

Proyecto 1

Los estados ligados de un sistema de dos cuerpos con masa idénticas m viene descrito por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Si el sistema está descrito únicamente por potenciales centrales ésta viene dada por la ecuación diferencial

$$[T(r) + V(r)] \Phi_\ell(r) = E \Phi_\ell(r)$$

que sólo depende de la distancia relativa r entre los dos cuerpos. El término cinético tiene la siguiente forma

$$T(r) = -\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right).$$

Esta ecuación integral se puede transformar en un problema de autovalores si asumimos que la función de onda radial $\Phi_\ell(r)$ se puede proyectar sobre una base de funciones de onda conocidas $\phi_{n\ell}(r)$, tal que

$$\Phi_\ell(r) = \sum_{n=1}^{n_{\max}} c_{n\ell} \phi_{n\ell}(r),$$

obteniendo, entonces, una ecuación de Schrödinger para la suma de funciones $\phi_{n\ell}(r)$ con coeficientes $c_{n\ell}$ desconocidos:

$$\sum_{n=1}^{n_{\max}} [T(r) + V(r)] \phi_{n\ell}(r) c_{n\ell} = E_{n\ell} \sum_{n=1}^{n_{\max}} \phi_{n\ell}(r) c_{n\ell}$$

Si ahora multiplicamos por $\phi_{n'\ell}^*(r)$ por la izquierda e integramos en r podemos transformar la ecuación diferencial en una ecuación matricial:

$$\sum_{n=1}^{n_{\max}} [T_{n'n} + V_{n'n}] c_{n\ell} = E_{n\ell} \sum_{n=1}^{n_{\max}} S_{n'n} c_{n\ell} \rightarrow \mathbf{H} \cdot \mathbf{c} = E \mathbf{S} \cdot \mathbf{c} \quad (1)$$

que corresponde a un problema de autovalores generalizado. Los elementos de matriz se definen como

$$\begin{aligned} T_{n'n} &= \int \phi_{n'\ell}^*(r) T(r) \phi_{n\ell}(r) r^2 dr, \\ V_{n'n} &= \int \phi_{n'\ell}^*(r) V(r) \phi_{n\ell}(r) r^2 dr, \\ S_{n'n} &= \int \phi_{n'\ell}^*(r) \phi_{n\ell}(r) r^2 dr \end{aligned} \quad (2)$$

La simplificación obtenida, así como la exactitud final del método, depende del acierto a la hora de elegir una base adecuada. Para este proyecto elegiremos una base Gaussiana, es decir:

$$\phi_{n\ell}(r) = N_{n\ell} r^\ell e^{-\eta_n r^2}.$$

donde $N_{n\ell}$ denota la normalización de las funciones de onda de la base $(\phi_{n\ell})$, tal que $\langle \phi_{n\ell} | \phi_{n\ell} \rangle = 1$, es decir,

$$N_{n\ell} = \left[\frac{2^{\ell+2} (2\eta_n)^{\ell+\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi} (2\ell+1)!!} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

El rango de la Gaussiana, η_n , cambia entre diferentes elementos de la base $\phi_{n\ell}$. Para reducir el número de parámetros a utilizar y obtener, a la vez, una buena descripción del corto alcance, usaremos una progresión geométrica:

$$\eta_n = \frac{1}{r_n^2} \text{ con } r_n = r_1 \left(\frac{r_{n_{\max}}}{r_1} \right)^{\frac{n-1}{n_{\max}-1}}$$

La ventaja de las funciones de onda Gaussianas es que podemos simplificar las derivadas del término cinético $T(r)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_{n\ell}}{\partial r} &= \phi_{n\ell}(r) \left[\frac{\ell}{r} - 2\eta_n r \right], \\ \frac{\partial^2 \phi_{n\ell}}{\partial r^2} &= \phi_{n\ell}(r) \left[\frac{\ell(\ell-1)}{r^2} + 4\eta_n^2 r^2 - 2\eta_n (2\ell+1) \right], \end{aligned}$$

y podemos expresar $T(r)$ enteramente en términos de potencias de r :

$$T_{n'n} = -\frac{\hbar^2}{m_b} N_{n'\ell} N_{n\ell} \left[4\eta_n^2 \mathcal{I}(2\ell+2, \beta) - 2\eta_n (2\ell+3) \mathcal{I}(2\ell, \beta) \right],$$

donde hemos definido $\beta = \eta_n + \eta_{n'}$ y la integral:

$$\mathcal{I}(\alpha, \beta) = \int_0^\infty r^{2+\alpha} e^{-\beta r^2} dr = \frac{1}{2} \beta^{-\left(\frac{\alpha+3}{2}\right)} \Gamma\left(\frac{\alpha+3}{2}\right)$$

Notad que esta base **no es ortogonal**, y debemos definir la matriz de solapamiento:

$$S_{n'n} = N_{n'\ell} N_{n\ell} \mathcal{I}(2\ell, \beta),$$

Sólo queda definir el potencial. En este proyecto utilizaremos el llamado *potencial de Cornell*, que está compuesto por la suma de un potencial lineal más un potencial tipo Coulomb:

$$V(r) = -\frac{4}{3} \frac{\alpha_s \hbar c}{r} + \frac{\sigma}{\hbar c} r + 2m,$$

donde α_s y σ son dos parámetros del modelo. Para este potencial, el elemento de matriz que necesitamos en la ecuación (1) es

$$V_{n'n} = N_{n'\ell} N_{n\ell} \left[-\frac{4}{3} (\alpha_s \hbar c) \mathcal{I}(2\ell - 1, \beta) + \frac{\sigma}{\hbar c} \mathcal{I}(2\ell + 1, \beta) + 2m \mathcal{I}(2\ell, \beta) \right]$$

El **objetivo del proyecto** es preparar un programa que calcule las energías de los estados ligados del potencial de Cornell (autovalores), así como los coeficientes de la expansión de la base de Gaussianas (autovectores). El problema de autovalores se resolverá utilizando la subrutina DGGEV de LAPACK.

Los **valores de entrada** que necesitaremos son

r_1	0.05 fm	$r_{n_{\max}}$	8.0 fm
m	4.733 GeV/c ²	α_s	0.366
σ	0.207 GeV ²	$\hbar c$	0.197327 GeV fm
n_{\max}	40		

El programa debe dar como **salida**:

- En **pantalla**: Las energías $E_{n_r\ell}$ [en GeV] de los tres estados más bajos de energía ($n_r = 1, 2, 3$) para las ondas S y P ($\ell = 0, 1$), con formato F15.10.
- En **fichero**: Las funciones de onda radiales para los estados con $n_r = 1, 2, 3$ y $\ell = 0, 1$. El fichero, llamado WaveF.dat debe tener cuatro columnas con el formato (2I4,2E24.12):
 1. n_r : Número cuántico radial del estado ligado.
 2. ℓ : Número cuántico orbital.

3. r [en fm]: Radio (separación entre los dos cuerpos).
4. $\Phi_\ell(r)$ [en fm^{-3/2}]: Función de onda radial.

En el fichero se debe escribir la misma para radios entre $r = [0, 1, 5]$ fm, con 100 puntos. Atención: El autovector $c_{n\ell}$ **no vendrá normalizado adecuadamente**, con lo que deberemos normalizarlo.

- En **pantalla**: La separación de masa entre diferentes proyecciones de spin para el estado $n_r = 1$ y $\ell = 0$. Dicha separación viene dada por el término:

$$V_{ss}(r) = \frac{8\alpha_s(\hbar c)^3}{9m^2 r^2} (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) \delta(r)$$

calculado con teoría de perturbaciones. Proyectando en la base de Gaussianas obtenemos la expresión:

$$\Delta m = \frac{8\alpha_s(\hbar c)^3}{9m^2} \sum_{n,n'} c_{n\ell} c_{n'\ell} N_{n\ell} N_{n'\ell}$$

- Además de los resultados expuestos más arriba, el programa debe dar como salida por **pantalla** el valor de la variable INFO de la subrutina DGGEV para comprobar que el problema de autovalores se ha calculado correctamente (INFO=0)

Prueba

Para poner a punto el programa vamos a utilizar las expresiones analíticas de los estados ligados de los potenciales lineal y de Coulomb, cuyas soluciones se conocen. Los estados ligados del potencial de Coulomb vienen dados por la fórmula:

$$E_{n_r\ell}^\alpha = 2m_b - \frac{4\alpha_s^2 m_b}{9n_r^2},$$

mientras que los estados ligados del potencial lineal son

$$E_{n_r\ell}^\sigma = 2m_b - \left(\frac{\sigma^2}{m_b}\right)^{\frac{1}{3}} \text{ai}_{n_r}$$

donde ai_{n_r} son los ceros de la función de Airy ($\text{ai}_{n_r} = -2,33811, -4,08795, -5,52056, \dots$).

Comparad el resultado numérico con la solución analítica, para el potencial lineal ($\alpha_s = 0$) y el de Coulomb ($\sigma = 0$), alternativamente.