Transformada de Fourier de Funciones Hidrogénicas

Darío Mitnik

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)
```

In [2]:

```
# Definición de las funciones de onda Hidrogénicas
R1s=2*z**(3./2)*exp(-z*r)
R2s=z**(3./2)*exp(-z*r/2)/sqrt(8)*(2-z*r)
R2p=2*z**(5./2)*exp(-z*r/2)/sqrt(24)*r
V=-z/r
```

La integral que queremos resolver es

$$\tilde{\phi}_{n_i,l_i,m_i}(\vec{k}) = \int Y_{l_i}^{m_i}(\hat{r})\, R_{n_i l_i}(r)\, e^{-i\vec{r}\vec{k}} d\vec{r}$$

En la exponencial aparece el ángulo entre $\vec{k}$ y $\vec{r}$ (no es el mismo que el ángulo entre $\vec{z}$ y $\vec{r}$)

In [76]:

```
# Ejemplo:  Transformada de R_1s (No es la mejor forma!)

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[76]:

(2.790108, 8*sqrt(pi)*z**2.5/(k**2 + z**2)**2)

$$\frac{8\sqrt{(\pi)}z^{2.5}}{(k^2+z^2)^2}$$

In [5]:

```
# Forma correcta:
# Expandiendo la onda plana en Armónicos Esféricos
```

Usamos la expansión de la onda plana:

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

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

$$P_l(\hat{k}\cdot\hat{r}) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_m Y_l^{m*}(\hat{r})Y_l^m(\hat{k})\,.$$

La transformada de Fourier resulta

$$\tilde{\phi}(\vec{k}) = 4\pi i^l \sum_l \sum_m Y_l^m(\hat{k}) \int_\Omega Y_l^{m*}(\hat{r})Y_{l_i}^{m_i}(\hat{r})\, d\Omega \int_\infty R_{n_i l_i}(r)\, j_l(kr)\, r^2\, dr$$

La integral angular es $\delta_{l_i,l}\;\delta_{m_i,m}$ que usamos para eliminar las sumatorias.

Finalmente:

$$\tilde{\phi}(\vec{k}) = 4\pi i^{l_1} Y_{l_i}^{m_i}(\hat{k}) \int_\infty R_{n_i l_i}(r)\, j_{l_1}(kr)\, r^2\, dr$$

Todo esto resulta operacionalmente ventajoso por dos motivos:

- Es una unica integral en una sola variable.
- Nos podemos despreocupar de la parte angular.

Notar que la transformada de Fourier tiene la **misma simetría** que la función original.

In [6]:

```
#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 [7]:

```
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[7]:

```
(0.23345199999999977, 8*sqrt(pi)*z**2.5/(k**2 + z**2)**2)
```

$$\frac{8\sqrt{(\pi)}z^{2.5}}{(k^2+z^2)^2}$$

In [8]:

```
# Transformada de la función 2s

T_2s=integrate(R2s*r**2*j0,(r,0,oo))
simplify(4*pi/sqrt(4*pi)*T_2s)
```

Out[8]:

```
32*sqrt(2)*sqrt(pi)*z**2.5*(4*k**2 - z**2)/(4*k**2 + z**2)**3
```

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

Ejercicios:

- Comprobar que la Transformada de la función 2s es correcta
- Repetir el ejercicio para la función 2p

La Ecuación de Schrodinger en el Espacio de los Momentos:

Transformando Fourier ambos lados de la ecuación de Schrödinger se obtiene:

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

Vamos a comprobar que las funciones halladas previamente son efectivamente soluciones de esta nueva ecuación.

In [66]:

```
# Volvemos (por las dudas) a calcular la transformada de Fourier de 1s

rint=integrate(  R1s * j0 * r**2 ,(r,0,oo))
T1s = 1/(sqrt(2*pi))**3  * (4 * pi)/ sqrt(4*pi) * rint
simplify(T1s)
```

Out[66]:

```
2*sqrt(2)*z**2.5/(pi*(k**2 + z**2)**2)
```

$$\frac{2\sqrt{2z^5}}{\pi(k^2 + z^2)^2}$$

In [67]:

```
# Integramos el lado derecho

rint=integrate(V *  R1s * j0 * r**2 ,(r,0,oo))
rhs = 1/(sqrt(2*pi))**3  * (4 * pi)/ sqrt(4*pi) * rint
simplify(rhs)
```

Out[67]:

```
-sqrt(2)*z**2.5/(pi*(k**2 + z**2))
```

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

In [70]:

```
T1s*(-z*z/2 -k*k/2) - rhs
```

Out[70]:

```
2*sqrt(2)*z**(-1.5)*(-k**2/2 - z**2/2)/(pi*(k**2/z**2 + 1)**2) + sq
rt(2)*z**2.5/(pi*k**2*(1 + z**2/k**2))
```

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

In [71]:

```
simplify (T1s*(-z*z/2 -k*k/2) - rhs)
```

Out[71]:

```
0
```

Ejercicios:

- Comprobar que la Transformada de la función 2s es solución de la ecuación correspondiente
- Repetir el ejercicio para la función 2p