Problema de Schrödinger en Espacio de los momentos

Joel Acosta
joel.acosta@outlook.com

February 11, 2016

La ecuación de Schrodinger:

Transformando Fourier ambos lados de la ecuación y acomodando los términos se obtiene:

$$\left(E_n - \frac{k^2}{2}\right)\tilde{\phi}_{n,l}(\bar{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int V(\bar{r})\,\phi_{n,l}(\bar{r})\,e^{-i\bar{k}\cdot\bar{r}}d\bar{r} \tag{1}$$

Donde usualmente se usa que la transformada de un producto es ~~el producto~~ la convolución de las transformadas para reescribir la expresión:

$$\left(E_n - \frac{k^2}{2}\right)\tilde{\phi}_{n,l}(\bar{k}) = \int \tilde{\phi}_{n,l}(\bar{u}-\bar{k})\,\tilde{V}(\bar{u})\,d\bar{u} \tag{2}$$

Vamos a ver que esta última expresión no resulta conveniente a la hora de hacer los cálculos.

Transformada de Fourier esférica:

La integral que queremos resolver es

$$\tilde{\phi}(\bar{k}) = \int \mathrm{Y}_{l_1}^{m_1}(\hat{r})R(r)\,e^{-i\bar{r}\bar{k}}d\bar{r} \tag{3}$$

En la exponencial aparece el ángulo entre $\bar{k}$ y $\bar{r}$ que no es el mismo que el ángulo entre $\hat{z}$ y $\bar{r}$ Usamos la expansión de la onda plana:

$$e^{i\hat{k}\hat{r}} = \sum_l (2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\hat{k}\cdot\hat{r}) \tag{4}$$

en donde $j_l(rk)$ son las funciones esféricas de Bessel. Usamos el teorema de adición de los armónicos esféricos:

$$P_l(\hat{k}\cdot\hat{r}) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_m \mathrm{Y}_l^{m*}(\hat{r})\mathrm{Y}_l^m(\hat{k}) \tag{5}$$

La transformada de Fourier resulta

$$\tilde{\phi}(\bar{k}) = 4\pi i^l \sum_l \sum_m \mathrm{Y}_l^m(\hat{k})\int_\Omega \mathrm{Y}_{l_1}^{m_1}(\hat{r})\mathrm{Y}_l^{m*}(\hat{r})d\Omega \int_\infty R(r)j_l(kr)r^2dr \tag{6}$$

La integral angular es $\delta_{l_1,l}\,\delta_{m_1,m}$ que usamos para eliminar las sumatorias. Finalmente:

$$\tilde{\phi}(\bar{k}) = 4\pi i^{l_1}\mathrm{Y}_{l_1}^{m_1}(\hat{k})\int_\infty R(r)j_{l_1}(kr)r^2dr \tag{7}$$

Todo esto resulta operacionalmente ventajoso por dos motivos: Primero es una única integral en una sola variable. Segundo, nos podemos despreocupar de la parte angular

Finalmente, esto también "demuestra" la siguiente frase: **La transformada de Fourier de una función con una dada simetría angular, presenta la misma simetría.**

In [1]:
```
import time
from sympy import *
init_printing()

#Definimos todos los parametros que vamos a usar, darle informacion extra
#como que es real, o positivo, ayuda a la hora de integral

r=Symbol('r',positive=True)
z=Symbol('z',integrer=True,positive=True)
t=Symbol('t',positive=True)
k=Symbol('k',positive=True)

#\\ es equivalente a la \ en latex
theta=Symbol('\\theta',positive=True)
alpha=Symbol('\\alpha',positive=True)
phi=Symbol('\\varphi',positive=True)
beta=Symbol('\\beta',positive=True)
epsilon=Symbol('\\varepsilon',positive=True)
```

In [2]:
```
#Definimos las funciones radiales que vamos a usar (No le agrego
#la parte de los armonicos esfericos):

R1s=2*z**Rational(3,2)*exp(-z*r)
R2s=z**Rational(3,2)*exp(-z*r/2)/sqrt(8)*(2-z*r)
R2p=2*z**Rational(5,2)*exp(-z*r/2)/sqrt(24)*r
V=-z/r
```

In [3]:
```
#Vamos a definir las j que usamos
j0=sin(k*r)/(k*r)
j1=sin(k*r)/(k*r)**2-cos(k*r)/(k*r)
```

In [4]:
```
#Vamos a hacer la integral "mal" y compararla con la integral indiscutiblemente
#correcta, como curiosidad vamos a ver ademas el tiempo que tarda en devolver
#esta integral, fijense lo que pasa si primero integran en r y luego en \theta

tic=time.clock()
T_1s_mal=integrate(2*pi/sqrt(4*pi)*R1s*r**2*sin(theta)*exp(-I*k*r*cos(theta)),
                   (theta,0,pi),(r,0,oo))

time.clock()-tic,factor(simplify(T_1s_mal))
```

Out[4]:

$$\left(4.27806621466, \quad \frac{8\sqrt{\pi} z^{\frac{5}{2}}}{(k^2+z^2)^2}\right)$$

In [5]:
```
#Ahora la otra integral, el la salida se puede simplificar para que quede bien
tic=time.clock()
T_1s_bien=integrate(R1s*r**2*j0,(r,0,oo))
toc=time.clock()
toc-tic,simplify(4*pi/sqrt(4*pi)*T_1s_bien)
```

Out[5]:

$$\left(0.293894407574, \quad \frac{8\sqrt{\pi}z^{\frac{5}{2}}}{(k^2+z^2)^2}\right)$$

In [6]:
```
#Vamos con la 2s
T_2s=integrate(R2s*r**2*j0,(r,0,oo))
simplify(4*pi/sqrt(4*pi)*T_2s)
```

Out[6]:

$$\frac{32\sqrt{2}\sqrt{\pi}z^{\frac{5}{2}}\left(4k^2-z^2\right)}{(4k^2+z^2)^3}$$

In [7]:
```
#con el 2p, solo la parte radial, queda multiplicar por Y^1_0(\hat{k}) que
#junto con el k que queda en el numerador forma el producto
#escalar de k con el versor z

T_2p=integrate(R2p*r*r*j1,(r,0,oo))
factor(simplify(T_2p))
```

Out[7]:

$$\frac{128\sqrt{6}kz^{\frac{7}{2}}}{3(4k^2+z^2)^3}$$

In [8]:
```
#Vamos a ver ahora las dificultades con la transformada del potencial:
# primero con la forma "incorrecta"
integrate(V*r*r*sin(theta)*exp(-I*k*r*cos(theta)),(theta,0,pi),(r,0,oo))
#No se por que no dice que no converge, devuelve esta expresion
```

Out[8]:

$$\frac{iz}{k}\int_0^{\infty}\left(e^{ikr}-1\right)\left(e^{ikr}+1\right)e^{-ikr}\,dr$$

In [9]:
```
#Vamos con el Yukawa
tic=time.clock()
T_V=integrate(2*pi*V*r*r*exp(-epsilon*r)*sin(theta)*exp(-I*r*k*cos(theta))/
              sqrt(2*pi)**3,(theta,0,pi),(r,0,oo))
toc=time.clock()

toc-tic,simplify(T_V)
```

Out[9]:

$$\left(3.49558839691, \quad -\frac{\sqrt{2}z}{\sqrt{\pi}(\varepsilon^2+k^2)}\right)$$

In [10]:
```
#Esto es usando la Bessel, aparece un termino dudoso, pero no es el potencial
#de Yukawa
integrate(4*pi*V*r*r*j0/sqrt(2*pi)**3,(r,0,oo))
```

Out[10]:

$$-\frac{\sqrt{2}z}{\sqrt{\pi}k^2}+\frac{\sqrt{2}z}{\sqrt{\pi}k^2}\cos(\infty)$$

In [11]:
```
#Ahora la integral del Yukawa, usando las esfericas de Bessel
tic=time.clock()
T_V_b=integrate(4*pi*V*exp(-epsilon*r)*r*r*j0/sqrt(2*pi)**3,(r,0,oo))
toc=time.clock()
toc-tic,simplify(T_V_b)
```

Out[11]:

$$\left(0.265357790742, \quad -\frac{\sqrt{2}z}{\sqrt{\pi}(\varepsilon^2+k^2)}\right)$$

In [12]:
```
#Ahora que podemos transformar fourier, vamos a tratar con la convolución
Transf_V=limit(simplify(T_V_b),epsilon,0)
Transf_V
```

Out[12]:

$$-\frac{\sqrt{2}z}{\sqrt{\pi}k^2}$$

In [ ]:
```
#Vamos a calcular la convolución: Luego de 5 minutos devuelve:
#Integrando primero en theta:
#Don't know how to calculate the mrv of
#'Integral(t*log(-k/(2*t) - 1 - t/(2*k))/(t**2 + z**2), t)'

#Integrando primero en t.... me aburri antes de que terminara.
integrate(sqrt(z)**5/(t**2+z**2)*z/(k*k+t*t-2*k*t*cos(theta))*t*t*sin(theta),
          (theta,0,pi),(t,0,oo))
```

In [15]:
```
#Vamos a usar la forma razonble, vamos a hacer la transformada de
#producto de una, usando las funciones j,Vamos a poner TODOS los factos
#que corresponden y no los simplifico a mano para recordar de donde viene cada pi
tic=time.clock()
T_producto_1s=integrate(4*pi*V*R1s/sqrt(4*pi)*r*r*j0/sqrt(2*pi)**3,(r,0,oo))
time.clock()-tic,T_producto_1s
```

Out[15]:

$$\left(0.213258858962, \quad -\frac{\sqrt{2}z^{\frac{5}{2}}}{\pi k^2\left(1+\frac{z^2}{k^2}\right)}\right)$$

In [16]:
```
#Transformamos fourier la 1s con TODOS los factores que corresponden
T_1s=integrate(4*pi*R1s/sqrt(4*pi)*r*r*j0/sqrt(2*pi)**3,(r,0,oo))
```

In [17]:
```
#Esto es la ecuación de schrodiger en el espacio de momentos
#(recordar que la energia vale en este caso -z*z/2)

T_1s*(-z*z/2-k*k/2)-T_producto_1s
```

Out[17]:

$$\frac{2\sqrt{2}\left(-\frac{k^2}{2}-\frac{z^2}{2}\right)}{\pi z^{\frac{3}{2}}\left(\frac{k^2}{z^2}+1\right)^2} + \frac{\sqrt{2}z^{\frac{5}{2}}}{\pi k^2\left(1+\frac{z^2}{k^2}\right)}$$

In [18]:
```
#Le pido que la factorize para poder ver que es lo que es eso.
factor(T_1s*(-z*z/2-k*k/2)-T_producto_1s)
```

Out[18]:

$$0$$

In [19]:
```
#Vamos a repetir lo mismo con las funciones 2s y 2p(la energia vale -z*z/8)
T_2s=integrate(4*pi*R2s/sqrt(4*pi)*r*r*j0/sqrt(2*pi)**3,(r,0,oo))
T_producto_2s=integrate(4*pi*V*R2s/sqrt(4*pi)*r*r*j0/sqrt(2*pi)**3,(r,0,oo))
```

In [20]:
```
simplify(T_producto_2s),simplify(simplify(T_2s)*(-z*z/8-k*k/2))
```

Out[20]:

$$\left(\frac{2z^{\frac{5}{2}}\left(-4k^2+z^2\right)}{\pi(4k^2+z^2)^2}, \quad \frac{2z^{\frac{5}{2}}\left(-4k^2+z^2\right)}{\pi(4k^2+z^2)^2}\right)$$

In [21]:
```
#Aca hay que tener en cuenta el Y^1_1(r versor) pero como en los dos lados
#sale para afuera como Y^1_1(k versor) y se simplifican la parte que queda es....
#(Ya simplificando todos los factores de ambos lados)

T_2p=integrate(R2p*r*r*j1,(r,0,oo))
T_producto_2p=integrate(V*R2p*r*r*j1,(r,0,oo))
```

In [22]:
```
simplify(T_producto_2p),simplify(simplify(T_2p)*(-z*z/8-k*k/2))
```

Out[22]:

$$\left(-\frac{16\sqrt{6}kz^{\frac{7}{2}}}{3(4k^2+z^2)^2}, \quad -\frac{16\sqrt{6}kz^{\frac{7}{2}}}{3(4k^2+z^2)^2}\right)$$

In [ ]: