\rangle\right\rangle$	$\llcorner\llcorner(235)\ggg_{6E} + \llcorner\llcorner(23)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner(25)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner\emptyset\ggg_{4E}$
(26)	$\left\langle\left\langle (2\dot{6})(35) \right\rangle\right\rangle$	$\llcorner\llcorner(26)(35)\ggg_{6E} + \llcorner\llcorner(26)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner(35)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner\emptyset\ggg_{4E}$
(36)	$\left\langle\left\langle (3\dot{5}6) \right\rangle\right\rangle$	$\llcorner\llcorner(356)\ggg_{6E} + \llcorner\llcorner(36)\ggg_{5E}$
(12)(36)	$\left\langle\left\langle (3\dot{5}6)(12) \right\rangle\right\rangle$	$\llcorner\llcorner(356)(12)\ggg_{6E} + \llcorner\llcorner(36)(12)\ggg_{5E}$
(13)(26)	$\left\langle\left\langle (13\dot{5})(2\dot{6}) \right\rangle\right\rangle$	$\llcorner\llcorner(135)(26)\ggg_{6E} + \llcorner\llcorner(15)(26)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner(13)(26)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner(135)\ggg_{5E} + \llcorner\llcorner(26)\ggg_{4E} + \llcorner\llcorner(13)\ggg_{4E} + \llcorner\llcorner(15)\ggg_{4E} + \llcorner\llcorner\emptyset\ggg_{3E}$

(16)(23)	$\langle\langle(2\dot{3}\dot{5})(1\dot{6})\rangle\rangle$	$\ll(235)(16)\gg 6E + \ll(25)(16)\gg 5E + \ll(23)(16)\gg 5E + \ll(235)\gg 5E + \ll(16)\gg 4E + \ll(25)\gg 4E + \ll(23)\gg 4E + \ll e \gg 3E$
(123)	$\langle\langle(12\dot{3}\dot{5})\rangle\rangle$	$\ll(1235)\gg 6E + \ll(125)\gg 5E + \ll(123)\gg 5E + \ll(12)\gg 4E$
(126)	$\langle\langle(12\dot{6})(3\dot{5})\rangle\rangle$	$\ll(126)(35)\gg 6E + \ll(126)\gg 5E + \ll(12)(35)\gg 5E + \ll(12)\gg 4E$
(136)	$\langle\langle(1\dot{3}\dot{5}\dot{6})\rangle\rangle$	$\ll(1356)\gg 6E + \ll(136)\gg 5E + \ll(156)\gg 5E + \ll(16)\gg 4E$
(236)	$\langle\langle(2\dot{3}\dot{5}\dot{6})\rangle\rangle$	$\ll(2356)\gg 6E + \ll(256)\gg 5E + \ll(236)\gg 6E + \ll(26)\gg 4E$
(132)	$\langle\langle(1\dot{3}\dot{5}\dot{2})\rangle\rangle$	$\ll(1352)\gg 6E + \ll(132)\gg 5E + \ll(152)\gg 5E + \ll(12)\gg 4E$
(162)	$\langle\langle(1\dot{6}\dot{2})(3\dot{5})\rangle\rangle$	$\ll(162)(35)\gg 6E + \ll(12)(35)\gg 5E + \ll(162)\gg 5E + \ll(12)\gg 4E$
(163)	$\langle\langle(1\dot{6}\dot{3}\dot{5})\rangle\rangle$	$\ll(1635)\gg 6E + \ll(135)\gg 5E + \ll(163)\gg 5E + \ll(13)\gg 4E$
(263)	$\langle\langle(2\dot{6}\dot{3}\dot{5})\rangle\rangle$	$\ll(2635)\gg 6E + \ll(235)\gg 5E + \ll(263)\gg 5E + \ll(23)\gg 4E$
(1236)	$\langle\langle(12\dot{3}\dot{5}\dot{6})\rangle\rangle$	$\ll(12356)\gg 6E + \ll(1236)\gg 5E + \ll(1256)\gg 5E + \ll(126)\gg 4E$
(1263)	$\langle\langle(12\dot{6}\dot{3}\dot{5})\rangle\rangle$	$\ll(12635)\gg 6E + \ll(1235)\gg 5E + \ll(1263)\gg 5E + \ll(123)\gg 4E$
(1362)	$\langle\langle(1\dot{3}\dot{5}\dot{6}\dot{2})\rangle\rangle$	$\ll(13562)\gg 6E + \ll(1562)\gg 5E + \ll(1362)\gg 5E + \ll(162)\gg 4E$
(1632)	$\langle\langle(1\dot{6}\dot{3}\dot{5}\dot{2})\rangle\rangle$	$\ll(16352)\gg 6E + \ll(1352)\gg 5E + \ll(1632)\gg 5E + \ll(132)\gg 4E$
(1326)	$\langle\langle(1\dot{3}\dot{5}\dot{2}\dot{6})\rangle\rangle$	$\ll(13526)\gg 6E + \ll(1526)\gg 5E + \ll(1326)\gg 5E + \ll(1352)\gg 5E + \ll(126)\gg 4E + \ll(152)\gg 4E + \ll(132)\gg 4E + \ll(12)\gg 3E$
(1623)	$\langle\langle(1\dot{6}\dot{2}\dot{3}\dot{5})\rangle\rangle$	$\ll(16235)\gg 6E + \ll(1235)\gg 5E + \ll(1625)\gg 5E + \ll(1623)\gg 5E + \ll(125)\gg 4E + \ll(123)\gg 4E + \ll(162)\gg 4E + \ll(12)\gg 3E$

Agrupando convenientemente al sumar todas las expansiones de Wick obtenemos:

A nivel de 6-RDOs:

$$\sum_{\hat{R} \in G_4} \left\langle \left\langle {}^6 E_{\hat{R}(35)[1\ 2\ 3\ \tilde{4}\ \tilde{5}\ 6]} \right\rangle \right\rangle = 0 \quad (\text{Lema 2})$$

Observese que a este nivel, la no eliminación de ningún índice, hace que se reproduzcan en ellos todas las permutaciones $\hat{R}(35)$ (donde $\hat{R} \in G_4$).

A nivel de 5-RDOs:

Se debe producir la eliminación de un índice. Este podrá ser uno de los no permutables por \hat{R} , o bien uno que sí lo sea. Veamos por separado las dos posibilidades:

a) Eliminación de un índice no permutable por \hat{R} . En el ejemplo tenemos dos índices de este tipo; el 4 y el 5. Ahora bien, en este caso, sólo el 5 puede ser eliminado en la multiplicación de los operadores 2-RDOs (tengase en cuenta que para los índices no permutables por \hat{R} , la eliminación dependerá de que aparezcan en la permutación \hat{P} con enganche superior - $(3 \overset{\cdot}{5})$ -). Puesto que el índice 5 no aparece en la permutación \hat{R} , su eliminación implica la transformación

$$\hat{R}(3 \overset{\cdot}{5}) \longrightarrow \hat{R} \hat{e}.$$

Por tanto, a nivel de 5-RDOs en los que se haya eliminado el índice 5 tenemos:

$$\sum_{\hat{R} \in G_4} \left\langle \left\langle {}^5 E_{\hat{R}\hat{e}[1\ 2\ 3\ \tilde{4}\ 6]} \right\rangle \right\rangle = 0 \quad (\text{Lema 2})$$

Observese cómo la eliminación del índice 5 ha transformado la permutación $\hat{P} = (35)$ en $\hat{P}' = \hat{e}$.

b) Eliminación de un índice permutable por \hat{R} . En el ejemplo, sólo los índices 3 y 6 son susceptibles de ello. Veamos los dos casos por separado:

b.1) Suma de términos, a nivel de 5-RDOs, en los que se ha eliminado el índice 3. Tales términos hay que buscarlos en aquellas trazas de productos de 2-RDOs, $\langle\langle \hat{R}(35) \rangle\rangle$, donde la permutación representativa $\hat{R}(35)$ tenga enganche superior en el índice 3. Aquí, a su vez, tenemos dos posibilidades:

b.1.1) Que $\hat{R}(35)$ lleve el 3 a la posición 1. Por tanto, debemos buscar aquellas permutaciones $\hat{R}(35)$ que tengan la secuencia $(1\dot{3}\dot{5}\dots)$. La eliminación del 3 dará, a nivel de 5-RDOs, $\hat{R}\hat{P}' = (1\dot{5}\dots)$ (donde ahora $\hat{R} \in G_3$). Los términos correspondientes son

$$\begin{aligned} \langle\langle (15) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (15)(26) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (156) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (152) \rangle\rangle_{5E} + \\ \langle\langle (1562) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (1526) \rangle\rangle_{5E} \end{aligned}$$

Puesto que ahora \hat{R} es una permutación de G_3 (grupo de permutaciones de $\{1,2,6\}$), la suma anterior puede escribirse como

$$\begin{aligned} \langle\langle (12)(152) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (162)(152) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (126)(152) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle e(152) \rangle\rangle_{5E} + \\ \langle\langle (26)(152) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (16)(152) \rangle\rangle_{5E} = \\ \sum_{\hat{R} \in G_3} \left\langle \left\langle {}^5E_{\hat{R}(152)[1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}\ 6]}^{1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}\ 6} \right\rangle \right\rangle = 0 \quad (\text{Lema 2}) \end{aligned}$$

(donde \hat{R} sólo afecta a los índices no marcados). Nótese cómo la permutación $\hat{P} = (35)$ pasa a ser la $\hat{P}' = (152)$ como consecuencia de la eliminación del índice permutable 3.

b.1.2) Que $\hat{R}(35)$ lleve el índice 3 a la posición 2. Deberemos, por tanto, buscar aquellas permutaciones $\hat{R}(35)$ que contengan la secuencia $(..2\dot{3}\dot{5}..)$. La eliminación del índice 3 dará a nivel de 5-RDOs, $\hat{R}\hat{P}' = (..2\dot{5}..)$ (con $\hat{R} \in G_3$). Los términos correspondientes son

$$\begin{aligned} \langle\langle (25) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (25)(16) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (125) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (256) \rangle\rangle_{5E} + \\ \langle\langle (1256) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (1625) \rangle\rangle_{5E} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \langle\langle e(25) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (16)(25) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (12)(25) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (26)(25) \rangle\rangle_{5E} + \\ & \langle\langle (126)(25) \rangle\rangle_{5E} + \langle\langle (162)(25) \rangle\rangle_{5E} = \end{aligned}$$

$$\sum_{\hat{R} \in G_3} \left\langle \left\langle {}^5 E_{\hat{R}(25)[1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}\ 6]} \right\rangle \right\rangle = 0 \quad (\text{Lema 2})$$

(Al igual que en el caso anterior, \hat{R} solo afecta a los índices no marcados).

b.2) Suma de términos, a nivel de 5-RDOs, en los que se ha eliminado el índice 6. En el ejemplo que nos ocupa, tales términos hay que buscarlos en las expansiones de aquellas trazas $\langle\langle \hat{R}(35) \rangle\rangle$, donde la permutación representativa $\hat{R}(35)$ tenga enganche superior en el índice 6. La eliminación de tal índice, da los siguientes términos (a nivel de 5-RDOs):

$$\begin{aligned} & 2 \langle\langle (35) \rangle\rangle_{5E} + 2 \langle\langle (135) \rangle\rangle_{5E} + 2 \langle\langle (235) \rangle\rangle_{5E} + 2 \langle\langle (12)(35) \rangle\rangle_{5E} + \\ & 2 \langle\langle (1235) \rangle\rangle_{5E} + 2 \langle\langle (1352) \rangle\rangle_{5E} = \\ & 2 \langle\langle e(35) \rangle\rangle_{5E} + 2 \langle\langle (13)(35) \rangle\rangle_{5E} + 2 \langle\langle (23)(35) \rangle\rangle_{5E} + 2 \langle\langle (12)(35) \rangle\rangle_{5E} + \\ & 2 \langle\langle (123)(35) \rangle\rangle_{5E} + 2 \langle\langle (132)(35) \rangle\rangle_{5E} = \\ & \sum_{\hat{R} \in G_3 \cong S_3} \left\langle \left\langle {}^5 E_{\hat{R}(35)[1\ 2\ 3\ \tilde{4}\ \tilde{5}]} \right\rangle \right\rangle = 0 \quad (\text{Lema 2}) \end{aligned}$$

A nivel de 4-RDOs

En el ejemplo que estamos considerando, tenemos tres posibilidades:

a) Que se eliminen los índices permutables 3 y 6.

Deberemos fijarnos en las permutaciones $\hat{R}(35)$ que tengan enganche superior en los índices 3 y 6. Los términos correspondientes resultan ser (a nivel de 4-RDOs):

$$\begin{aligned} & \langle\langle (15) \rangle\rangle_{4E} + \langle\langle (152) \rangle\rangle_{4E} + \langle\langle (25) \rangle\rangle_{4E} + \langle\langle (125) \rangle\rangle_{4E} \equiv \\ & \left\{ \langle\langle e(152) \rangle\rangle_{4E} + \langle\langle (12)(152) \rangle\rangle_{4E} \right\} + \left\{ \langle\langle e(25) \rangle\rangle_{4E} + \langle\langle (12)(25) \rangle\rangle_{4E} \right\} \equiv \\ & \sum_{\hat{R} \in G_2 \equiv S_2} \left\langle \left\langle {}^4E_{\hat{R}(152)[1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}]}^{1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}} \right\rangle \right\rangle + \sum_{\hat{R} \in G_2 \equiv S_2} \left\langle \left\langle {}^4E_{\hat{R}(25)[1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}]}^{1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}} \right\rangle \right\rangle = \dagger = \\ & 2 \sum_{\hat{R} \in G_2 \equiv S_2} \left\langle \left\langle {}^4E_{\hat{R}(25)[1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}]}^{1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}} \right\rangle \right\rangle = 2 \sum_{\hat{R} \in G_2 \equiv S_2} \left\langle \left\langle {}^4E_{\hat{R}[1\tilde{5}\ 4\ 2]}^{1\ 2\ \tilde{5}\ \tilde{4}} \right\rangle \right\rangle \neq 0 \end{aligned}$$

b) Que se elimine el índice no permutable 5 y el permutable 6.

Debemos fijarnos en aquellas trazas $\langle\langle \hat{R}(35) \rangle\rangle$ cuyas permutaciones $\hat{R}(35)$ tengan enganche superior en 5 y en 6. Los términos correspondientes, a nivel de 4-RDOs, serán aquellos cuya permutación representativa provenga de $\hat{R}(35)$ sin más que eliminar los índices 5 y 6. Estos serán:

$$\begin{aligned} & 2 \langle\langle e \rangle\rangle_{4E} + 2 \langle\langle (13) \rangle\rangle_{4E} + 2 \langle\langle (23) \rangle\rangle_{4E} + 2 \langle\langle (12) \rangle\rangle_{4E} + \\ & + 2 \langle\langle 123 \rangle\rangle_{4E} + 2 \langle\langle (132) \rangle\rangle_{4E} \equiv \end{aligned}$$

$$\dagger \sum_{\hat{R} \in G_2 \equiv S_2} \left\langle \left\langle {}^4E_{\hat{R}(152)[1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}]}^{1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}} \right\rangle \right\rangle = \sum_{\hat{R} \in G_2 \equiv S_2} \left\langle \left\langle {}^4E_{\hat{R}[\tilde{5}\ 1\ \tilde{4}\ 2]}^{1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}} \right\rangle \right\rangle = (\text{ver ec. (2.7)}) =$$

$$\left\langle \left\langle {}^4E_{\tilde{5}\ 1\ \tilde{4}\ 1}^{1\ 1\ \tilde{4}\ \tilde{5}} \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle {}^4E_{1\tilde{5}\ \tilde{4}\ 1}^{1\ 1\ \tilde{4}\ \tilde{5}} \right\rangle \right\rangle = (\text{ver ec. (2.7)}) =$$

$$\sum_{\hat{R} \in S_2} \left\langle \left\langle {}^4E_{\hat{R}[1\ \tilde{5}\ \tilde{4}\ 2]}^{1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}} \right\rangle \right\rangle = \sum_{\hat{R} \in S_2} \left\langle \left\langle {}^4E_{\hat{R}(25)[1\ 2\ \tilde{4}\ \tilde{5}]}^{1\ 2\ \tilde{5}\ \tilde{4}} \right\rangle \right\rangle$$

$$2 \sum_{\hat{R} \in G_3 \cong S_3} \left\langle \left\langle {}^4 E_{\hat{R}e[1\ 2\ 3\ \tilde{4}]}^{1\ 2\ 3\ \tilde{4}} \right\rangle \right\rangle = 0$$

c) Que se elimine el índices no permutable 5 y el índice permutable 3.

Nos fijaremos en aquellas trazas $\langle\langle \hat{R}(35) \rangle\rangle$ cuyas permutaciones $\hat{R}(35)$ tengan enganche superior en 3 y en 5. Los términos correspondientes, a nivel de 4-RDOs, resultan ser:

$$\begin{aligned} & 2 \langle\langle e \rangle\rangle_{4E} + 2 \langle\langle (16) \rangle\rangle_{4E} + 2 \langle\langle (26) \rangle\rangle_{4E} + 2 \langle\langle (12) \rangle\rangle_{4E} + \\ & + 2 \langle\langle 126 \rangle\rangle_{4E} + 2 \langle\langle (162) \rangle\rangle_{4E} \equiv \\ & 2 \sum_{\hat{R} \in G_3} \left\langle \left\langle {}^4 E_{\hat{R}e[1\ 2\ 4\ \tilde{6}]}^{1\ 2\ 4\ \tilde{6}} \right\rangle \right\rangle = 0 \quad (\text{Lema 2}) \end{aligned}$$

A nivel de 3-RDOs

En el ejemplo tomado solo tenemos una posibilidad. Esta implica la eliminación del índice 5 (único no permutable y eliminable simultáneamente) y de los índices 3 y 6 (los únicos permutables susceptibles de ser eliminados al efectuar los productos de 2-RDOs). Los términos implicados se obtendrán de aquellas trazas $\langle\langle \hat{R}(35) \rangle\rangle$, en las que la permutación representativa $\hat{R}(35)$ tenga tres enganches superiores (en 3, 5 y 6). Dichos términos serán:

$$2 \{ \langle\langle 126 \rangle\rangle_{3E} + \langle\langle (162) \rangle\rangle_{3E} \} \equiv 2 \sum_{\hat{R} \in G_2 \cong S_2} \left\langle \left\langle {}^3 E_{\hat{R}e[1\ 2\ \tilde{4}]}^{1\ 2\ \tilde{4}} \right\rangle \right\rangle \neq 0$$

En definitiva, escogiendo únicamente los sumatorios no nulos, tenemos:

$$\sum_{\hat{R} \in G_4} \left\langle \left\langle \hat{R}(35)_{[1\ 2\ 3\ \tilde{4}\ \tilde{5}\ 6]}^{1\ 2\ 3\ \tilde{4}\ \tilde{5}\ 6} \right\rangle \right\rangle =$$

$$2 \sum_{\hat{R} \in G_2 \cong S_2} \left\langle \left\langle {}^4 E_{\hat{R}[1 \ 2 \ \tilde{5} \ \tilde{4}]}^{1 \ 2 \ \tilde{5} \ \tilde{4}} \right\rangle \right\rangle + 2 \sum_{\hat{R} \in G_2 \cong S_2} \left\langle \left\langle {}^3 E_{\hat{R}[1 \ 2 \ \tilde{4}]}^{1 \ 2 \ \tilde{4}} \right\rangle \right\rangle \quad (\text{a3.6})$$

De las ecuaciones (a.3.5) y (a.3.6) queda comprobado que

$$\left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 \ 1, \ 1 \ \tilde{4}, \ \tilde{5} \ 1 \\ 1 \ 1, \ \tilde{5} \ \tilde{4}, \ 1 \ 1 \end{matrix} \right\rangle \right\rangle = \sum_{\hat{R} \in G_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 \ 2, \ 3 \ \tilde{4}, \ \tilde{5} \ 6 \\ \hat{R}(35)[1 \ 2, \ 3 \ \tilde{4}, \ \tilde{5} \ 6] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle.$$

APENDICE 3

APENDICE 3.-Desdoblamiento de los términos con índices repetidos. Transformación de la ecuación (2.24) en la (2.25) para $\text{Tr}H^2$.

La ecuación (2.24) particularizada para la segunda potencia de H resulta

$$\text{Tr} H^2 = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i \neq k \neq a \neq c}^K \left\{ \begin{matrix} i & k, & a & c \\ \hat{P}[i & k, & a & c] \end{matrix} \right\} +$$

$$\left[\begin{matrix} \text{términos con} \\ \text{índices repetidos} \end{matrix} \right] \quad (\text{a3.1})$$

Las posibilidades en cuanto a repetición de índices, quedan plasmadas mediante las siguientes particiones:

Tipo de partición	Nº de posibles composiciones	Composiciones compatibles	permutaciones por partición
[2 1 ²]	$\binom{4}{2} = 6$	$i = k, a, c; i = a, k, c$ $i = c, k, a; k = a, i, c$ $k = c, i, a; a = c, i, k$	$4! / 2! = 12$
[2 ²]	$\frac{1}{2} \binom{4}{2} \binom{2}{2} = 3$	$i = k, a = c$ $i = a, k = c$ $i = c, k = a$	$4! / (2!)^2 = 6$
[3 1]	$\binom{4}{3} = 4$	$i = k = a, c; i = k = c, a$ $i = a = c, k; k = a = c, i$	$4! / 3! = 4$
[4]	$\binom{4}{4} = 1$	$i = k = a = c$	$4! / 4! = 1$

A continuación vamos a ir desarrollando los términos con índices repetidos. Consideraremos separadamente los cuatro tipos de particiones que pueden presentarse:

1) Índices repetidos obedeciendo al tipo de partición [2 1²].

Las seis composiciones compatibles comportan el mismo tipo de tratamiento. Estudiemos detalladamente, por ejemplo, la primera de ellas. Es decir, $i = k, a, c$ (a y c distintos entre sí, y distintos a $i = k$). El término correspondiente será:

$$T(i = k) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P}_R \in R_4^{\text{II}}} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1, & 3 & 4 \\ \hat{P}_R[11, 34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & a & c \\ \hat{P}_R[i i, a c] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.2})$$

R_4^{II} es el conjunto de las doce permutaciones con repetición (distintas), que pueden formarse con los índices 1,1,3,4 (o equivalentemente con i,i,a,c):

$$R_4^{\text{II}} = \{ (1,1,3,4), (1,1,4,3), (1,3,1,4), (1,3,4,1), (1,4,1,3), (1,4,3,1), (3,1,1,4), (3,1,4,1), (3,4,1,1), (4,1,1,3), (4,1,3,1), (4,3,1,1) \}$$

$\hat{P}_R[11, 34]$ es cualquier elemento de R_4^{II} .

Por otra parte, de acuerdo con la ecuación (2.23), cualquier coeficiente de propagación del tipo $\left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1, & 3 & 4 \\ \hat{P}_R[11, 34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle$ puede ponerse en función de coeficientes sin índices repetidos. En efecto:

$$\left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1, & 3 & 4 \\ \hat{P}_R[11, 34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle = \sum_{\hat{P} \in S_2} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1, & 3 & 4 \\ \hat{P} \mathcal{Q}[11, 34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1, & 3 & 4 \\ e \mathcal{Q}[11, 34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1, & 3 & 4 \\ (12) \mathcal{Q}[11, 34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \quad (\text{a3.3})$$

Siendo \mathcal{Q} la permutación de S_4 que resulta cuando en la ordenación $\hat{P}_R[11, 34]$ mantenemos el primer 1 como tal y cambiamos por 2 el segundo 1. (Por ejemplo la ordenación 1413 se transforma en 1423. Esta última secuencia de índices está desordenada respecto a 1234 según la permutación (243)). Es interesante notar que la permutación \mathcal{Q} no intercambia las posiciones relativas de los índices 1 y 2. Es decir, cuando \mathcal{Q} actúa sobre [1234], la ordenación resultante siempre tendrá el

1 antes que el 2. De esta forma, el conjunto R_4^{II} dará lugar a un subconjunto de S_4 que contiene las doce permutaciones que no intercambian las posiciones relativas de 1 y 2. A este conjunto le llamaremos G_4^{II} y en el caso que nos ocupa ($i = k, a, c$) será:

$$G_4^{II} = \{ e, (34), (23), (234), (243), (24), (132), (1342), (13)(24), 1432, (142), (1423) \}$$

Si llamamos \overline{G}_4^{II} al complementario de G_4^{II} en S_4 , este conjunto estará formado por las doce permutaciones que sí intercambian las posiciones relativas de 1 y 2.

Obviamente:

$$(12) G_4^{II} = \overline{G}_4^{II} = \{(12), (12)(34), (123), (1234), (1243), (124), (13), (134), (1324), (143), (14), (14)(23)\}$$

Teniendo en cuenta las anteriores consideraciones así como la ecuación (a3.3), podemos reescribir la ecuación (a3.2) en la forma:

$$\begin{aligned} T(i = k) &= \frac{1}{4} \sum_{g \in G_4^{II}} \left(\left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ e & g[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ (12) & g[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \right) \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & a & c \\ g[i & i, & a & c] \end{matrix} \right\} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{g \in G_4^{II}} \left(\left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ e & g[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & a & c \\ g[i & i, & a & c] \end{matrix} \right\} + \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ (12) & g[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & a & c \\ g[i & i, & a & c] \end{matrix} \right\} \right) \end{aligned} \quad (a3.4)$$

En la secuencia $(i i a c)$ el primer y segundo índices coinciden. Por tanto, es evidente que

$$e g [i i, a c] = (12) g [i i, a c]$$

con lo cual,

$$\sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & a & c \\ g[i & i, & a & c] \end{matrix} \right\} = \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & a & c \\ e & g[i & i, & a & c] \end{matrix} \right\} = \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & a & c \\ (12) & g[i & i, & a & c] \end{matrix} \right\} \quad (a3.5)$$

Teniendo en cuenta la igualdad (a3.5), la expresión (a3.4) queda:

$$T(i = k) = \frac{1}{4} \sum_{\mathfrak{g} \in G_4^{\parallel}} \left(\left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ e & \mathfrak{g} & [1 & 2, 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, a & c \\ e & \mathfrak{g} & [i & i, a & c] \end{matrix} \right\} + \right. \\ \left. + \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ (12) & \mathfrak{g} & [1 & 2, 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, a & c \\ (12) & \mathfrak{g} & [i & i, a & c] \end{matrix} \right\} \right) \quad (\text{a3.6})$$

Si hacemos $(12) \mathfrak{g} = \overline{\mathfrak{g}} \in \overline{G}_4^{\parallel}$ y tenemos en cuenta que $e \mathfrak{g} = \mathfrak{g}$, la ecuación a3.6 quedará:

$$T(i = k) = \frac{1}{4} \sum_{\mathfrak{g} \in G_4^{\parallel}} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \mathfrak{g} & [1 & 2, 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, a & c \\ \mathfrak{g} & [i & i, a & c] \end{matrix} \right\} + \\ + \frac{1}{4} \sum_{\overline{\mathfrak{g}} \in \overline{G}_4^{\parallel}} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \overline{\mathfrak{g}} & [1 & 2, 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, a & c \\ \overline{\mathfrak{g}} & [i & i, a & c] \end{matrix} \right\}$$

Esta última expresión puede compactarse en la forma:

$$T(i = k) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{\mathfrak{P}} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hat{\mathfrak{P}} & [1 & 2, 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, a & c \\ \hat{\mathfrak{P}} & [i & i, a & c] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.7})$$

(obsérvese que $G_4^{\parallel} \cap \overline{G}_4^{\parallel} = \emptyset$ y que $G_4^{\parallel} \cup \overline{G}_4^{\parallel} = S_4$)

Un razonamiento análogo conduce a los términos correspondientes para las restantes composiciones de $[2 \ 1^2]$. A saber:

$$T(i = a) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{\mathfrak{P}} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hat{\mathfrak{P}} & [1 & 2, 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,k,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & k, i & c \\ \hat{\mathfrak{P}} & [i & k, i & c] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.8.a})$$

$$T(i = c) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{\mathfrak{P}} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hat{\mathfrak{P}} & [1 & 2, 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,k,a}^K \left\{ \begin{matrix} i & k, a & i \\ \hat{\mathfrak{P}} & [i & k, a & i] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.8.b})$$

$$T(k = a) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{\mathfrak{P}} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hat{\mathfrak{P}} & [1 & 2, 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,k,a}^K \left\{ \begin{matrix} i & k, k & c \\ \hat{\mathfrak{P}} & [i & k, k & c] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.8.c})$$

$$T(k=c) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2 & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,k,a}^K \left\{ \begin{matrix} i & k & a & k \\ \hat{P}[i & k & a & k] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.8.d})$$

$$T(a=c) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2 & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,k,a}^K \left\{ \begin{matrix} i & k & a & a \\ \hat{P}[i & k & a & a] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.8.e})$$

2) Índices repetidos obedeciendo al tipo de partición [2²].

También en este caso el tratamiento es idéntico para las tres composiciones compatibles. Vamos a centrar nuestro estudio en la primera de ellas $i = k, a = c$. El término correspondiente será:

$$T \left(\begin{matrix} i=k \\ a=c \end{matrix} \right) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P}_R \in R_4^{II,II}} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1 & 3 & 3 \\ \hat{P}_R[1 & 1 & 3 & 3] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i & i & a & a \\ \hat{P}_R[i & i & a & a] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.9})$$

$R_4^{II,II}$ es el conjunto de las permutaciones con repetición distintas que pueden formarse con los índices 1, 1, 3, 3 (ó equivalentemente con i, i, a, a).

$$R_4^{II,II} = \{ (1 \ 1 \ 3 \ 3), (1 \ 3 \ 1 \ 3), (1 \ 3 \ 3 \ 1), (3 \ 1 \ 1 \ 3), (3 \ 1 \ 3 \ 1), (3 \ 3 \ 1 \ 1) \} \quad (\text{a3.10})$$

$\hat{P}_R[1 \ 1, \ 3 \ 3]$ es cualquier elemento de $R_4^{II,II}$.

Por otra parte, aplicando dos veces consecutivas la ecuación (2.22), podemos expresar cualquier coeficiente del tipo

$$\left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1 & 3 & 3 \\ \hat{P}_R[1 & 1 & 3 & 3] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle$$

en función de coeficientes sin índices repetidos. En efecto:

$$\left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1 & 3 & 3 \\ \hat{P}_R[1 & 1 & 3 & 3] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hat{Q}[1 & 2 & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ (12) \hat{Q}[1 & 2 & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle +$$

$$+ \left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ (34) \hat{Q}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ (12)(34) \hat{Q}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \quad (\text{a3.11})$$

donde \hat{Q} es la permutación de S_4 representativas de las siguientes ordenaciones:

$$\{1234, 1324, 1342, 3124, 3142, 3412\}$$

Si llamamos $G_4^{II,II}$ al conjunto de las permutaciones \hat{Q} , éste será el subconjunto de S_4 formado por aquellas permutaciones que mantienen, por separado, las posiciones relativas de 1 y 2 y de 3 y 4.

$$G_4^{II,II} = \{e, (23), (234), (132), (1342), (13)(24)\}.$$

En cuanto al factor de interacción de la ecuación a3.9, es fácil ver que cada una de las seis ordenaciones distintas $P_R[i i, a a]$ es obtenible a partir de cada una de las seis permutaciones de $G_4^{II,II}$.

Esta correspondencia biunívoca entre las ordenaciones $P_R[i i, a a]$ y las permutaciones de $G_4^{II,II}$ hace posible la identificación:

$$\sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i i, a a \\ \hat{P}_R[i i, a a] \end{matrix} \right\} = \sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i i, a a \\ \hat{Q}[i i, a a] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.12})$$

Llevando la ecuación (a3.11) a la ecuación (a3.9) y teniendo en cuenta la igualdad (a3.12), tenemos que:

$$T \left(\begin{matrix} i=k \\ a=c \end{matrix} \right) = \frac{1}{4} \sum_{Q \in G_4^{II,II}} \left(\left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ e \hat{Q}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ (12) \hat{Q}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle + \right. \\ \left. + \left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ (34) \hat{Q}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ (12)(34) \hat{Q}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \right) \sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i i, a a \\ \hat{Q}[i i, a a] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.13})$$

Si tenemos en cuenta que,

$$\sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i i, a a \\ \hat{Q}[i i, a a] \end{matrix} \right\} = \sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i i, a a \\ (12) \hat{Q}[i i, a a] \end{matrix} \right\} = \sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i i, a a \\ (34) \hat{Q}[i i, a a] \end{matrix} \right\} = \sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i i, a a \\ (12)(34) \hat{Q}[i i, a a] \end{matrix} \right\}, \quad (\text{a3.14})$$

la ecuación (a3.13) puede reescribirse como:

$$T \left(\begin{matrix} i = k \\ a = c \end{matrix} \right) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{Q} \in G_4^{\text{II,II}}} \sum_{\hat{B} \in H} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ \hat{B} \hat{Q}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i i, a a \\ \hat{B} \hat{Q}[i i, a a] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.15})$$

donde $H = \{e, (12), (34), (12)(34)\} \subset S_4$, en particular $H G_4^{\text{II,II}} = S_4$. Por consiguiente tenemos finalmente que:

$$T \left(\begin{matrix} i = k \\ a = c \end{matrix} \right) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ \hat{P}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i i, a a \\ \hat{P}[i i, a a] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.16})$$

Un procedimiento idéntico conduce a los términos correspondientes para las restantes composiciones de $[2^2]$. A saber:

$$T \left(\begin{matrix} i = a \\ k = c \end{matrix} \right) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ \hat{P}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,k}^K \left\{ \begin{matrix} i k, i k \\ \hat{P}[i k, i k] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.17a})$$

$$T \left(\begin{matrix} i = c \\ k = a \end{matrix} \right) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ \hat{P}[12,34] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,k}^K \left\{ \begin{matrix} i k, k i \\ \hat{P}[i k, k i] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.17b})$$

3) Índices repetidos obedeciendo al tipo de partición $[3\ 1]$.

Centraremos nuestro estudio en la primera de las cuatro composiciones posibles ($i = k = a, c$). El término correspondiente será:

$$T(i = k = a) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P}_R \in R_4^{\text{III}}} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 11,14 \\ \hat{P}_R[11,14] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,c}^K \left\{ \begin{matrix} i i, i c \\ \hat{P}_R[i i, i c] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.18})$$

donde ahora $R_4^{\text{III}} = \{(1\ 1\ 1\ 4), (1\ 1\ 4\ 1), (1\ 4\ 1\ 1), (4\ 1\ 1\ 1)\}$. De acuerdo con la ecuación 2.16 tenemos:

$$\left\langle\left\langle \begin{matrix} 11,14 \\ \hat{P}_R[11,14] \end{matrix} \right\rangle\right\rangle = \sum_{\hat{Q} \in S_3} \left\langle\left\langle \begin{matrix} 12,34 \\ \hat{Q} \mathfrak{g}[\tilde{1}\tilde{2},\tilde{3}4] \end{matrix} \right\rangle\right\rangle \quad (\text{a3.19})$$

\hat{Q} actúa únicamente sobre los índices con tilde, \mathfrak{g} es la permutación de S_4 que resulta cuando en $\hat{P}_R \in R_4^{\text{III}}$ dejamos el primer 1 como tal y cambiamos por 2 y 3 el segundo y tercer 1, respectivamente. Tenemos las correspondencias:

$\hat{P}_R \in R_4^{\text{III}}$		$\mathfrak{g} \in S_4$
1 1 1 4	1 2 3 4	e
1 1 4 1	1 2 4 3	(34)
1 4 1 1	1 4 2 3	(243)
4 1 1 1	4 1 2 3	(1432)

Llamemos G_4^{III} al conjunto formado por las cuatro permutaciones \mathfrak{g} . G_4^{III} será por tanto, el subconjunto de S_4 integrado por aquellas permutaciones que mantienen inalteradas las posiciones relativas de los índices 1, 2 y 3.

Al igual que en los casos anteriores, existe una correspondencia biunívoca entre la totalidad de las ordenaciones $P_R[11,14]$ y las permutaciones de G_4^{III} . Si además tenemos en cuenta la igualdad de los tres primeros índices de la secuencia $[i i, i c]$ que aparece en los factores de interacción, podemos establecer las siguientes igualdades:

$$\sum_{i,c}^K \left\{ \begin{matrix} i i, i c \\ \hat{P}_R[i i, i c] \end{matrix} \right\} = \sum_{i,c}^K \left\{ \begin{matrix} i i, i c \\ Q \mathfrak{g}[\tilde{i}\tilde{i}, \hat{i} c] \end{matrix} \right\} \quad \forall Q \in S_3 \quad (\text{a3.20})$$

donde Q actúa sobre los índices con tilde.

Llevando a3.19 y a3.20 a a3.18, y teniendo en cuenta que $S_3 G_4^{\text{III}} = S_4$, tenemos:

$$T(i = k = a) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,c}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & i & c \\ \hat{P}[i & i, & i & c] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.21})$$

$$T(i = k = c) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,a}^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & a & i \\ \hat{P}[i & i, & a & i] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.22})$$

$$T(i = a = c) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,k}^K \left\{ \begin{matrix} i & k, & i & i \\ \hat{P}[i & k, & i & i] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.23})$$

$$T(k = a = c) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_{i,k}^K \left\{ \begin{matrix} i & k, & k & k \\ \hat{P}[i & k, & k & k] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.24})$$

4) Indices repetidos obedeciendo al tipo de partición [4].

Una sola composición es posible en este caso. El término correspondiente es:

$$T(i = k = a = c) = \frac{1}{4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 1, & 1 & 1 \\ 1 & 1, & 1 & 1 \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_i^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & i & i \\ i & i, & i & i \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.25})$$

La simple aplicación de la ecuación 2.16 conduce a

$$T(i = k = a = c) = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle \sum_i^K \left\{ \begin{matrix} i & i, & i & i \\ \hat{P}[i & i, & i & i] \end{matrix} \right\} \quad (\text{a3.26})$$

Pues bien, si en la ecuación a3.1 sustituimos el sumando [términos con índices repetidos] por las expresiones obtenidas aquí para dichos términos y, a continuación, sacamos $\frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle$ factor común, tenemos finalmente

que:

$$\text{Tr } H^2 = \frac{1}{4} \sum_{\hat{P} \in S_4} \left\langle \left\langle \begin{matrix} 1 & 2, & 3 & 4 \\ \hat{P}[1 & 2, & 3 & 4] \end{matrix} \right\rangle \right\rangle_{i, k, a, c} \left\{ \begin{matrix} i & k, & a & c \\ \hat{P}[i & k, & a & c] \end{matrix} \right\} + \quad (\text{a3.27})$$

sin ninguna restricción sobre las etiquetas i, k, a, c del sumatorio, con lo que queda ilustrada la obtención de la ecuación (2.25) para el caso del segundo momento.

APENDICE 4

APENDICE 4.- Generación de los esqueletos de Hugenholtz para el cuarto momento centrado de la distribución espectral del Hamiltoniano

En este apéndice vamos a ver cómo obtener todos los esqueletos de Hugenholz dibujados en la Figura 3.14. Para ello, puesto que estamos considerando la cuarta potencia del hamiltoniano, construimos los esqueletos de Hugenholz que tienen cuatro puntos cruzados por dos líneas. Hasta cuarto orden de MBPT estos esqueletos son fácilmente obtenibles de la bibliografía (Szabo y Ostlund 1982, p. 538). Su construcción a mano tampoco es demasiado complicada de realizar. Puesto que permitimos las permutaciones entre puntos (es decir, dado un diagrama, consideramos todas sus posibles versiones temporales como equivalentes), puede comprobarse fácilmente que los doce esqueletos que aparecen en el cuarto orden MBPT (Szabo y Ostlund 1982) son equivalentes a alguno de los esqueletos a, b y c de la figura 3.14, los cuales no son equivalentes entre si. Además de estos tres esqueletos debemos incluir los esqueletos no conexos. Ahora bien, puesto que debemos tener esqueletos de cuatro puntos, los no conexos considerados serán (3-puntos + 1-punto) y (2-puntos + 2-puntos). No hay otras posibilidades. Por otra parte, los esqueletos de 1 punto representan a $\text{Tr}(J)$ o $\text{Tr}(K)$. Estas trazas se consideran nulas para el cálculo de momentos centrados; y por tanto, aquellos esqueletos no conexos que contengan subesqueletos de 1 punto deben ser ignorados. En nuestro caso esto se traduce en que los únicos esqueletos no conexos que pueden aparecer son del tipo (2-puntos + 2-puntos). Los esqueletos de dos puntos corresponden a la expansión MBPT de segundo orden. Puesto que de este orden sólo hay un esqueleto (Fig. 3.16.a), habrá también una única posibilidad para esqueletos (2-puntos + 2-puntos). Tal posibilidad corresponde al diagrama 3.14.k. Ya tenemos todos los esqueletos con puntos de dos líneas:



Figura a4.1

A continuación vamos a ver cómo obtener a partir de los anteriores esqueletos, aquellos que contengan puntos de una sola línea. Para ello proponemos dos estrategias.

1.- La primera estrategia consiste en elegir los cuatro diagramas de la Figura a4.1 y cortar, de todas las formas posibles, parejas de líneas pertenecientes al mismo punto. Después unimos las líneas cortadas de forma diferente a la original. La única restricción es que no deben aparecer diagramas no conexos[†]. Por ejemplo, del esqueleto a4.1.c desarrollamos el esquema representado por la Figura a4.2 (han sido omitidas aquellas etapas que por razones de simetría resultan equivalentes).

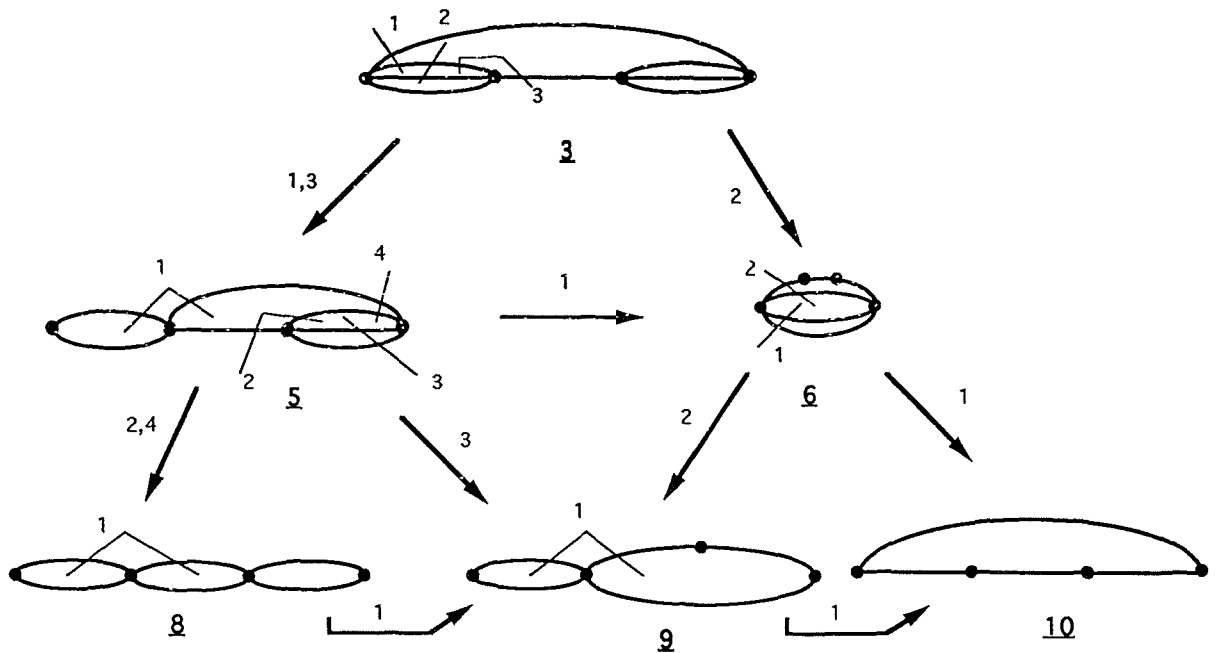


Figura a4.2

2.- Una segunda estrategia nos permitirá alcanzar los mismos resultados que la anterior. Para ello, consideramos en primer lugar el tipo de esqueletos que deseemos obtener. Puesto que estamos considerando la cuarta potencia,

[†]Esta restricción se impone para evitar la innecesaria repetición de diagramas que uno puede ir generando

queremos obtener esqueletos de cuatro puntos. Para ello tenemos las siguientes posibilidades:

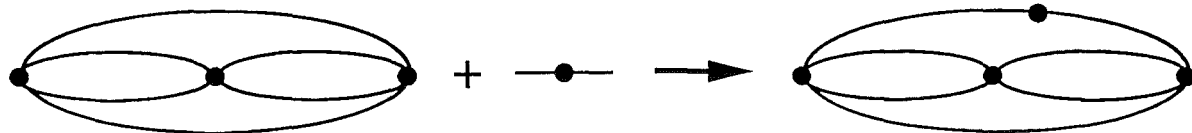
- Cuatro puntos de 2-líneas.
- Tres puntos de 2-líneas y un punto de una línea.
- Dos puntos de 2-líneas y dos puntos de una línea.
- Un punto de 2-líneas y tres puntos de una línea.
- Cuatro puntos de 1-línea.

a) Cuatro puntos de 2-líneas: (X X X X): La conexión de estos cuatro puntos en todas las formas posibles (excluyendo los *cortocircuitos* de líneas que darían lugar a puntos cruzados por una sola línea) nos conduce a los diagramas *a*, *b* y *c* de la figura 3.14, después de considerar equivalentes todas las versiones temporales de cada diagrama dado.

b) Tres puntos de 2-líneas y un punto de una línea: (X X X --): El punto de una línea puede conectarse a dos diferentes puntos de 2-líneas o a un único punto de 2-líneas. Esta última posibilidad es equivalente a eliminar un punto de dos líneas, es decir:



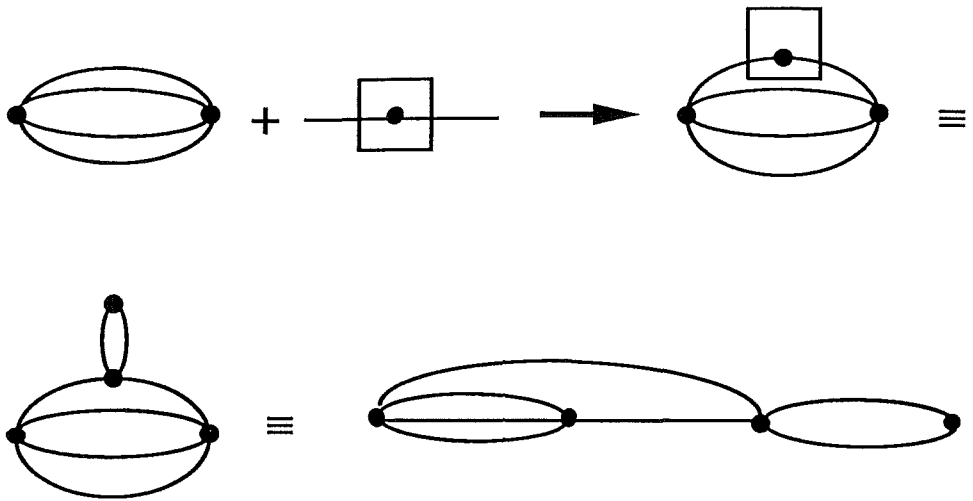
b.1) Cuando un punto de 1-línea se conecta a dos diferentes puntos de 2-líneas, obtenemos todas los posibles diagramas de tres puntos de 2-líneas de MBPT en los que se ha adicionado un punto extra (de 1-línea) en todas las posiciones posibles. La expansión MBPT de tercer orden tiene un único esqueleto de tres puntos de 2-líneas. Al adicionar un punto de 1-línea tenemos una sola posibilidad esencialmente distinta:



La adición del punto de 1-línea en todas las posibles posiciones nos dará diagramas equivalentes (versiones temporales del diagrama anterior).

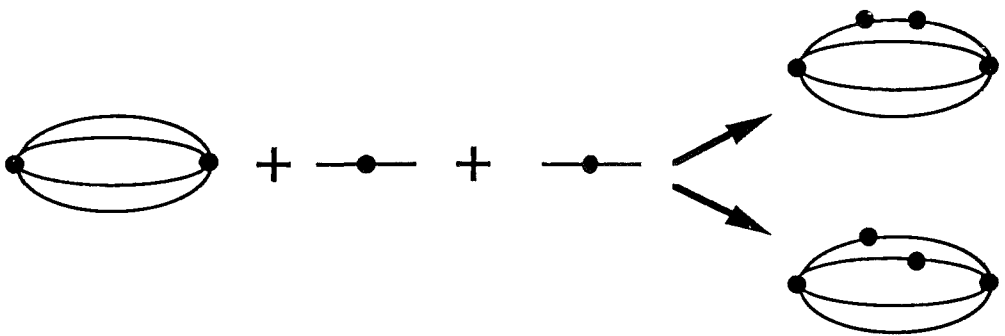
b.2) El punto de 1-línea es conectado a un único punto de dos líneas. Puesto que esto es equivalente a eliminar un punto de 2-líneas, tomaremos los esqueletos de

la expansión MBPT de segundo orden que contengan dos puntos de 2-líneas. Sólo se presenta un caso (Figura 3.16.a), el cual conduce a:



c) Dos puntos de 2-líneas y dos puntos de 1-línea: (X X --- ---)

c.1) Los dos puntos de 2-líneas están unidos entre sí, por lo que formarán un esqueleto de dos puntos de 2-líneas (el único que aparece de este tipo en segundo orden MBPT). Entonces, tendremos dos posibilidades de conectar los dos puntos de 1-línea:

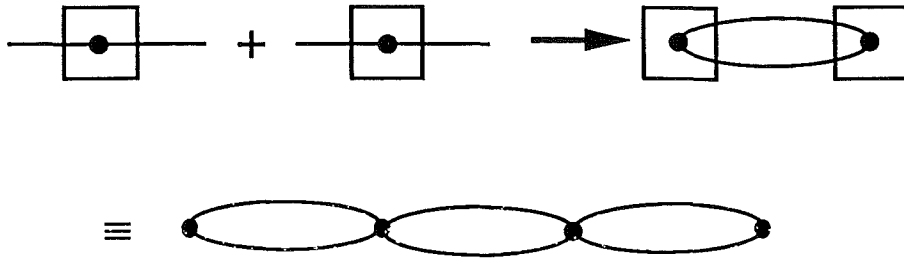


c.2) Un punto de 1-línea bloquea a otro de 2-líneas (X + --- = >). Como consecuencia de ello, el conjunto queda con un único punto "efectivo" de 2-líneas y, por tanto, la única posibilidad de conexión global es:

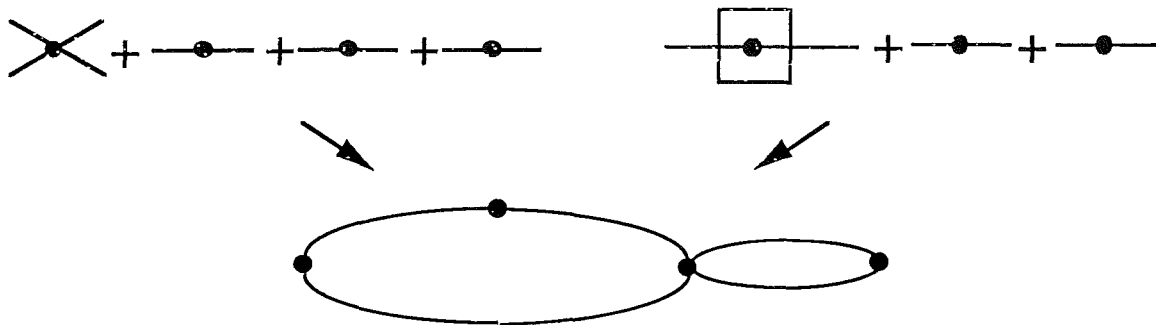




c.3) Dos puntos de 1-línea bloquean sendos puntos de 2-líneas. Como consecuencia, el conjunto queda sin ningún punto "efectivo" de dos líneas. El resultado es idéntico al caso c.2:



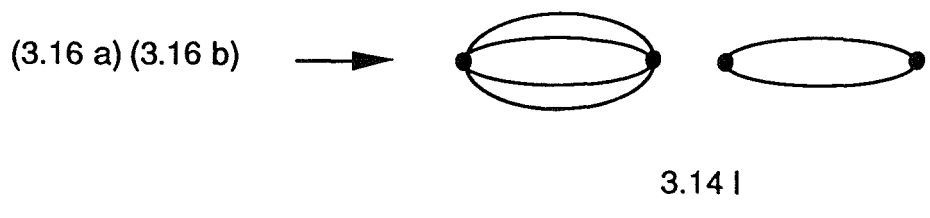
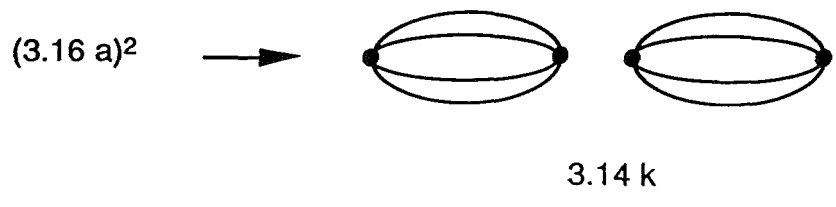
d) Un punto de 2-líneas y tres de 1 línea (X --- --- ---): Existen dos posibilidades de conexión que son equivalentes:



e) Cuatro puntos de 1-línea (--- --- --- ---): Hay un solo caso posible:



Vemos, por tanto, que hemos podido construir, paso a paso, todos los esqueletos conexos. Los no conexos son combinaciones de los esqueletos correspondientes a las potencias mas bajas. En el caso que nos ocupa, los diagramas no conexos resultan de combinar los dos esqueletos de la segunda potencia (ver Figura 3.16). Tenemos tres posibilidades:



CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

El desarrollo del trabajo presentado en esta Tesis Doctoral nos ha permitido llegar a las conclusiones que a continuación se relacionan:

1. Hemos encontrado y demostrado el Teorema representado por la ecuación (2.23). Este Teorema tiene una importancia capital puesto que conduce a una relación muy sencilla y simétrica entre las trazas de productos de operadores de densidad con etiquetas repetidas y trazas de productos de dichos operadores sin etiquetas repetidas. La relación es tal que permite, a su vez, una completa factorización de la expresión de los momentos en suma de productos de relativamente pocos factores de interacción y coeficientes de propagación
2. Hemos desarrollado un método diagramático que hace uso de los diagramas de Goldstone y Hugenholtz y permite la identificación, etiquetaje y evaluación de los factores de interacción que aparecen en las fórmulas de los momentos.
- 3.- Hemos desarrollado un método computacional que automatiza esta labor, lo que es fundamental para el cálculo de momentos superiores al tercero.
4. Hemos desarrollado un método algebraico basado en el concepto de enganche superior que permite la identificación y etiquetaje de los coeficientes de propagación que aparecen en las fórmulas de los momentos. La evaluación de los coeficientes de propagación también forma parte de los resultados de la presente Tesis.

La síntesis de estas cuatro primeras conclusiones es que hemos encontrado una **formulación general** para los momentos de la distribución espectral del hamiltoniano FCI de un sistema de fermiones interaccionantes.

5. Hemos desarrollado la formulación general para los momentos en términos de magnitudes adaptadas al grupo S_2 . Ello permite ver cómo las interacciones

entre un par de electrones efectivos con acoplamiento de spin singulete y triplete son transmitidas al sistema N-electrónico.

6. Abundando en el problema de la reducción, hemos encontrado una **relación universal**, en el límite de espacio de Hilbert completo, entre los n -ésimos momentos de la distribución espectral del par efectivo de electrones con acoplamiento de spin singulete y triplete y el n -ésimo momento de la distribución espectral del hamiltoniano del sistema N-electrónico con acoplamiento arbitrario S de spin.

7. Finalmente hemos de resaltar que hemos encontrado toda una serie de teoremas, fórmulas y desarrollos colaterales a lo largo del desarrollo de la Tesis, y que vienen recogidos en la presente memoria, que presentan interés en ellos mismos. Como por ejemplo la formulación del teorema de Wick para productos de RDOs sin repetición de índices así como todos los lemas y teoremas del capítulo 2.

REFERENCIAS

Bancewicz M and Karwowski J 1987 *Physica* **145C** 241

Bancewicz M and Karwowski J 1991 *Phys. Rev. A* **44** 3054

Bancewicz M Diercksen G H F and Karwowski J 1989 *Physical Review A* **40** 5507

Bauche J and Bauche-Arnoult C 1990 *Comput. Phys. Rep.* **12** 1

Bauche J Bauche-Arnoult C and Klapisch M 1988 *Adv. Atom. Molec. Phys.* **23** 132

Bauche-Arnoult C and Bauche J 1992 *Physica Scripta T* **40** 58

Bauche-Arnoult C Bauche J and Klapisch M 1979 *Phys. Rev. A* **20** 2424

Bauche-Arnoult C Bauche J and Klapisch M 1982 *Phys. Rev. A* **25** 2641

Bauche-Arnoult C Bauche J and Klapisch M 1985 *Phys. Rev. A* **31** 2248

Bethe H A 1936 *Phys. Rev.* **50** 332

Bopp F 1959 *Z. Phys.* **156** 348

Brandow B H 1967 *Rev. Mod. Phys.* **39** 771

Brody T A Flores J French J B Mello P A Pandey A and Wong S S M 1981 *Rev. Mod. Phys.* **53** 385

Coleman A J 1965 *Rev. Mod. Phys.* **35** 668

Coleman A J 1987 "Density Matrices and Density Functionals", Proceeding of the A.J. Coleman Symposium, Kingston, Ontario, 1985, edited by R. Erdahl and V. Smith (Reidel, Dordrecht)

Cowan R D 1981 "The Theory of Atomic Structure and Spectra" (Berkeley, CA: University of California Press) cap. 21

Chang F S French J B and Thio T H 1971 *Ann. Phys. NY* **66** 137

Diercksen G H F and Karwowski J 1987 *Comput. Phys. Commun.* **47** 83

Diercksen G H F Duch W and Karwowski J 1990 *Phys. Rev. A* **41** 3503

Dinesha K. V. Sarma C. R. and Rettrup S. 1981 *Advan. Quantum Chem* **14** 125

Duch W 1986 "GRMS or Graphical Representations of Model Spaces", Lecture Notes in Chemistry, vol.42 (Springer: Berlin)

Duch W and Karwowski J 1981 in "The Unitary Group for the Evaluation of Electronic Energy Matrix Elements" Lecture Notes in Chemistry vol 22 (Hinze J ed., Springer Berlin) p.260

Duch W and Karwowski J 1985 *Comput. Phys. Rep.* **2** 95

- Erdahl R and Smith V H (Editors), 1987 "Density Matrices and Density Functionals" (Dordrecht, D. Reidel)
- French J B 1974 Rev. Mex. Fis. **23** 189
- French J B and Kota V K B 1982 Annual Review of Nuclear and Particle Science ed. J D Jackson, H E Gove and R F Schwitters (Palo Alto, CA: Annual Reviews) p 35
- Fulling S A., King R.C., Wybourne B.G. and Cummins C.J. 1992 Class Quantum Grav. **9** 1151
- Ginocchio J N 1973 Phys. Rev. C **8** 135
- Hamermesh N 1964 Group Theory and its Applications to Physical Problems (Reading MA: Addison-Wesley), p 215
- Jorgensen P and Simons J 1981 "Second Quantization-based Methods in Quantum Chemistry" (Academic, New York)
- Kaplan I G 1975 "Symmetry of many-electron Systems" (Academic Press, New York)
- Karazija R 1989 Lietuvos Fizikos Rinkinys **29** 131
- Karazija R 1991 Sums of Atomic Quantities and Mean Characteristics of Spectra (Vilnius: Mokslas), (en Ruso)
- Karazija R and Rudzikajte L 1988 Lietuvos Fizikos Rinkinys **28** 294
- Karwowski J 1973 Theoret. Chim. Acta **29** 151
- Karwowski J 1973, Chem. Phys. Lett. **19** 279
- Karwowski J and Bancewicz M 1987 J. Phys. A: Math. Gen **20** 6309
- Karwowski J Duch W and Valdemoro C 1986 Phys. Rev. A **33** 2254
- Kendal M_G 1943 "The Advanced Theory of Statistics", (Charles Griffin, London) Volumen I
- Kotani M Amemiya A Ishiguro E and Kumura T 1955, "Table of Molecular Integrals" (Maruzen, Tokyo).
- Koutecky J and Laforgue A 1977 Int. J. Quantum Chem. **11** 505
- Kummer H 1967 J. Math. Phys **8** 2063
- Kutzelnigg W 1985 J. Chem. Phys. **82** 4166
- Lain L, Torre A, Karwowski J and Valdemoro C 1988 Phys. Rev. A **38** 2721
- Lowdin P O 1955 Phys. Rev. **97** 1509

- Lowdin P O 1959 *Advan. Chem. Phys.* **2** 207
- Matsen F A 1978 *Advan. Quantum Chem* **11** 223
- Mattuck R D 1976 "A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem" (McGraw-Hill, New York)
- McWeeny R 1960 *Rev. Mod. Phys.* **32** 335
- McWeeny R 1989 "Methods of Molecular Quantum Mechanics" 2nd Ed. (Academic, London)
- Mon K K and French J B 1975 *Ann. Phys. NY* **95** 90
- Moshinsky M 1968 "Group Theory and the Many-Body Problem. (Gordon and Breach Eds., New York)
- Nomura M 1972 *Progr. Theor. Phys.* **48** 110
- Nomura M 1974 *Prog. Theor. Phys.* **51** 489
- Nomura M 1985 *J. Math. Phys.* **26** 732
- Nomura M 1985 *J. Math. Phys.* **26** 738
- Nomura M 1985 *J. Math. Phys.* **26** 965
- Nomura M 1986 *J. Math. Phys.* **27** 536
- Paldus J 1974 *J. Chem. Phys.* **61** 5321
- Paldus J 1975 *Int. Journal Quantum Chem.* **S9** 165
- Paldus J 1976 in *Theoretical Chemistry: Advances and Perspectives* ed H Eyring and D J Henderson (New York: Academic) p 131
- Paldus J 1991 "Diagrammatic Methods for many-electron systems", Lecture Notes (University of Nijmen, Holland)
- Paldus J 1992 in "Methods in Computational Molecular Physics" vol. 293 of NATO ASI Series, edited by S. Wilson and G.H.F. Diercksen (Plenum, New York), p. 99
- Paldus J 1994 in "Relativistic and Correlation Effects in Molecules and Solids" vol. XX of NATO ASI Series, edited by G.L. Malli (Plenum, New York, in press)
- Paldus J and Cizek J 1976 in "Advanced in Quantum Chemistry" vol. 9 (Academic, New York) p. 106
- Pauncz R 1979 "Spin Eigenfunctions" (Plenum, New York)
- Planelles J and Karwowski J 1990 *J. Phys. A: Math. Gen.* **23** 5083
- Planelles J and Karwowski J 1992 *Theoret. Chim. Acta* **82** 239

- Planelles J Valdemoro C and Karwowski J 1990 Phys. Rev. A **41** 2391
- Planelles J Valdemoro C and Karwowski J 1991 Phys. Rev. A **43** 3392
- Porter C E 1965 "Statistical Theories of Spectra: Fluctuations" (Academic, New York)
- Rajadell F Planelles J and Karwowski J 1993 J. Phys. A: Math and Gen. **26** 3883
- Ratcliff K F 1971 Phys. Rev. C **3** 117
- Robb M A and Niazi U 1984 Comput. Phys. Rep. **1** 217
- Rosenzweig N and Porter C E 1960 Phys. Rev. **120** 1698
- Rudzikajte L and Karazija R 1989 Lietuvos Fizikos Rinkinys **29** 143
- Ruedenberg K 1971 Phys. Rev. Lett **27** 1105
- Szabo A and Ostlund N S 1982 "Modern Quantum Chemistry" (MacMillan, New York)
- Tung W 1985 "Group Theory in Physics" (World Scientific, Philadelphia)
- Valdemoro C 1985 Phys. Rev. A **31** 2114
- Valdemoro C 1985 Phys. Rev. A **31** 2123
- Valdemoro C 1987 in "Nuevas tendencias en Química Teórica" (Fraga S Ed, CSIC, Madrid) cap 7
- Van Lier C and Uhlenbeck G E 1937 Physica **4** 531
- Viciano P 1992 Tesis de Licenciatura, Universitat de València
- Viciano P and Planelles J 1992 "Introducción al formalismo de la Segunda Cuantificación en Química Cuántica", Publicacions de la Universitat Jaume I, Castelló
- Wilson S 1992 in "Methods of Computational Molecular Physics" vol. 293 of NATO ASI series, edited by S. Wilson and G.H.F. Dierksen (Plenum, New York) pp. 195, 253, 273
- Yeung Y Y and Newman D J 1985 J. Chem. Phys. **82** 3747
- Yeung Y Y and Newman D J 1986 J. Chem. Phys. **84** 4470