Tarea 4 Matemáticas Avanzadas de la Física

Cerritos Lira Carlos

7 de Abril del 2020

1.-

Usando el método de Frobenius, encontrar la solución general en todos los casos de los parámetros de la denominada *ecuación hipergeométrica*, dada por:

$$x(1-x)y'' + [\gamma - (\alpha+\beta+1)x]y' - \alpha\beta y = 0 \quad \alpha, \beta, \gamma \in C$$

Comprobar que las soluciones se escriben en términos de la *función hipergeométrica de Gauss*, definida como:

$$F(\alpha, \beta; \gamma; x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_k (\beta)_k}{(\gamma)_k} \frac{x^k}{k!}, \quad |x| < 1$$

donde $(\lambda)_k$ denota el símbolo de *Pochhammer*, definido recurrentemete por:

$$(\lambda_0) = 1, \quad (\lambda)_k = \lambda(\lambda+1)...(\lambda+k-1), \quad k = 1, 2, ...$$

Nuestra ecuación diferencial es de la forma:

$$y''(x) + p(x)y' + q(x)y = 0$$

donde:

$$p(x) = \frac{\gamma - (\alpha+\beta+1)x}{x(1-x)}$$

$$q(x) = -\frac{\alpha\beta}{x(1-x)}$$

obervamos que $f(x) = xp(x)$ y $g(x) = x^2 q(x)$ son analíticas en $x = 0$, por lo tanto es un punto singular regular, proponemos la solución:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+s}$$

$$y' = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s) x^{n+s-1}$$

$$y'' = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s)(n+s-1) x^{n+s-2}$$

sustituyendo en la ecuación hipergeométrica obtenemos:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s)(n+s-1) x^{n+s-1} - \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s)(n+s-1) x^{n+s}$$
$$+\gamma \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s) x^{n+s-1} - (\alpha+\beta+1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s) x^{n+s}$$
$$-\alpha\beta \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+s} = 0$$

movelos los índices para tener tener las mismas potenicas:

$$\begin{aligned}
&\sum_{n=0}^{\infty} a_n(n+s)(n+s-1)x^{n+s-1} - \sum_{n=1}^{\infty} a_{n-1}(n+s-1)(n+s-2)x^{n+s-1} \\
&+\gamma \sum_{n=0}^{\infty} a_n(n+s)x^{n+s-1} - (\alpha+\beta+1)\sum_{n=1}^{\infty} a_{n-1}(n+s-1)x^{n+s-1} \\
&-\alpha\beta \sum_{n=1}^{\infty} a_{n-1}x^{n+s-1} = 0
\end{aligned}$$

agrupando obtenemos:

$$a_0(s(s-1)+\gamma s) = 0$$
$$((n+s)(n+s-1)+\gamma(n+s))a_n + (-(n+s-1)(n+s-2)-(1+\alpha+\beta)(n+s-1)-\alpha\beta)a_{n-1} = 0$$

de la primer ecuación:

$$\begin{aligned}
a_0(s(s-1)+\gamma c) &= 0 \\
s(s-1)+\gamma) &= 0 \\
s_1 = 0, \quad s_2 &= 1-\gamma
\end{aligned}$$

agrupando términos obtenemos formula recurrente para a_n:

$$\begin{aligned}
a_n &= \frac{(n+s-1)(n+s-2)+(1+\alpha+\beta)(n+s-1)}{(n+s)(n+s-1)+\gamma(n+s)} a_{n-1} \\
a_n &= \frac{(n+s-1)(n+s+\alpha+\beta-1)+\alpha\beta}{(n+s)(n+s+\gamma-1)} a_{n-1} \\
a_n &= \frac{(n+s+\alpha-1)(n+c+\beta-1)}{(n+s)(n+s+\gamma-1)} a_{n-1}
\end{aligned}$$

en términos de a_0 obtenemos:

$$a_n = \frac{(s+\alpha)_n(s+\beta)_n}{(s+1)_n(s+\gamma)_n} a_0$$

finalmente la solución estaría dada por:

$$y = a_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s+\alpha)_n(s+\beta)_n}{(s+1)_n(s+\gamma)_n} x^{n+s}$$

de acuerdo al teorema de Fuchs tenemos que analizar $s_1 - s_2$ para obtener las soluciones, en este caso se reduce a analizar el comportamiento de γ.

$\gamma \notin N_0$

Estamos en el caso $s_1 \neq s_2$ y $s_1 - s_2 \notin N$.
Para $s = 0$ obtenemos:

$$\begin{aligned}
y_1(x) &= a_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n(\beta)_n}{(\gamma)_n} x^n \\
&= a_0 F(\alpha, \beta; \gamma; x)
\end{aligned}$$

para $s = 1-\gamma$

$$\begin{aligned}
y_2(x) &= a_0 x^{1-\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha+1-\gamma)_n(\beta+1-\gamma)_n}{(2-\gamma_n)} x^n \\
&= a_0 x^{1-\gamma} F(\alpha-\gamma+1, \beta-\gamma+1; 2-\gamma; x)
\end{aligned}$$

$\gamma \in N_0$

$\gamma = 1$

Estamos en el caso $s_1 = s_2$.
Se tiene la solcuión:

$$y_1(x) = a_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n(\beta)_n}{(1)_n}$$
$$= a_0 F(\alpha, \beta; 1; x)$$

Además se tiene una segunda solución:

$$y_2(x) = y_1(x)ln(x) + \sum_{n=0}^{\infty} a'_n x^n$$

2.-

Sea y solución de la ecuación de Legendre $(1-x^2)y'' - 2xy' + \nu(\nu+1)y = 0, \nu \in R$

a) Hacer el cambio de variable $t = \frac{1}{2}(1-x)$ en la ecuación diferencial de Legendre y expresarla en términos de la ecuación hipergeométrica. Obtener una solución escrita en términos de la función hipergeométrica de Gauss. A esta solución, que se denota por $P_\nu(x)$, se le denomina *función de Legendre de grado ν de primera especie.*

b) Hacer el cambio de variable $t = x^{-2}$ y $y = x^{-\nu-1}v$ en términos de la ecuación hipergeométrica. Obtener una solución escrita en términos de función hipergeométrica de Gauss. A esta solución, que se denota por $Q_\nu(x)$, se le denomina *función de Legendre de grado ν de segunda especie.*

c) Hacer algunas gráficas representativas de las funciones $P_\nu(x)$ y $Q_\nu(x)$ para ciertos valores de ν a vuestra elección (no necesariamente enteros)

a)

Veremos la ecuación que satisface $y(t)$, hacemos cuentas:

$$x(t) = -2t + 1$$
$$x'(t) = -2$$
$$x''(t) = 0$$

donde $y(t) = y(x(t))$ $y(x) = y(t(x))$

$$y'(t) = -2y'(x(t))$$
$$y''(t) = 4y''(x(t))$$

esta nueva función satisface la ecuación:

$$(1 - (-2t+1)^2)\tfrac{1}{4}y'' + (-2t+1)y' + \nu(\nu+1)y = 0$$

desarrollando la expresión obtenemos:

$$\tfrac{1}{4}(1 - (4t^2 - 4t + 1))y'' + (1-2t)y' - (-\nu)(\nu+1)y = 0$$
$$\tfrac{1}{4}(-4t^2 + 4t) + (1-2t)y' - (-\nu)(\nu+1)y = 0$$
$$t(1-t)y'' + (1-2t)y' - (-\nu)(\nu+1)y = 0$$

de donde el valor de los parámetros de la ecuación hipergeométrica:

$$\alpha = -\nu, \beta = \nu + 1, \gamma = 1$$

se tiene por solución entonces:

$$y(x) = F(\alpha, \beta, \gamma, t(x))$$
$$= F(-\nu, \nu+1, 1, \tfrac{1}{2}(1-x)), \quad |x| < 1$$

b)

Se tienen las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned}
y(x) &= x^{-\nu-1}v(x)\\
y'(x) &= (-\nu-1)x^{-\nu-2}v(x) + x^{-\nu-1}v'(x)\\
&= (-\nu-1)x^{-1}y(x) + x^{-\nu-1}v'(x)\\
y''(x) &= (-\nu-1)(-\nu-2)x^{-\nu-3}v(x) + (-\nu-1)x^{-\nu-2}v'(x) + (-\nu-1)x^{-\nu-2}v'(x) + x^{-\nu-1}v''(x)\\
&= (-\nu-1)(-\nu-2)x^{-2}y(x) + 2(-\nu-1)x^{-\nu-2}v'(x) + x^{-\nu-1}v''(x)
\end{aligned}$$

como y satisface la ecuación:

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + \nu(\nu+1)y = 0$$

sustituyendo encontramos que v satisface:

$$\begin{aligned}
&(1-x^2)((-\nu-1)(-\nu-2)x^{-2}y(x) + 2(-\nu-1)x^{-\nu-2}v'(x) + x^{-\nu-1}v''(x))\\
&+ (-2x)((-\nu-1)x^{-1}y(x) + x^{-\nu-1}v'(x))\\
&+ \nu(\nu+1)x^{-\nu-1}v(x) = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&(1-x^2)x^{-\nu-1}v''(x)\\
&+ (2(1-x^2)(-\nu-1)x^{-\nu-2} - 2xx^{-\nu-1})v'(x)\\
&+ ((1-x^2)((-\nu-1)(-\nu-2)x^{-2}v(x) + 2x(\nu+1)x^{-1} + \nu(\nu+1))x^{-\nu-1}v(x) = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&(1-x^2)v''(x)\\
&+ (2(1-x^2)(-\nu-1)x^{-1} - 2x)v'(x)\\
&+ ((1-x^2)(\nu+1)(\nu+2)x^{-2} + 2(\nu+1) + \nu(\nu+1))v(x) = 0
\end{aligned}$$

haciendo el cambio de variable $t = x^{-2}$, veremos la ecuación que satisface $v(t)$, haciendo cuentas:

$$\begin{aligned}
x(t) &= t^{-\frac{1}{2}}\\
x'(t) &= -\frac{1}{2}t^{-\frac{3}{2}}\\
x''(t) &= \frac{3}{2}t^{-\frac{5}{2}}\\
v'(t) &= v'(x(t))x'(t) = -\frac{1}{2}v'(x(t))t^{-\frac{3}{2}}\\
v''(t) &= v''(x(t))x'^2(t) + v'(x(t))x''(t) = \frac{1}{4}v''(x(t))t^{-3} + \frac{3}{2}v'(x(t))t^{-\frac{5}{2}}
\end{aligned}$$

sustituyendo por $x(t)$ en la expresión que satisface v obtenemos:

$$\begin{aligned}
&(1-t^{-1})v''(x(t))\\
&+ ((1-t^{-1})(-\nu-1)t^{\frac{1}{2}} - 2t^{-\frac{1}{2}})v'(x(t))\\
&+ ((1-t^{-1})(\nu+1)(\nu+2)t + 2(\nu+1) + \nu(\nu+1))v(x(t)) = 0\\
&t(1-t)v''(t) + \left(\nu + \frac{3}{2} - \left[\frac{\nu+1}{2} + \frac{\nu+2}{2} + 1\right]t\right)v'(t) - \frac{\nu+1}{2}\frac{\nu+2}{2}v(t) = 0
\end{aligned}$$

v sartisface la ecuación hipergeométrica con los parámetros:

$$\alpha = \frac{\nu+1}{2}, \beta = \frac{\nu+2}{2}, \gamma = \nu + \frac{3}{2}$$

finalmente obtenemos:

$$\begin{aligned}
y(x) &= x^{-\nu-1}v(x)\\
&= \frac{1}{x^{\nu+1}}F\left(\alpha,\beta,\gamma,\frac{1}{x^2}\right)\\
&= \frac{1}{x^{\nu+1}}F\left(\frac{\nu+1}{2},\frac{\nu+2}{2},\nu+\frac{3}{2},\frac{1}{x^2}\right), \quad |x| > 1
\end{aligned}$$

c)

A continuación la gráfica de P_ν

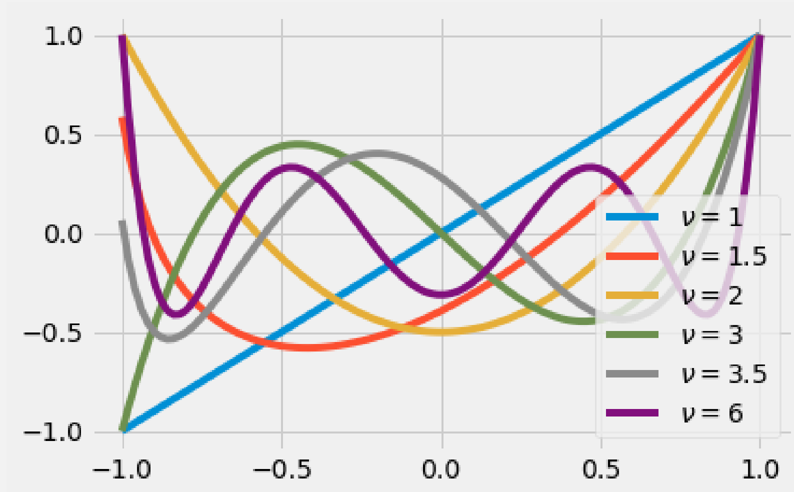

Figure 1: Gráfica P_ν para distintos valores de ν

3.-

a) Demostrar la siguiente función generadora para las funciones de Bessel de primer especie con índice enetero:

$$e^{\frac{x}{2}(t-\frac{1}{t})} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n$$

b) Usar la anterior función generadora y algunas herramientas de análsis complejo para derivar la siguiente representación integral de las funciones de Bessel de primera especie:

$$J_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi cos(xsin\theta - n\theta) d\theta, \quad n \in Z$$

a)

Realizaremos desarollo en serie de potencias para obtener una serie:

$$\begin{aligned} e^{\frac{1}{2}(t-\frac{1}{t})} &= e^{\frac{xt}{2}} e^{-\frac{x}{2t}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{xt}{2}\right)^n \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-1)^n \left(\frac{xt}{2}\right)^n \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n(x) t^n \end{aligned}$$

Encontramos a_n usando el producto de Cauchy:

$$\begin{aligned} a_n(x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(n+k)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+k} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{x}{2}\right)^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+n} \\ &= J_n(x) \end{aligned}$$

b)

Recordando el teorema del residuo, si una función tiene la representación:

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - z_0)^n$$

y C una curva cerrada oriendata positiva que contiene a z_0, entonces:

$$\oint_C f(z)dz = 2\pi i a_{-1}$$

Definimos y aplicamos el teorema a una función de tal forma que podamos despejar J_n:

$$\begin{aligned}
\oint_C \frac{e^{\frac{x}{2}(t-\frac{1}{t})}}{t^{n+1}} dt &= \oint_C \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(x) t^{m-n-1} \\
&= \oint_c \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{m+n+1} t^m \\
&= 2\pi i J_n(x)
\end{aligned}$$

elegimos a la curva $\gamma(\theta) = e^{i\theta}$, remplazando obtenemos:

$$\begin{aligned}
\oint_C \frac{e^{\frac{x}{2}(t-\frac{1}{t})}}{t^{n+1}} dt &= \int_0^{2\pi} \frac{e^{\frac{x}{2}(e^{i\theta}-e^{-i\theta})}}{e^{i\theta} e^{in\theta}} ie^{i\theta} d\theta \\
&= i \int_0^{2\pi} e^{i(xsin\theta - n\theta)} d\theta
\end{aligned}$$

sustituyendo la expresión encontrada y despejando $J_n(x)$:

$$\begin{aligned}
J_n(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(xsin\theta - n\theta)d\theta} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} cos(xsin\theta - n\theta)d\theta + \frac{i}{2\pi} \int_0^{2\pi} sin(xsin\theta - n\theta)d\theta \\
&= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} cos(xsin\theta - n\theta)d\theta
\end{aligned}$$

4.-

Resolver la ecuación de Schrodinger estacionarie en coordenadas esféricas:

$$-\frac{h^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r,\theta,\phi) + V(r)\Psi(r,\theta,\phi) = E\Psi(r,\theta,\phi)$$

para el caso particular de potencial $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ *(átomo de hidrógeno)*, donde e es la carga del electrón. Expresar las autofunciones en términos de ármonicos esféricos y polinimios ortogonales de Laguerre. Visualizar las órbitas de la función de onda del átomo de hidrógeno.

Usaremos coordenadas esféricas, además supondremos:

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi)$$

La ecuación de Schrodinger se transforma en:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R}{r^2 sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 sin^2\theta} \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right] + V\psi = E\psi$$

dividiendo entre YR y multiplicando por $-\frac{2mr^2}{\hbar^2}$ obtenemos:

$$\left[\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}(V-E)\right]+\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]=0$$

en el lado izquierdo solo tenemos dependencia de r y en el derecho solo de θ,ϕ, por lo tanto deben ser constantes, llamaremos a esta constante $l(l+1)$.

Ecuación ángular

La ecuación para Y es conocida y tiene por solución ármonicos esféricos:

$$Y_l^m(\theta,\phi)=\epsilon\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}e^{im\phi}P_l^m cos(\theta)$$

donde $\epsilon=(-1)^m, m\geq 0$ y $\epsilon=1, m\leq 0$

Ecuación radial

Recordando R satisface la euación:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}(V-E)R=l(l+1)R$$

realizando el cambio de variable:

$$u(r)=rR(r)$$

la ecuación se transforma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+\left[V+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}-E\right]u=0$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+\left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}-E\right]u=0$$

definimos:

$$k=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar},\quad p=kr,\quad p_0=\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2 k}$$

realziando el cambio de variable y multiplicando por $\frac{2m}{\hbar^2}$ la ecuación se transforma:

$$\frac{d^2u}{dp^2}=\left[1-\frac{p_0}{p}+\frac{l(l+1)}{p^2}\right]u$$

supondremos u es de la forma:

$$u(p)=p^{l+1}e^{-p}v(p)$$

realizando el cambio de variable la ecuación se transforma:

$$p\frac{d^2v}{dp^2}+2(l+1-p)\frac{dv}{dp}+(p_0-2(l+1))v=0$$

finalmente si $x=2p$ tenemos:

$$x\frac{d^2v}{dx^2}+(2(l+1)-x)\frac{dv}{dx}+\left(\frac{1}{2}p_0-(l+1)\right)v=0$$

ahora bien, el polinomio L_n^k de Leguerre satisface:

$$x\frac{d^2}{dx^2}L_n^k(x)+(k+1-x)\frac{dL_n^k(x)}{dx}+nL_n^k(x)=0$$

si hacemos:

$$k + 1 = 2(l + 1), \quad \bar{n} = \frac{1}{2}p_0 - (l + 1)$$

de la segunda condición debe ocurrir que $p_0 = 2n$, donde n es un entero lo que implica:

$$E = -\frac{me^4}{32\epsilon_0 \hbar^2 \pi^2 n^2}$$

$$k = \frac{1}{an}, \quad a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

donde definimos:

$$E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right]\frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}$$

entonces la solución esta dada por:

$$v(x) = L^{2l+1}_{n-(l+1)}(x)$$

Finalmente escribimos la solución a la ecuación de Schrodinger:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]}} e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L^{2l+1}_{n-l-1}\left(\frac{2r}{na}\right) Y^m_l(\theta, \phi)$$

podemos visualizar el valor de Ψ^2_{nlm} donde el brillo en cada región esta relacionado con la probabilidad de encontrar el electrón en dicha región.

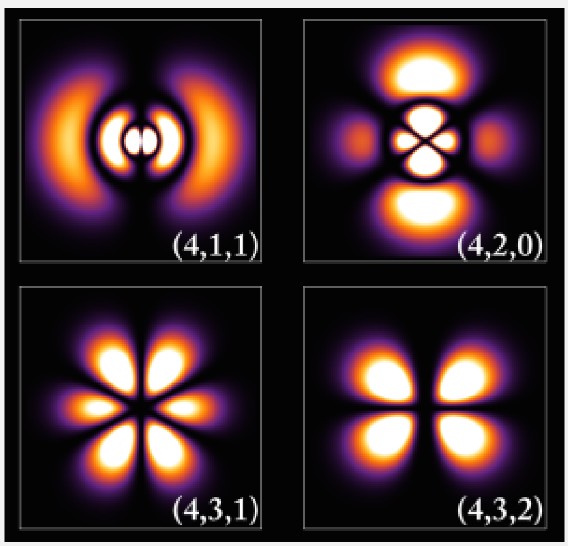

Figure 2: Visualización densidad de probabilidad para disntintos valores de nlm