



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Estudio de una nueva base variacional para problemas de física hadrónica

David Julian Molina Beltrán

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2012

Estudio de una nueva base variacional para problemas de física hadrónica

David Julian Molina Beltrán

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ciencias Física

Director:
Dr Maurizio De Sanctis

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2012

Resumen

Se realizó un estudio de una base variacional que surge como generalización de la base de oscilador armónico, la cual conserva su ortonormalidad pero se mejora, al tener comportamiento asintótico flexible. Utilizando esta base, se reproduce el espectro del hidrógeno y del Charmonium con un Hamiltoniano no relativista. Estos resultados son obtenidos numéricamente diagonalizando y minimizando la matriz Hamiltoniana. Adicionalmente se calculan las correcciones relativistas a primer orden de los diferentes estados, encontrando que se comportan en forma similar a la de otros sistemas ligados y que no pueden ser considerados como correcciones para los estados excitados. Además, estudiamos el Charmonium utilizando un Hamiltoniano con energía cinética relativista mejorando, de esta manera, la reproducción del espectro.

Palabras clave: Base generalizada, Base de oscilador armónico, principio variacional, Charmonium, diagonalización del Hamiltoniano, potencial de Cornell, Transformada de Fourier.

Abstract

We studied a variational basis that represents a generalization of the harmonic oscillator one, preserving the orthonormality but improved for it have asymptotic flexible behavior. Using this basis, we could reproduce the hydrogen and Charmonium spectrum by means of a nonrelativistic Hamiltonian. This results be obtained numerically diagonalizing and minimizing the Hamiltonian Matrix. Further, work out the relativistic corrections to first order of the diferents states, finding that it don't be treated like corrections for the high states of excitation. Finally we also obtained a better reproduction of the Charmonium spectrum by using a Hamiltonian with a relativistic kinetic energy term

Key words: Generalized base, Harmonic oscilator base, variational principle, Charmonium, Hamiltonian diagonalizing, Cornell potential, Fourier transformed.

Índice general

1. Introducción	1
2. Aspectos generales	7
2.1. El Charmonium	7
2.2. Cromodinámica cuántica	9
2.3. Modelos de potencial	11
2.4. Solución de la ecuación de Schrödinger con potencial $V(r)$. .	14
2.4.1. Base de oscilador armónico	16
2.4.2. Funciones de onda de Coulomb-Sturmian	18
3. Base generalizada	21
3.1. Deducción de la base generalizada	21
3.1.1. Comportamiento asintótico	23
3.2. Transformada de Fourier de la Función de onda	25
4. Método de Diagonalización con base generalizada	29
4.1. Descripción de la Diagonalización	30
4.1.1. El principio variacional	30
4.1.2. Descripción del método numérico utilizado en la construcción del espectro del Charmonium	31
4.2. Elemento de matriz con base generalizada	32
4.3. Solución numérica con potencial tipo Coulomb	34
4.4. Masas del Charmonium con parámetros de referencia	37
4.5. Cálculos utilizando base de Oscilador Armónico	38
5. Charmonium con potencial confinamiento r^k	43
5.1. Charmonium sin correcciones dependientes del espín	44
5.2. Fit de parámetros	48

5.3.	Comparación de resultados	50
5.4.	Discusión de resultados	51
6.	Charmonium con energía cinética relativista	53
6.1.	Corrección a primer orden de la energía cinética	54
6.1.1.	Discusión de resultados	56
6.2.	Cálculo con expresión exacta de la energía cinética relativista . . .	57
6.2.1.	Discusión de resultados	58
6.3.	Fit de parámetros con la energía cinética relativista	59
6.3.1.	Cálculo de χ^2	60
6.3.2.	Discusión de resultados	60
7.	Conclusiones y recomendaciones	63
7.1.	Conclusiones	63
7.2.	Recomendaciones	64
A.	Laplaciano de la base generalizada	67
B.	Programas Fortran	69
B.1.	Elemento de matriz en fortran	69
B.2.	Transformada de Fourier	78

Capítulo 1

Introducción

A principios del siglo XX se consideraban como partículas fundamentales los electrones, protones y neutrones. Sin embargo, argumentos experimentales y teóricos mostraron indicios que tanto protón como neutrón presentan estructura interna. Los factores de forma hallados en experimentos de dispersión elástica electrón-protón de alta energía probaron que el protón está conformado por otras partículas, a diferencia del electrón, cuya interacción electromagnética está de acuerdo con la de una partícula puntual.

Además, mediante la ecuación de Dirac, que sólo se aplica a partículas puntuales, es posible calcular el momento magnético de las partículas de espín $\frac{1}{2}$ con el protón, neutrón y electrón para confrontarlo con el valor hallado experimentalmente. Los resultados arrojados muestran la concordancia entre los resultados teóricos y experimentales para el caso del electrón confirmando su carácter puntual. Sin embargo, con el protón y neutrón no sucede lo mismo. Estas evidencias mostraban la necesidad de una nueva teoría que tuviese en cuenta estos nuevos hallazgos y propusiera nuevos bloques fundamentales de la materia, como constituyentes del protón y del neutrón.

El modelo de quark fue planteado en 1964 por Murray Gell-Man quien inicialmente propuso la existencia de los quarks: *up*, *down*, *strange*; posteriormente aumentarían a seis al adicionar los quarks: *charm*, *bottom* y *top* para producir todas las partículas hadrónicas. Los quarks debían ser fermiones de espín $\frac{1}{2}$ para que, por combinación de ellos, fuese posible construir el espín de mesones (partículas de espín entero compuestas por un quark y antiquark) y bariones (partículas de espín semientero compuestas por tres quarks).

Para reproducir los valores de carga eléctrica de los hadrones es necesario que los quarks tengan carga fraccional según los valores dados en la tabla

1.1.

Carga electrica de los quarks	
Quark	Carga
up	$\frac{2}{3}$
down	$-\frac{1}{3}$
strange	$-\frac{1}{3}$
charm	$\frac{2}{3}$
botton	$-\frac{1}{3}$
top	$\frac{2}{3}$

Tabla 1.1: Carga eléctrica de los quarks

Pero partículas con las características de los quarks, aún hoy en día, no se pueden detectar en forma aislada. Sin evidencia experimental de su existencia inicialmente el modelo de quark no fue aceptado por todos los físicos. Sin embargo, en 1974 se realizó el descubrimiento de la parícula J/ψ , lo cual suministró la evidencia experimental que haría que la teoría del quark tomara gran fuerza. Esta partícula, interpretada como un estado del sistema ligado Charm-Anticharm es llamada Charmonium por analogía con el positronium (ver sección 2.1).

Debido a que el quark Charm es particularmente masivo, el Charmonium es considerado, en primera aproximación, como un sistema no relativista ($\langle pc \rangle \ll mc^2$ donde m es la masa del quark) y por lo tanto puede ser estudiado utilizando la ecuación de Schrödinger. En esta ecuación se implementan diversos modelos de potencial que cumplen con la características físicas del sistema, en especial el confinamiento de los quarks. Por esta razón hay un renovado interés en los métodos de resolución de la ecuación de Schrödinger, pues hasta el momento, representa una de las formas más efectivas de estudiar estos sistemas. Resaltamos que la Cromodinámica Cuántica QCD (ver sección 2.2), que es la teoría fundamental apropiada para el estudio de las interacciones de los quarks, no permite calcular directamente las masas de los sistemas ligados debido a que en esta región de energías la interacción no es perturbativa.

Ha sido desarrollado una técnica de solución numérica aproximada para las ecuaciones de la QCD a bajas energías, la llamada técnica del retículo, en inglés "Lattice". Con esta técnica es posible estudiar los estados ligados, desde primeros principios, regularizando la teoría al volver discreto el espacio

tiempo, reemplazando las derivadas por diferencias finitas que llevan consigo errores, que en teoría, pueden minimizarse tanto como se desee. Sin embargo, son requeridos computadores de altísimo desempeño para minimizar los errores estadísticos que surgen en el proceso.

Considerando los modelos de quarks, recordamos que la ecuación de Schrödinger sólo tiene solución analítica en algunos casos particulares; ejemplo de ellos son el potencial tipo Coulomb (TC) y de oscilador armónico (OA). Al elegir otro potencial o adicionar una función al potencial TC o al de OA la ecuación de Schrödinger deja de tener solución analítica y por tanto se hace necesario buscar soluciones aproximadas por medio de técnicas numéricas. El método variacional es ampliamente utilizado, pero para obtener mejores resultados es necesario seleccionar una buena base variacional que permita acercarnos con la mayor precisión posible al espectro energético experimental.

Las funciones de prueba que se utilizan como base para describir los sistemas ligados, suelen ser las del átomo de hidrógeno (AH) y los de OA. Pero éstas funciones de prueba presentan algunas dificultades: las de AH no representan realmente una base, es decir, un sistema ortonormal y completo (porque se tienen en cuenta solo los estados ligados) y las de OA no ofrecen buenos resultados debido a la poca flexibilidad en el comportamiento asintótico de las mismas. Por otro lado, a pesar que tanto los quarks Charm y Bottom presentan masas relativamente grandes (es decir se cumple: $\langle pc \rangle \ll mc^2$) los efectos relativistas deben tenerse en cuenta para reproducir el espectro de energía con mayor aproximación. Una forma de hacerlo es suponiendo que los efectos relativistas puedan ser tratados como una perturbación teniendo en cuenta solo los términos de primer orden. Aunque, en los estados excitados esta suposición puede no ser cierta restándole precisión de cálculo a las energías de los estados excitados hechos de manera numérica.

A partir de lo anteriormente expuesto y para obtener mejores resultados es necesario que la base variacional elegida tenga comportamiento asintótico acorde al potencial de confinamiento. Además se busca que esta base pueda ser usada en el espacio del momentum para realizar cálculos utilizando la energía cinética relativista.

Por tanto es objetivo de este trabajo de tesis estudiar una nueva base variacional, generalizada a partir de la de OA, con comportamiento asintótico flexible de la cual se pueda obtener la transformada de Fourier para calcular los elementos de matriz de operadores dependientes del momentum. Se aplicará esta base en la reproducción de las masas del Charmonium utilizando en el Hamiltoniano tanto la expresión de la energía cinética relativista y no

relativista, con el fin de establecer la importancia de los efectos relativistas en los estados excitados del sistema para un potencial fenomenológico particular.

En este trabajo no se considerará el cálculo de la interacción espín orbita e hiperfina del sistema ligado. En general estos efectos se pueden agregar posteriormente de manera perturbativa.

Usando la nueva base se utilizará una técnica de diagonalización y minimización de la matriz Hamiltoniana. Adicionalmente se encontrarán los valores para las correcciones relativistas y se discutirán los resultados obtenidos.

El trabajo está organizado de la siguiente forma: El capítulo 2 contiene información general por medio de la cual se contextualiza el trabajo en el marco de la física teórica de partículas. Por lo tanto en ese capítulo se discutirán algunas propiedades físicas del Charmonium y los principales modelos de potencial empleados en la reproducción del espectro de energía. Posteriormente se abordará la base estándar de oscilador armónico mostrando sus principales características y discutiendo brevemente sus ventajas y desventajas al emplearla como base variacional. Para finalizar se obtendrán las funciones de Coulomb-Sturmian y se discutirán sus principales características.

En el capítulo 3 se iniciará el estudio de la base generalizada realizando el estudio del comportamiento asintótico de la ecuación de Schrödinger con el fin de estudiar el comportamiento asintótico de la función de onda y se calculará la expresión para su transformada de Fourier.

Los resultados del trabajo se muestran en los capítulos 4, 5 y 6.

El capítulo 4 está dedicado a mostrar dos pruebas de la base propuesta. El primer sistema es uno con solución analítica, el átomo de hidrógeno. Después se calculará la masa del estado base y algunos estados excitados del Charmonium sin interacciones dependientes del espín, utilizando los parámetros de la referencia [2]. Adicionalmente (para los dos sistemas mencionados) se compararán las masas encontradas con base de oscilador armónico y utilizando la base generalizada.

En el capítulo 5 se restarán las contribuciones hiperfinas y de espín-orbita a partir de las masas experimentales de algunos estados del Charmonium. Los valores de masa obtenidos sin interacciones hiperfinas ni de espín-orbita serán reproducidas numéricamente, por medio de la base generalizada, diagonalizando y minimizando la matriz Hamiltoniana. Se utilizará la energía cinética no relativista, realizando un fit sobre los parámetros fenomenológicos del potencial.

Posteriormente, en el capítulo 6, se realizará un nuevo fit y se calculará el

efecto relativista de la energía cinética, considerando como perturbación a primer orden el término $-\frac{\langle p^4 \rangle}{4m^3 c^2}$. Por último, se utilizará la base generalizada para resolver de manera aproximada (con la misma técnica vista antes) la ecuación de valores propios del Hamiltoniano del sistema, considerando ahora una expresión completamente relativista para la energía cinética. Finalmente se realizará una discusión de los resultados y se presentarán las conclusiones del trabajo de tesis.

Por motivo de claridad, en cuanto a las unidades de los valores numéricos utilizados y obtenidos, es conveniente mencionar que se trabajará con $\hbar = c = 1$ como es común en la física de partículas. Como se describió en párrafos anteriores, los resultados son obtenidos numéricamente, para lo cual fue desarrollado un conjunto de rutinas en fortran para construir la matriz Hamiltoniana y para obtener la transformada de Fourier. Estas rutinas están relacionadas en el apéndice B.

Capítulo 2

Aspectos generales

2.1. El Charmonium

Los mesones son partículas de espín entero que responden a la interacción fuerte. En el modelo del quark es ampliamente aceptado que están constituidos por un quark y antiquark, en particular, el estado mesónico J/ψ descubierto en 1974 presentó una masa de $3096,9MeV$ y un tiempo de vida media mil veces mayor a la de cualquier partícula con un masa semejante [3]. Esta resonancia fue descubierta inicialmente en Brookhaven bajo la dirección de C.C. Ting, sin embargo, no fueron publicados los resultados pues, a petición de Ting, fueron sometidos a corroboración, a pesar que todo el grupo de investigación lo persuadió para hacerlo [4]. Esto dio oportunidad a que el grupo de investigación del SLAC llegara a resultados semejantes, pues de igual forma que en Brookhaven, obtuvieron una curva de resonancia con una anchura mas pequeña de lo esperado lo que implica una gran tiempo de vida media. La existencia de este estado también fue corroborada en el acelerador de Frascati (Roma, Italia) y en noviembre de 1974 fueron publicados tres artículos sobre este descubrimiento.

Pronto se encontraron nuevas resonancias las cuales fueron explicadas en el marco del modelo de quark, pues se les consideró como estados de un nuevo sistema ligado conformado por un quark charm y un anticharm que, en analogía con el positronio, fue denominado Charmonium.

Debido a que el Charmonium tiene número cuántico de sabor cero fue necesario, para corroborar la existencia del quark charm, iniciar la búsqueda de una partícula con número de charm diferente de cero. Esto fue conseguido-

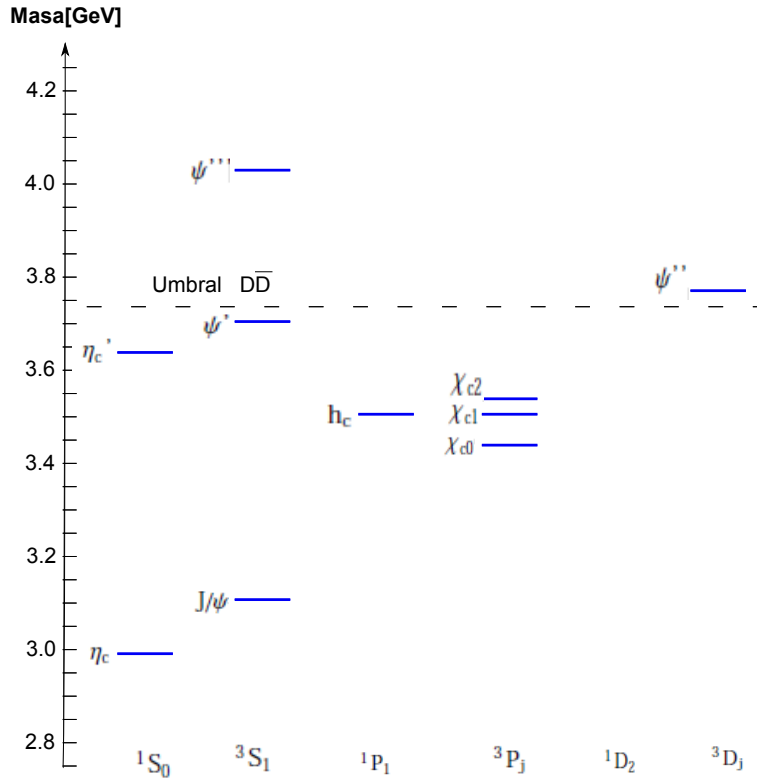


Figura 2.1: Espectro experimental del Charmonium. Donde la energía, en el eje vertical, se mide en GeV

do a mediados de los setenta, cuando fueron detectados los bariones Λ_c^+ y Σ_c^{++} compuestos respectivamente por udc y uuc y posteriormente los mesones $D^0 = c\bar{u}$ y $D^+ = c\bar{d}$, estableciendo definitivamente la estructura del Charmonium.

En la figura 2.1 se muestra el espectro experimental del charmonium en donde el umbral $D\bar{D}$ corresponde a la energía umbral en la cual mesones $c\bar{d}$ y $\bar{c}d$ pueden ser creados. La posición de los niveles más bajos del espectro muestra semejanza con los niveles del positronio. Pero las diferencias de energía en los estados excitados permiten concluir que el potencial de interacción entre quarks es de forma disímil a la de un potencial tipo Coulomb. Además, si el potencial fuera de verdad tipo Coulomb, con cierta cantidad de energía sería posible liberar los quarks del sistema, lo cual hasta el momento

no ha sido observado.

Por otra parte, similitudes con el positronio a bajas energías permiten suponer que a cortas distancias el potencial dominante es uno tipo Coulomb.

Además, este comportamiento es acorde con la estructura de la QCD en la aproximación de intercambio de un gluón entre q y \bar{q} . De esta manera el elemento de matriz de la interacción se puede pensar que sea semejante al del positronio. Sin embargo, a distancias grandes no es posible calcular la forma del potencial utilizando la misma técnica. Por tanto se tiene la necesidad de proponer tipos de potenciales que cumplan con las características del confinamiento y reproduzcan el espectro del Charmonium. Existen diferentes tipos de estos potenciales, algunos basados en la QCD y otros totalmente fenomenológicos. En la sección 2.3 se presentan algunos de ellos en detalle.

2.2. Cromodinámica cuántica

Antes de los setenta las fuerzas fuertes eran asociadas a las interacciones entre nucleones. Estas fuerzas explicaban en primer lugar la estabilidad del núcleo atómico a pesar de la fuerza eléctrica de repulsión entre protones. Sin embargo, la existencia del quark, sugerida teóricamente y corroborada experimentalmente, haría que las denominadas fuerzas fuertes describieran la interacción entre los diferentes quarks que constituyen los hadrones.

La función de onda del sistema compuesto por quarks puede ser expresada de la siguiente forma general:

$$\Psi = \Phi_{sabor} \otimes \chi_{espín} \otimes \Psi_{espacial} \quad (2.1)$$

Puesto que los quarks deben ser partículas de espín $\frac{1}{2}$ la función de onda debe ser completamente antisimétrica para que se cumpla el principio de exclusión de Pauli. Esta característica fue uno de los inconvenientes que tuvo la teoría del quark en su inicio puesto que se conocían sistemas hadrónicos que no cumplían con esta importante condición. Un ejemplo concreto lo constituye la partícula Δ^{++} la cual está compuesta por tres quarks up uuu y tiene espín $\frac{3}{2}$ lo cual implica que los espines de los tres quarks están orientados de igual forma y por tanto la función de onda (2.1) para la Δ^{++} sería totalmente simétrica.

Para dar solución a este problema se planteó la existencia de un nuevo número cuántico: *el color*, el cual añade a la teoría una nueva simetría global interna la cual está asociada con el grupo $SU(3)$ del color.

Por otro lado dispersiones de alta energía habían probado que las partículas dentro los hadrones se comportaban como partículas libres, lo cual no podía ser explicado por medio de las teorías conocidas. Sin embargo, Gross, Wilczek y Politzer mostraron que una teoría gauge no Abelianas incluye esta importante característica de la interacción fuerte. Puesto que el grupo de color es no Abeliano, este fue identificado como el grupo responsable de explicar la libertad asintótica [11]. Por lo tanto, a partir de la simetría del color se construyó una teoría de campo gauge (y por lo tanto renormalizable) no Abelianas, conocida como Cromodinámica Cuántica QCD. En ésta teoría las partículas portadoras de la interacción fuerte entre los quarks son los gluones, de los cuales existen 8 tipos.

Por tanto dentro del Lagrangiano de la QCD deben ser incluidos los campos vectoriales correspondientes a los gluones A_μ^a (donde $a=1,2..8$) y los campos fermiónicos correspondientes a los quarks.

El Lagrangiano del sistema se puede escribir de la siguiente forma:

$$\mathcal{L}_{QCD} = -\frac{1}{4g^2} F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu} + i \sum_{q=u,d,s..} [\bar{\Psi}_q^i \gamma^\mu (D_\mu)_{i,j} \Psi_q^j - m_q \bar{\Psi}_q^i \Psi_q^i] \quad (2.2)$$

Donde:

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a - g_s f_{abc} A_\mu^b A_\nu^c \quad (2.3)$$

$$(D_\mu)_{ij} = \delta_{ij} \partial_\mu + ig_s \sum_a \frac{\lambda_{i,j}^a}{2} A_\mu^a \quad (2.4)$$

Donde A_μ^a representan los campos gluónicos con $a = 1, 2..8$ los 8 gluones que existen en la teoría. f_{abc} son las constantes de estructura que surgen por el carácter no Abeliano (no conmutativo). Vale la pena mencionar que puesto que los gluones son partículas con carga de color, también se deberán tener en cuenta las interacciones que surgen entre ellas. Ψ_q^j representan los campos espinoriales asociados con los quarks. Adicionalmente λ son los generadores del grupo $SU(3)$ que son las matrices de Gell-Mann las cuales cumplen el siguiente conmutador:

$$[\lambda^a, \lambda^b] = i f^{abc} \lambda^c \quad (2.5)$$

La existencia de la libertad asintótica permite estudiar secciones eficaces utilizando los diagramas de Feynman, pues a altas energías la constante de acoplamiento fuerte es menor que 1, permitiendo de esta manera hacer un estudio perturbativo de la interacción. Por otro lado a largas distancias dicha constante de acoplamiento crece, imposibilitando el uso de la teoría en

forma perturbativa. Por tanto se hace necesario utilizar otras técnicas de cálculo con las cuales sea posible encontrar resultados concretos de estados y masas de los quarks.

2.3. Modelos de potencial

Subrayamos que hasta el momento no se ha podido obtener con técnicas perturbativas un potencial que describa la interacción entre quarks a bajas energías.

Recordemos que, en cambio, en Electrodinámica el potencial de Coulomb y las correcciones (perturbativas) de estructura fina e hiperfina se pueden deducir exactamente a partir del Lagrangiano de la Electrodinámica Cuántica (QED).

Con el objeto de obtener resultados concretos de las masas de los diferentes estados del Charmonium, es posible proponer diferentes potenciales los cuales deben cumplir en primer lugar con la característica de confinamiento y además reproducir el espectro de las partículas hadrónicas. Los valores obtenidos para las masas de las resonancias pueden ser comparados en forma directa con los experimentos o pueden guiar nuevas investigaciones experimentales [7].

En 1974 el grupo de E Eichten [14] propuso uno de los primeros modelos de potencial que serviría para describir el estado base y algunos de los diferentes estados excitados que posee el Charmonium. El potencial que ellos propusieron tiene la forma:

$$V(r) = -\frac{4\alpha_s}{3r} + \sigma r \quad (2.6)$$

el cual es conocido como potencial de Cornell.

El primer término surge en analogía con el potencial de Coulomb en el positronio y describe la interacción a cortas distancias; el número $\frac{4}{3}$ representa un factor de color relacionado con las matrices de Gell-Man del grupo $SU(3)_c$, α_s es la constante de acoplamiento fuerte cuyo valor se determina de manera esencialmente fenomenológica. El segundo término reproduce de manera efectiva el confinamiento y σ representa la “intensidad” de la interacción confinante. Las interacciones Spin-Spin, Spin-Orbita y tensorial se suelen tomar en cuenta como perturbaciones a primer orden. El potencial de Cornell, más las diferentes correcciones agregadas, brinda buenos resultados para las resonancias de baja energía del espectro del Charmonium.

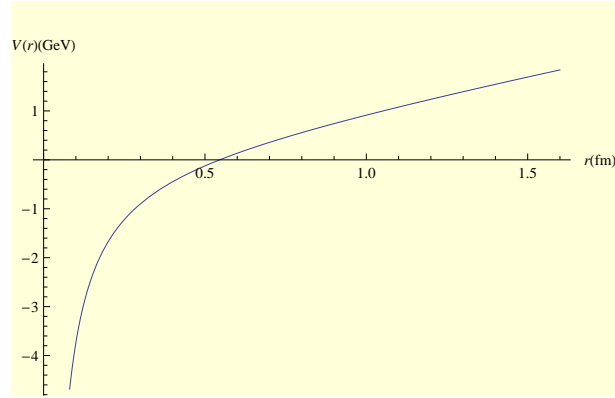


Figura 2.2: Potencial de Cornell donde se han utilizado los siguientes valores $\alpha=0.29$, $\sigma=1.3\frac{GeV}{fm}$

Los términos de corrección relativista, es decir, de estructura fina, hiperfina y otras correcciones de campo, se encuentran en analogía con la interacción electrón-positrón que es obtenida por medio de la reducción de Fermi-Breit (2.7).

Destacamos que el término lineal de confinamiento no surge de primeros principios y por lo tanto es necesario añadirlo para que los resultados esten en acuerdo con la evidencia experimental. Es argumento actual de investigación [9] determinar la forma de los términos de corrección relativista relacionados con el término de confinamiento. Sin considerar éstos últimos, y considerando para los términos de corrección relativista (asociados al potencial tipo Coulomb) la misma estructura que en la electrodinámica cuántica, el potencial tiene la forma:

$$\begin{aligned}
 V(r; p)_{Fermi-Breit} = & -\frac{4\alpha_s}{3r} + \sigma r + \frac{4\pi\alpha_s}{3m^2} \delta^{(3)}(\vec{r}) - \\
 & \frac{2\alpha_s}{3m_q^2} \left[\frac{\vec{p} \cdot \vec{p}}{r} + \frac{(\vec{r} \cdot \vec{p})(\vec{r} \cdot \vec{p})}{r^3} \right] \\
 & + \frac{4\alpha_s}{3m_q^2} \left[\frac{8\pi}{3} \delta^{(3)}(\vec{r})(\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2) \right. \\
 & \left. + \frac{3(\vec{s}_1 \cdot \hat{r})(\vec{s}_2 \cdot \hat{r}) - \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2}{r^3} \right] \\
 & + \frac{2\alpha_s}{m_q^2} \frac{(\vec{s} \times \vec{p}) \cdot (\vec{s}_1 + \vec{s}_2)}{r^3} \quad (2.7)
 \end{aligned}$$

Para resolver la ecuación de Schrödinger utilizando el potencial anterior se encuentra, primero, una solución numérica de la ecuación con el potencial dado por $-\frac{4\alpha_s}{3r} + \sigma r$; los demás términos son tratados en general en forma perturbativa.

Por otro lado, existen otros tipos de potenciales $V(r)$ diferentes al potencial de Cornell, que generan el confinamiento requerido. Uno de ellos es de tipo logarítmico[16]:

$$V(r) = A + B \ln(ar) \quad (2.8)$$

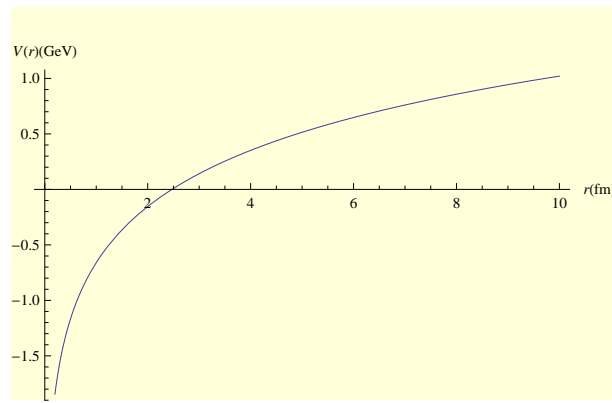


Figura 2.3: Potencial Logarítmico donde se han utilizado los siguientes valores $A=-0.66\text{GeV}$, $B=0.73\text{GeV}$ y $a = 1\text{fm}^{-1}$

El siguiente potencial, denominado “Power-Law” (ley de potencia), también es utilizado en la descripción de sistemas ligados de Quarks pesados:

$$V(r) = -E + D(br)^k \quad (2.9)$$

El argumento cromodinámico del comportamiento tipo Coulomb a cortas distancias, por intercambio de un gluón, da más confianza en el uso de un potencial que lo incluya, a diferencia de los últimos dos expuestos cuyos parámetros son enteramente fenomenológicos sin un origen de carácter fundamental. Adicionalmente, es bueno tener presente que los estudios en el retículo (lattice QCD) sugieren que el potencial confinante es dependiente linealmente en r .

Es necesario recordar que la singularidad del potencial tipo Coulomb cuando $r \rightarrow 0$ es probablemente regularizada por efectos cuánticos propios de la cromodinámica cuántica.

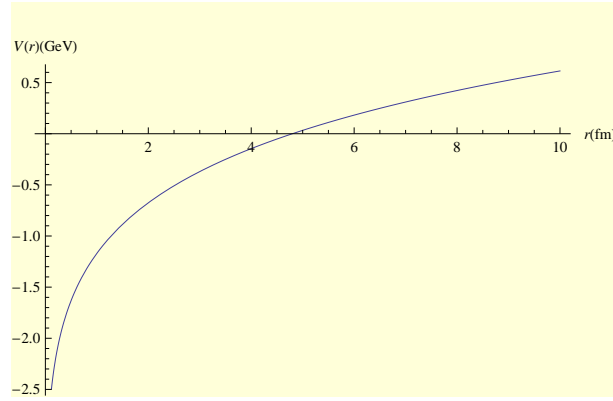


Figura 2.4: Potencial Power-Law donde se han utilizado los siguientes valores $E=8.06\text{GeV}$, $D=6.89\text{GeV}$, $b=1\text{fm}^{-1}$ y $k=0.1$

2.4. Solución de la ecuación de Schrödinger con potencial $V(r)$

En esta sección se considerará la solución de la ecuación de Schrödinger para un sistema de dos partículas que interactúan bajo la influencia de un potencial central, es decir, que sólo depende de la distancia entre partículas. Utilizando el potencial con las características mencionadas anteriormente la ecuación de Schrödinger se expresa de la siguiente forma:

$$\sum_{j=1}^N -\frac{1}{2m_j} \nabla_j^2 \Psi_T + V \Psi_T = i \frac{\partial \Psi_T}{\partial t} \quad (2.10)$$

En el caso de dos partículas $j = 1, 2$. Puesto que el potencial es independiente del tiempo la función de onda $\Psi(x_1, x_2, \dots, z_1, z_2, t)$ puede ser escrito como el producto de dos funciones así:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, z_1, z_2, t)_T = \psi(x_1, x_2, \dots, z_1, z_2)_T \phi(t) \quad (2.11)$$

Por lo tanto la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se escribe [5]:

$$\sum_{j=1}^2 -\frac{1}{2m_j} \nabla_j^2 \psi_T + V \psi_T = E \psi_T \quad (2.12)$$

2.4. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER CON POTENCIAL $V(R)$ 15

Es posible estudiar el sistema si separamos el movimiento del centro de masa y del movimiento relativo de las dos partículas. Con este fin escribamos la función de onda de la siguiente forma:

$$\psi_T(x, y, z; r, \theta, \phi) = \psi_{CM}(x, y, z)\psi(r, \theta, \phi) \quad (2.13)$$

Donde $\psi_{CM}(x, y, z)$ representa la función de onda del centro de masa del sistema cuya coordenada es $\vec{R} = (x, y, z)$; $\psi(r, \theta, \phi)$ es la función de onda del movimiento relativo de las dos partículas, escrita en coordenadas esféricas.

Reemplazando la función (2.13) en la ecuación de Schrödinger se obtiene:

$$-\frac{1}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2 \psi_{CM}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_{CM}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_{CM}}{\partial z^2} \right) = E_{CM} \psi_{CM} \quad (2.14)$$

$$-\frac{1}{2\mu} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \right\} + V(r)\psi = E\psi \quad (2.15)$$

Donde los términos dentro del corchete equivalen al operador Laplaciano en coordenadas esféricas y μ representa la masa reducida del sistema de dos partículas. En el caso de dos partículas de igual masa, tenemos $\mu = \frac{m}{2}$.

De aquí en adelante nos concentraremos en el estudio del movimiento relativo de las dos partículas.

Debido a que el potencial es invariante ante rotaciones es posible factorizar la dependencia de r y de los ángulos θ y ϕ . Se obtiene:

$$\psi(\vec{r}) = R_{n,l}(r)Y(\theta, \phi) \quad (2.16)$$

Al introducir la expresión (2.16) en la ecuación (2.15), como es conocido, se obtienen dos ecuaciones independientes; una en componente radial y la otra con la parte angular. Esta última tiene por solución los armónicos esféricos $Y_{l,m}$.

La ecuación radial reviste especial interés, pues es en ella en donde se encuentra el potencial central. Ésta puede ser escrita de la siguiente forma:

$$\frac{1}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R \right] - V(r)R = ER \quad (2.17)$$

En las siguientes subsecciones se hallará una solución analítica a la ecuación (2.17) utilizando dos casos particulares para $V(r)$: el primer caso es el de un potencial de oscilador armónico, en el que se hará especial hincapié, y el segundo es el de un potencial tipo Coulomb.

2.4.1. Base de oscilador armónico

La solución a la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas utilizando el potencial de oscilador armónico es un procedimiento ampliamente conocido [15][10]. Sin embargo, por claridad se mostrará su deducción y se discutirán las características de la base dada por sus autofunciones.

La ecuación de Schrödinger con el potencial de oscilador armónico tiene la forma:

$$\nabla^2\psi(\vec{r}) + 2\mu(E - \frac{1}{2}\mu\omega^2r^2)\psi(\vec{r}) = 0 \quad (2.18)$$

Al realizar la separación de la ecuación en sus variables angulares y radiales, finalmente para la parte radial se obtiene:

$$-\frac{1}{2\mu}(R''_{n,l}(r) + \frac{2}{r}R'_{n,l}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R_{n,l}) + \frac{1}{2}\mu\omega^2r^2 - ER_{n,l} = 0 \quad (2.19)$$

Primero es necesario analizar el comportamiento asintótico de la ecuación (2.19). Para $r \rightarrow \infty$ la anterior expresión se puede escribir de la siguiente forma:

$$-\frac{1}{2m}(R''_{n,l} + \frac{1}{2}\mu\omega^2r^2R_{n,l}) = 0 \quad (2.20)$$

$$R_{r \rightarrow \infty} = \exp(-\frac{\mu\omega}{2}r^2) \quad (2.21)$$

A partir de lo anterior $R_{n,L}(r)$ puede ser escrito de la forma:

$$R_{n,l}(r) = Cr^l Q_{n,l}(r) \exp(-\frac{r^2}{2\bar{r}^2}) \quad (2.22)$$

Donde:

$$\bar{r} = (\frac{1}{\mu\omega})^{\frac{1}{2}} \quad (2.23)$$

La función $Q_{n,l}(r)$ debe cumplir con las siguientes características:

1. Cuando $r \rightarrow 0$ entonces $Q_{n,l}(r) \rightarrow$ constante
2. Cuando $r \rightarrow \infty$ entonces $Q_{n,l}(r) \rightarrow r^p$ donde p es un número real finito

2.4. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER CON POTENCIAL $V(R)$ 17

Las anteriores condiciones permitirán exigir que $Q_{n,l}(r)$ sea un polinomio. Es útil expresar todo en términos de la variable adimensional $s = \frac{r}{r'}$; al reemplazar la expresión (2.22) en la ecuación (2.19) se obtiene:

$$sQ''_{n,l}(s) + 2(l+1-s^2)Q'_{n,l}(s) + \left(\frac{2E}{\omega} - 3 - 2l\right)Q_{n,l}(s)s = 0 \quad (2.24)$$

La ecuación (2.24) puede ser solucionada por medio de expansión en potencias de s . De esta expansión se obtiene la siguiente relación de recurrencia:

$$c_{k+2} = \frac{c_k(2k - (\frac{2E}{\omega} - 3 - 2l))}{(k+2)(k+1+2l+2)} \quad (2.25)$$

Estableciendo un valor máximo de k de manera que Q sea un polinomio y no una serie, se encuentra la siguiente condición para la energía:

$$E = \omega\left(\frac{3}{2} + l + k_{max}\right) \quad (2.26)$$

$$E = \omega\left(\frac{3}{2} + N\right) \quad (2.27)$$

De la ecuación (2.25) se obtiene que k_{max} es un entero par. Por lo tanto el número cuántico de la energía N toma los valores $N = l, l+2, l+4, \dots$. Podemos expresar Q por medio de los polinomios de Laguerre. Es conocido que los polinomios de Laguerre cumplen con la siguiente ecuación diferencial [13].

$$xL_n^{\beta''}(x) + (\beta - x + 1)L_n^{\beta'}(x) + nL_n^{\beta}(x) = 0 \quad (2.28)$$

Al realizar el cambio de variable $x = s^2$ la ecuación (2.28) se puede expresar de la siguiente forma:

$$sL_n^{\beta''}(s^2) + (2\beta - 2s^2 + 1)L_n^{\beta'}(s^2) + 4snL_n^{\beta}(s^2) = 0 \quad (2.29)$$

Al comparar las ecuaciones (2.29) con (2.24) obtenemos las siguientes relaciones:

$$\beta + \frac{1}{2} = l + 1 \Rightarrow \beta = l + \frac{1}{2} \quad (2.30)$$

$$E = \omega\left(2n + l + \frac{3}{2}\right) \quad (2.31)$$

$$Q(s) = L_n^{l+\frac{1}{2}}(s^2) \quad (2.32)$$

Donde se ha definido $n = \frac{N-l}{2}$

Normalizando las funciones de onda se obtiene la siguiente expresión final:

$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{r^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{2n!}{\Gamma(n + \frac{3}{2} + l)} \right)^{\frac{1}{2}} s^l L_n^{l+\frac{1}{2}}(s^2) \exp\left(-\frac{1}{2}s^2\right) \quad (2.33)$$

Las funciones dadas por la ecuación (2.33) constituyen un conjunto completo de funciones ortonormales, más precisamente, la *base* de oscilador armónico. Por su estructura estas funciones cuentan con una transformada de Fourier analítica (también Gaussiana). Esta característica permite realizar cálculos también en el espacio del momentum. Debido a esto la base de OA es ampliamente utilizada en los problemas de física hadrónica ya que por su versatilidad analítica es fácil emplearla para la construcción de la matriz Hamiltoniana con diversos potenciales, con la energía cinética relativista y no relativista. Desafortunadamente su comportamiento asintótico específico, no permite obtener óptimos resultados cuando el potencial en la ecuación de Schrödinger no tiende a infinito como r^2 .

2.4.2. Funciones de onda de Coulomb-Sturmian

La ecuación de Schrödinger con un potencial tipo Coulomb es:

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + 2\mu \left(E - \frac{\tau}{r} \right) \psi(\vec{r}) = 0 \quad (2.34)$$

De igual forma que en la subsección pasada, es posible separar la dependencia angular de la radial. Esta última se puede escribir de la siguiente forma

$$-\frac{1}{2\mu} \left(R'' + \frac{2}{r} R' - \frac{L(L+1)}{r^2} R \right) - \frac{\tau}{r} - ER = 0 \quad (2.35)$$

Con el fin de analizar más fácilmente la ecuación (2.35) se introduce las nuevas variables [6]:

$$\kappa = \sqrt{-2\mu E} \quad (2.36)$$

$$\rho = \kappa r \quad (2.37)$$

$$\rho_0 = \frac{2\mu\tau}{\kappa} \quad (2.38)$$

$$u = \frac{R}{r} \quad (2.39)$$

2.4. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER CON POTENCIAL $V(R)$ 19

Al realizar estos cambios de variable la ecuación (2.35) toma la forma:

$$\frac{du^2}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u \quad (2.40)$$

Para resolver la ecuación diferencial (2.40) es conveniente examinar su comportamiento asintótico para $\rho \rightarrow 0$ y $\rho \rightarrow \infty$. Se obtiene una expresión $u(\rho)$. Donde debe tenerse en cuenta una función $f(\rho)$ que describe el comportamiento en medio de los dos límites mencionados.

$$u(\rho) = \rho^{l+1} f(\rho) \exp(-\rho) \quad (2.41)$$

De igual forma que en el caso del oscilador armónico se encuentra que la función $f(\rho)$ debe ser un polinomio de grado finito para que la función de onda sea normalizable. El procedimiento se describe en textos de mecánica cuántica [10][6] y sólo escribimos el resultado final de la función de onda radial:

$$R_{k,l} = \frac{2}{a^{\frac{3}{2}} k^2} \left[\frac{(k-l-1)!}{[(k+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2r}{ak} \right)^l \exp\left(-\frac{r}{ak}\right) L_{k-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{ak}\right) \quad (2.42)$$

Donde:

$$a = \frac{1}{\mu\tau} \quad (2.43)$$

La expresión (2.42) representan las funciones de Coulomb-Sturmian. Al observar la ecuación (2.42) se observa que la expresión asintótica de la función de onda depende del número cuántico k a diferencia de la base de oscilador armónico. Se resalta que éstas funciones no se consideran como una base completa pues sólo representan los estados ligados del sistema. Esta limitación no hace recomendable su uso en la física hadrónica a diferencia de la base generalizada como se verá en el próximo capítulo.

Capítulo 3

Base generalizada

Como se mencionó en el capítulo anterior el inconveniente de la base de oscilador armónico radica en su rígido comportamiento asintótico. Sin embargo, utilizando las propiedades de ortonormalidad de los polinomios de Laguerre es posible modificar el comportamiento asintótico, conservando el carácter ortonormal de la base. Se estudiará entonces, en este capítulo, la nueva base ortonormal de comportamiento asintótico flexible, que denominaremos base generalizada, y se encontrará una expresión para su transformada de Fourier.

3.1. Deducción de la base generalizada

Partamos de la ecuación (2.33), pero en general, tratemos con una función $F(s)$ como argumento de la función exponencial. Recordemos que se está utilizando la variable adimensional $s = \frac{r}{\bar{r}}$. Debido a que el comportamiento asintótico de la función de onda se va a modificar, la función $Q_{n,l}(s)$ que acompaña al factor exponencial debe ser diferente al del oscilador armónico convencional. Por lo tanto escribimos, en forma general, la función de onda de la siguiente manera:

$$R_{n,l}(s) = \frac{1}{\bar{r}^{\frac{3}{2}}} Q_{n,l}(s) \exp\left(-\frac{1}{2}F(s)\right) \quad (3.1)$$

Donde $\exp\left(-\frac{1}{2}F(s)\right)$ determina el comportamiento asintótico de las funciones de onda y los $Q_{n,l}(s)$ representan funciones “polinomiales” cuya forma específica depende de $F(s)$. En el caso del OA $F(s) = s^2$ y $Q_{n,l}(s) = \left(\frac{2n!}{\Gamma(n+\frac{3}{2}+l)}\right)^{\frac{1}{2}} s^l L_n^{l+\frac{1}{2}}(s^2)$ [1]. Con el propósito de encontrar una expresión con-

creta de la función de onda generalizada se reescribirá la ecuación (3.1) en términos de una nueva función $G_{n,l}(s)$ de la siguiente forma:

$$R_{n,l}(s) = \frac{1}{\bar{r}^{\frac{3}{2}}} s^{-1} G_{n,l}(s) \exp\left(-\frac{1}{2}F(s)\right) \quad (3.2)$$

Donde:

$$G_{n,l}(s) = s^{l+1} Q_{n,l}(s) \quad (3.3)$$

En términos de la función $G_{n,l}(s)$ la condición de ortonormalidad para las funciones de onda es:

$$\int_0^\infty ds G_{n',l}(s) G_{n,l}(s) \exp(-F(s)) = \delta_{n'n} \quad (3.4)$$

Por otro lado la condición de ortonormalidad para los polinomios de Laguerre es:

$$\int_0^\infty du u^\beta L_{n'}^\beta(u) L_n^\beta(u) \exp(-u) = \frac{\Gamma(\beta + n + 1)}{n!} \delta_{n'n} \quad (3.5)$$

Realizando el cambio de variable $F(s) = u$ la condición de ortonormalidad toma la forma:

$$\int_0^\infty ds \left(\frac{dF(s)}{ds}\right) (F(s))^\beta L_{n'}^\beta(F(s)) L_n^\beta(F(s)) \exp(-F(s)) = \frac{\Gamma(\beta + n + 1)}{n!} \delta_{n'n} \quad (3.6)$$

Al comparar la ecuación (3.4) con la ecuación (3.6) es posible encontrar la función $G_{n,l}(s)$ que hace ortonormal la función de onda generalizada (ec (3.2)). El resultado es:

$$G_{n,l}(s) = \left(\frac{n!}{\Gamma(\beta + n + 1)}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{dF}{ds} (F(s))^\beta\right]^{\frac{1}{2}} L_n^\beta(F(s)) \quad (3.7)$$

Reemplazando el anterior resultado (ec(3.7)) en la ecuación (3.2) se obtiene la expresión de la base generalizada.

$$R_{n,l}(s) = \frac{1}{\bar{r}^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{n!}{\Gamma(\beta + n + 1)}\right)^{\frac{1}{2}} s^{-1} \left[\frac{dF}{ds} (F(s))^\beta\right]^{\frac{1}{2}} L_n^\beta(F(s)) \exp\left(-\frac{1}{2}F(s)\right) \quad (3.8)$$

Para caracterizar con más claridad la función de onda se necesita exigir que ésta debe cumplir con las tres condiciones siguientes:

- (a) $Q_{n,l}(0) = cte$;

(b) cuando $s \rightarrow \infty$, $Q_{n,l} \sim s^p$, donde p es un número real positivo;

(c) cuando $s \rightarrow 0$, $F(s) \simeq s^f$, donde f es un número real positivo.

La condición (a) asegura el comportamiento convencional s^l en el origen. La condición (b) es necesaria para obtener funciones de onda normalizables y la condición (c) será utilizada para construir funciones $Q_{n,l}(s)$ que satisfagan la condición (a) [1].

Usando estas condiciones en la función $Q_{n,l}(s)$ (ecuación (3.3)) es posible encontrar una relación entre el parámetro β del polinomio de Laguerre y el número cuántico l

$$cte = s^{-l-1} f s^{\frac{f-1}{2}} s^{\frac{\beta f}{2}} \quad (3.9)$$

Los exponentes tienen que cumplir con la siguiente relación:

$$0 = \frac{f}{2} - \frac{1}{2} + \frac{\beta f}{2} - l - 1 \quad (3.10)$$

$$l + \frac{3}{2} - \frac{f}{2} = \frac{\beta f}{2} \quad (3.11)$$

$$\beta = \frac{2l+3}{f} - 1 \quad (3.12)$$

Analizaremos ahora, con algunos casos específicos, la dependencia de f con respecto al comportamiento asintótico del potencial.

3.1.1. Comportamiento asintótico de la ecuación de Schrödinger con potencial de confinamiento

$$V_{conf} = \sigma r^k$$

En la última parte de la sección anterior se encontró una expresión que relaciona la constante β con l y con el exponente f de la función $F(s)$. Sin embargo, aún no se sabe como esta función está relacionada con el potencial de confinamiento. Para encontrarla estudiaremos en esta sección la ecuación de Schrödinger para $r \rightarrow \infty$. Lo anterior implica que se considerará, en particular, una función $F(s) = s^f$. En el espacio de las coordenadas la ecuación de Schrödinger, con potencial $V(r) = \sigma r^k$ es:

$$-\frac{1}{2m} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{1}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{3\alpha}{4r} + \sigma r^k \right) R(r) = E_{n,l} R_{n,l}(r) \quad (3.13)$$

Desarrollando la derivada:

$$-\frac{1}{2m}\left(\frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{d^2R}{dr^2}\right) + \left(\frac{1}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{3\alpha}{4r} + \sigma r^k\right)R(r) = E_{n,l}R_{n,l}(r) \quad (3.14)$$

Los términos que interesan para el comportamiento asintótico, es decir, en el límite para $r \rightarrow \infty$ son:

$$-\frac{1}{2m}\frac{d^2R}{dr^2} + \sigma r^k = 0 \quad (3.15)$$

Puesto que interesa, en esta sección, solo el comportamiento asintótico escribiremos la función generalizada de la siguiente forma:

$$R(r) = c \exp\left(-\frac{1}{2}s^f\right) \quad (3.16)$$

Es decir, $F(s) = s^f$ como ya se había mencionado.

Donde c es una constante y se ha utilizado el cambio de variable $s = \frac{r}{\bar{r}}$.

Reemplazando (3.16) en la ecuación (3.15) se obtiene:

$$-\frac{1}{2m\bar{r}^2}\left[\frac{cf}{2}\left(\frac{f}{2}s^{2(f-1)} - (f-1)s^{f-2}\right)\right] \exp\left(-\frac{1}{2}s^f\right) + \sigma(s\bar{r})^k c \exp\left(-\frac{1}{2}s^f\right) = 0 \quad (3.17)$$

De nuevo elegimos los términos asintóticos de interés obteniendo:

$$-\frac{1}{2m\bar{r}^2}\left[\frac{f}{2}\left(\frac{f}{2}s^{2(f-1)}\right)\right] + \sigma(s\bar{r})^k = 0 \quad (3.18)$$

$$-\frac{1}{2m\bar{r}^2}\left[\frac{f^2}{4}(s^{2(f-1)})\right] + \sigma(s\bar{r})^k = 0 \quad (3.19)$$

Para que se cumpla la anterior ecuación los exponentes deben cumplir la siguiente igualdad:

$$2(f-1) = k \quad (3.20)$$

$$f = \frac{k}{2} + 1 \quad (3.21)$$

La anterior expresión relaciona el comportamiento asintótico de la base generalizada con el exponente del potencial de confinamiento.

En la tabla 3.1 utilizamos el resultado de la ecuación (3.21) para los dos casos siguientes: el potencial de OA y el de Cornell.

Relaciones asintóticas	
k	f
1	$\frac{3}{2}$
2	2

Tabla 3.1: Relaciones asintóticas entre la base generalizada y el potencial de confinamiento para los casos particulares de potencial de Cornell $k = 1$ (primera fila) y de OA $k = 2$ (segunda fila)

3.2. Transformada de Fourier de la Función de onda

Consideramos un Hamiltoniano para dos partículas relativistas de masa m de la forma

$$H = \sqrt{\vec{p}_1^2 + m^2} + \sqrt{\vec{p}_2^2 + m^2} + V(r) \quad (3.22)$$

Si se considera el sistema en el centro de masa se tiene que: $\vec{p}_1^2 = -\vec{p}_2^2 = \vec{p}^2$ el Hamiltoniano toma la forma:

$$H^{CM} = 2\sqrt{\vec{p}^2 + m^2} + V(r) \quad (3.23)$$

Por lo tanto, para realizar cálculos de elementos de matriz del término cinético del Hamiltoniano anterior es necesario realizar la transformada de Fourier de la función de onda, definido como $\Psi_{n,l}(\vec{p})$. En particular los elementos de matriz de la energía cinética relativista tienen la forma:

$$\mathbb{E}_{l;n',n} = \int d^3p \Psi_{n',l,m}(\vec{p}) 2\sqrt{p^2 + m^2} \Psi_{n,l,m}(\vec{p}) \quad (3.24)$$

$$\mathbb{E}_{l;n',n} = E_{l;n',n} \delta_{l',l} \delta_{m',m} \quad (3.25)$$

Donde los deltas surgen debido a la ortonormalidad de los armónicos esféricos. La expresión para $\Psi_{n,l}(\vec{p})$ puede conseguirse utilizando la expansión de ondas planas en ondas esféricas. Para ello partamos de la siguiente expresión:

$$\Psi_{n,l,m}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \Psi(\vec{r}) \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r}) d^3r \quad (3.26)$$

Si consideramos que la función de onda se puede expresar de la forma:

$$\Psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (3.27)$$

La ecuación 3.26 queda expresada:

$$\Psi_{n,l,m}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r}) \quad (3.28)$$

Utilizando la expansión de la onda plana en armónicos esféricos [21]:

$$\exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r}) = 4\pi \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} i^{l'} j_{l'}(pr) Y_{l',m'}^*(\hat{r}) Y_{l',m'}(-\hat{p}) \quad (3.29)$$

Donde j_l son las funciones esféricas de Bessel. A partir las anteriores ecuaciones y utilizando las conocidas propiedades de los armónicos esféricos la función de onda en el espacio del momentum queda:

$$\Psi_{n,l,m}(\vec{p}) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3r \sum_{m'=-l'}^{l'} i^{l'} j_{l'}(pr) Y_{l',m'}^*(\theta, \phi) Y_{l',m'}(-\hat{p}) R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (3.30)$$

Utilizando la ortogonalidad de los armónicos esféricos se obtiene:

$$\Psi_{n,l}(\vec{p}) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} i^l (-1)^l Y_{l,m}(\hat{p}) \int_0^\infty r^2 dr R_{n,l}(r) j_l(rp) \quad (3.31)$$

Podemos por lo tanto escribir:

$$\Psi_{n,l}(\vec{p}) = R_{n,l}(p) Y_{l,m}(\hat{p}) \quad (3.32)$$

Donde:

$$R_{n,l}(p) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} i^l (-1)^l \int_0^\infty r^2 dr R_{n,l}(r) j_l(rp) \quad (3.33)$$

Teniendo en cuenta los siguientes cambios de variable, las funciones de onda se expresan en términos de las variables adimensionales s y q :

$$p = \bar{p}q \quad (3.34)$$

$$r = \bar{r}s \quad (3.35)$$

$$\bar{p} = \frac{1}{\bar{r}} \quad (3.36)$$

3.2. TRANSFORMADA DE FOURIER DE LA FUNCIÓN DE ONDA 27

Utilizamos también la forma explícita de las funciones esféricas de Bessel para $l=0,1,2$:

$$j_0(rp) = \frac{\text{sen}(sq)}{sq} \quad (3.37)$$

$$j_1(rp) = \frac{1}{sq} \left(\frac{\text{sen}(sq)}{sq} - \cos(sq) \right) \quad (3.38)$$

$$j_2(rp) = \frac{1}{sq} \left(\left(\frac{3}{(sq)^2} - 1 \right) \text{sen}(sq) - \frac{3}{sq} \cos(sq) \right) \quad (3.39)$$

Obtenemos finalmente las funciones de onda para $l = 0, 1, 2$:

$$R_{n,0}(q) = \frac{4\pi\bar{r}^{\frac{3}{2}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty s ds R_{n,0}(s) \frac{\text{sen}(qs)}{q} \quad (3.40)$$

$$R_{n,1}(q) = \frac{4\pi\bar{r}^{\frac{3}{2}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty s^2 ds R_{n,1}(s) \left(\frac{1}{sq} \left(\frac{\text{sen}(sq)}{sq} - \cos(sq) \right) \right) \quad (3.41)$$

$$R_{n,2}(q) = \frac{4\pi\bar{r}^{\frac{3}{2}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty s^2 ds R_{n,2}(s) \left(\frac{1}{sq} \left(\left(\frac{3}{(sq)^2} - 1 \right) \text{sen}(sq) - \frac{3}{sq} \cos(sq) \right) \right) \quad (3.42)$$

En general la Ec (3.31) representa la función de onda en el espacio del momentum, necesaria para calcular los elementos de matriz de la ecuación (3.24). Esta ecuación puede ser utilizada con la base de oscilador armónico generalizado, por lo tanto a partir de esta función de onda, se podrá trabajar en el espacio del momentum teniendo en cuenta el comportamiento asintótico sugerido por el potencial de confinamiento.

Capítulo 4

Método de diagonalización-minimización aplicado a la base generalizada

Antes de enfrentar el problema del espectro del Charmonium ($c\bar{c}$) es necesario tener confianza que el método numérico variacional, en el que se utiliza la base generalizada, sea eficiente en el momento de calcular las energías de sistemas físicos.

Por tanto se inicia éste capítulo, explicando el método implementado.

Luego se valida el método por medio de casos específicos para los cuales existen soluciones analíticas, y al final se extiende al estudio de sistemas ligados con potenciales mas complicados.

Para encontrar resultados concretos, en este capítulo se definirá la función $F(s)$ que rige el comportamiento asintótico de la función de onda y se encontrará en forma explícita el elemento de matriz del Hamiltoniano en la base generalizada. Adicionalmente se utilizará el átomo de hidrógeno (H) como ejemplo particular para validar la base generalizada, calculando el espectro de energías. Posteriormente se utilizará un potencial tipo Coulomb, pero con valores de los parámetros que arrojen valores de energía del orden de los MeV, es decir, en el rango de energías que se encuentran en los espectros hadrónicos. También se reproducirá el espectro del Charmonium ($c\bar{c}$) utilizando los parámetros de la referencia [2]. Por último se hallarán los mismos espectros de H y ($c\bar{c}$) pero con base de oscilador armónico para comparar los resultados obtenidos.

4.1. Descripción general del método de diagonalización-minimización

4.1.1. El principio variacional

Supongamos que cierto sistema físico cumpla con la siguiente ecuación de autovalores:

$$H|\phi_k\rangle = E_k|\phi_k\rangle \quad (4.1)$$

Sin embargo, si no es posible hallar los autovalores exactos del Hamiltoniano es posible utilizar un ket de prueba $|\psi\rangle$ el cual deberá depender de un número finito de parámetros.

El valor esperado del Hamiltoniano en el estado $|\psi\rangle$ toma la siguiente forma:

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (4.2)$$

El estado $|\psi\rangle$ puede ser escrito como una combinación lineal de los estados propios del Hamiltoniano:

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |\phi_k\rangle \quad (4.3)$$

Utilizando la expresión (4.2) y (4.3) se obtiene:

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_k \sum_l c_k c_l^* \langle \phi_l | H | \phi_k \rangle}{\sum_k c_k c_k^*} \quad (4.4)$$

A partir de valores propios (4.1) la anterior ecuación se puede expresar de la siguiente forma:

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_k c_k c_k^* E_k}{\sum_k c_k c_k^*} \quad (4.5)$$

$$\langle H \rangle = \frac{|c_0|^2 E_0 + \sum_{k=1} c_k c_k^* E_k}{\sum_k c_k c_k^*} \quad (4.6)$$

Utilizando la expresión $E_k = E_k + E_0 - E_0$ la ecuación (4.6) se puede escribir de la siguiente forma [22]:

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_{k=1} c_k c_k^* (E_k - E_0)}{\sum_k c_k c_k^*} + E_0 \quad (4.7)$$

Puesto que el factor $E_k - E_0$ es mayor que cero, se concluye que:

$$\langle H \rangle > E_0 \quad (4.8)$$

El anterior resultado asegura que siempre la energía hallada con cualquier ket de prueba será mayor al estado base exacto del sistema físico.

En concreto, al variar los parámetros de los que depende el ket de prueba se busca minimizar el valor esperado de la energía con el fin de acercarse lo máximo posible al valor exacto del estado base del Hamiltoniano.

El tipo de función de prueba más utilizado, consiste en la combinación lineal de un conjunto finito de N kets pertenecientes a una base ortonormal[24]:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \quad (4.9)$$

Reemplazando la anterior ecuación (4.9) en la ecuación (4.2) se obtiene:

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_m \sum_n c_n c_m^* \langle \varphi_m | H | \varphi_n \rangle}{\sum_n c_n c_n^*} \quad (4.10)$$

Para encontrar los estados estacionarios del Hamiltoniano se realiza la variación del valor esperado del Hamiltoniano respecto a los parámetros lineales c_k^* y se coloca la siguiente condición $\frac{\partial H}{\partial c_k^*} = 0$. Para aplicar la condición mencionada es conveniente escribir la expresión (4.10) de la siguiente forma:

$$\langle H \rangle \sum_n c_n c_n^* = \sum_m \sum_n c_n c_m^* \langle \varphi_m | H | \varphi_n \rangle \quad (4.11)$$

Derivando respecto a c_k^* se obtiene:

$$\sum_n \langle \varphi_k | H | \varphi_n \rangle c_n = \langle H \rangle c_k \quad (4.12)$$

La ecuación matricial (4.12) es una ecuación de valores propios de dimensión N , la cual se puede identificar con $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Por tanto el cálculo de los autovalores de la ecuación (4.12) proporcionará una buena aproximación a las energías exactas del sistema físico.

4.1.2. Descripción del método numérico utilizado en la construcción del espectro del Charmonium

Con el fin de hallar valores aproximados de la ecuación de Schrödinger se supondrá una función de prueba como la descrita en la ecuación (4.9). La

combinación lineal estará constituida de 10 elementos de la base generalizada. Por lo tanto, la matriz Hamiltoniana (4.12) será construida utilizando la base generalizada a partir de una rutina en fortran que fue construida con este fin específico (Ver apéndice B.1).

Posteriormente, será diagonalizada utilizando uno de los programas públicos del CERN conocido como Dsyev.

El parámetro variacional de la base generalizada \bar{r} será barrido con el fin de acercarse aún más al valor exacto del estado base, en virtud del principio variacional.

Por último, se realizará un *fit* sobre los parámetros del potencial, con el fin de reproducir de la mejor forma posible las masas experimentales del Charmonium.

Vale la pena notar que cada vez que se modifique el parámetro variacional será necesario construir y diagonalizar la matriz Hamiltoniana, lo cual incrementa el tiempo de cálculo.

Este método de solución numérica aproximada de la ecuación tipo Schrödinger será identificado con el nombre “diagonalización-minimización (DM)” y es con el cual serán obtenidos los espectros de energías para los diferentes sistemas analizados.

4.2. Elemento de la matriz Hamiltoniana con la base generalizada

Con el propósito de obtener resultados concretos de las energías, se definirá el comportamiento asintótico de la función de onda generalizada de la siguiente forma relativamente sencilla:

$$F(s) = s^f \quad (4.13)$$

$$f > 0 \quad (4.14)$$

Utilizando esta función para $F(s)$, la base generalizada de la Ec(3.8) toma la siguiente forma:

$$R_{n,l}(s) = \frac{1}{\bar{r}^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{n!}{\Gamma(\beta + n + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} f^{\frac{1}{2}} s^{\frac{f+f\alpha-3}{2}} L_n^\alpha(s^f) \exp\left(-\frac{1}{2}s^f\right) \quad (4.15)$$

El elemento de matriz de un Hamiltoniano con energía cinética no relativista es:

$$\langle n, l | H | n', l \rangle = \langle n, l | \frac{p^2}{2m} | n', l \rangle + \langle n, l | V(r) | n', l \rangle \quad (4.16)$$

Donde la masa m es tomada como uno de los parámetros del modelo de potencial.

Expresado en forma integral, el elemento da matriz correspondiente al potencial es:

$$\langle n, l | V(r) | n', l \rangle = \int_0^\infty dr r^2 R_{n,l}(r) V(r) R_{n',l}(r) \quad (4.17)$$

Haciendo el cambio de variable $r = \bar{r}s$ y utilizando en $V(r)$ el potencial de Coulomb se obtiene:

$$\begin{aligned} \langle n, l | V(r) | n', l \rangle &= \int_0^\infty dr r^2 R_{n,l}(r) \left(-\frac{\alpha_0}{r}\right) R_{n',l}(r) \quad (4.18) \\ \langle n, l | V(s) | n', l \rangle &= -\frac{\alpha_0}{\bar{r}} \frac{n!}{\Gamma(\beta + n + 1)} \int ds f s^{f+\alpha f-3} L_n^\alpha(s^f) \exp(-s^f) L_{n'}^\alpha(s^f) \quad (4.19) \end{aligned}$$

Donde α_0 representa la constante de estructura fina.

En el caso del Charmoniun el potencial tiene un término adicional de confinamiento del tipo σr^k . El elemento de matriz correspondiente es:

$$\langle n, l | V_{conf}(r) | n', l \rangle = \sigma \int dr r^2 R_{n,l}(r) r^k R_{n',l}(r) \quad (4.20)$$

En términos de la forma explícita de la base generalizada y la variable adimensional s la expresión (4.20) queda:

$$\langle n, l | V_{conf}(s) | n', l \rangle = \frac{n!}{\Gamma(\beta + n + 1)} \bar{r}^k \sigma \int ds f s^{2+k} s^{f+\alpha f-3} L_n^\alpha(s^f) \exp(-s^f) L_{n'}^\alpha(s^f) \quad (4.21)$$

Por otro lado, el elemento de matriz correspondiente a la energía cinética es:

$$\langle n, l | \frac{p^2}{2m} | n', l \rangle = -\frac{1}{2m} \int dr r^2 R_{n,l}(r) \nabla^2 R_{n',l}(r) \quad (4.22)$$

$$\langle n, l | \frac{p^2}{2m} | n', l \rangle = -\frac{1}{2m\bar{r}^2} \int ds s^2 R_{n,l}(s) \nabla_s^2 R_{n',l}(s) \quad (4.23)$$

En el apéndice A se muestra que el Laplaciano de la base generalizada se puede expresar de la siguiente forma analítica:

$$\begin{aligned} \nabla_s^2 R_{n',l}(s) = & \frac{1}{\bar{r}^{\frac{7}{2}}} \left(\frac{n'}{\Gamma(\beta + n' + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} f^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}s^f\right) s^{\frac{f+f\alpha-3}{2}} \{L_{n'}^\alpha(s^f) \left[\frac{1}{4} f^2 s^{2f-2} \right. \\ & - \frac{1}{2} f \left(\frac{3f + f\alpha - 5}{2} \right) s^{f-2} - \frac{1}{2} f \left(\frac{f + f\alpha - 3}{2} \right) s^{f-2} + \\ & \left. \left(\frac{f + f\alpha - 3}{2} \right) \left(\frac{f + f\alpha - 5}{2} \right) s^{-2} - f s^{f-2} + (f + f\alpha - 3) s^{-2} \right] - f s^{f-1} L_{n'-1}^{\alpha+1}(s^f) \left[-f s^{f-1} \right. \\ & \left. + (f + f\alpha - 3) s^{-1} + (f - 1) s^{-1} + 2s^{-1} \right] + L_{n'-2}^{\alpha+2}(s^f) \left[f^2 s^{2f-2} \right] \} \quad (4.24) \end{aligned}$$

Utilizando los anteriores resultados e implementando un programa numérico (véase el Apéndice B.1) es posible construir la matriz Hamiltoniana con la base generalizada. En el caso del Charmonium donde no son conocidos los parámetros del potencial, es necesario hacer un fit sobre los parámetros libres del modelo al comparar los resultados numéricos con los datos experimentales. De esta manera es posible reproducir en forma aproximada el espectro de un sistema ligado como el Charmonium.

4.3. Solución numérica de la ecuación de Schrödinger con un potencial tipo Coulomb

Para validar el método numérico, se comenzará esta sección utilizando el potencial de Coulomb con el fin de reproducir el espectro de energías del átomo de hidrógeno utilizando la base generalizada.

La solución a la ecuación de Schrödinger utilizando el potencial $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ ya fue discutida en la sección 2.4.2 (ver ecuación (2.42)).

Es característica de las funciones de onda del átomo de hidrógeno, la dependencia de la energía en su comportamiento asintótico debido a que cuando $r \rightarrow \infty$ se cumple que $V(r) \rightarrow 0$. A causa de ello las funciones (2.42) no forman una base completa porque solo se tiene en cuenta los estados ligados. Recordemos que, en cambio, en la base generalizada no tenemos dependencia de la energía en $F(s)$ las cuales representan un conjunto completo y ortonormal.

La función de onda radial en la expresión (2.42) tiene transformada de Fourier

analítica. La gráfica de la función de onda radial en el espacio del momentum para el estado base se presenta a continuación (figuras 4.1). Esta gráfica fue hallada en forma numérica con la base generalizada a través de la expresión (3.31).

La gráfica concuerda con la que se obtiene analíticamente.

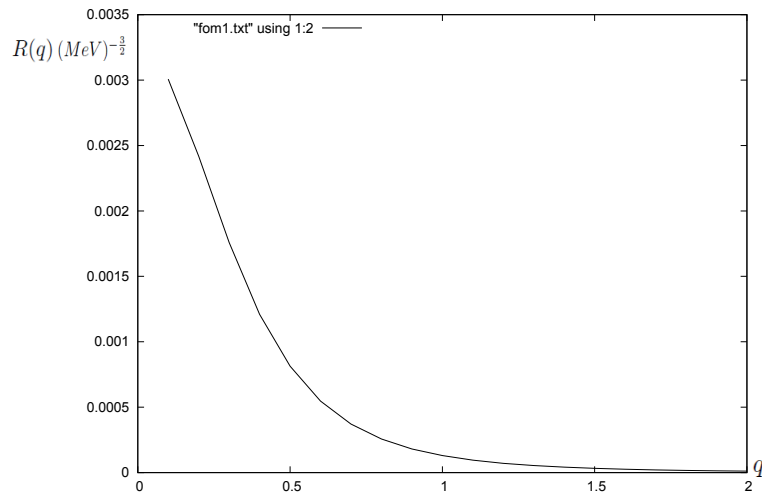


Figura 4.1: Función de onda en el espacio del momentum $R(q)$ en $(MeV)^{-\frac{3}{2}}$ Vs q (variable adimensional), obtenido numéricamente

Utilizando el comportamiento asintótico $F(s) = s$ (con $f=1$ según (4.13)) en la base generalizada y el potencial de Coulomb las energías de los estados encontrados para el átomo de hidrógeno se presentan en la tabla 4.1. Se observan las coincidencias para la mínima energía y primer estado excitado con el momento angular orbital $l = 0, 1, 2$ y una buena aproximación al segundo estado excitado.

Los anteriores resultados en cuanto al cálculo de los estados ligados y la reproducción de la función de onda en el espacio del momentum brindan confianza en el método numérico (por lo menos para los estados de baja excitación). Sin embargo, el orden de magnitud de las energías halladas en el átomo de hidrógeno no se asemejan a las masas que comúnmente se encuentran en el estudio del Charmonium. Por tanto, y para terminar, utilizaremos parámetros de diferente valor en el potencial tipo Coulomb para mostrar que, con el método DM, se pueden reproducir correctamente niveles energéticos del orden de los MeV en las energías de los estados ligados con un potencial tipo Coulomb.

Espectro átomo de hidrogeno		
Estado	$E_{n,l}^{BG}(eV)$	$E_{n,l}^{exacto}(eV)$
1s	-13.6	-13.6
2s	-3.4	-3.4
3s	-1.2	-1.5
1p	-3.4	-3.4
2p	-1.5	-1.5
3p	-0.7	-0.85
1d	-1.51	-1.51
2d	-0.85	-0.85
3d	-0.5	-0.54

Tabla 4.1: Espectro del átomo de hidrógeno utilizando la base generalizada comparado con el resultado exacto

Utilizando los siguientes parámetros en el potencial $\alpha_0 = 1$; $m = 1200MeV$ se obtienen valores para algunos estados con energías medidas en MeV. En la

Espectro de un sistema arbitrario		
Estado	$E_{n,l}(MeV)$	$E_{n,l}^{exacto}(MeV)$
1s	-600	-600
2s	-150	-150
3s	-41.6	-66.6
1p	-150	-150
2p	-66.6	-66.5
3p	-37.3	-37.5
1d	-66.6	-66.6
2d	-37.4	-37.5
3d	-23.8	-24

Tabla 4.2: Espectro de un sistema obtenido con parámetros arbitrarios

tabla 4.2 se observan las energías obtenidas con los parámetros previamente mencionados.

Los resultados obtenidos permiten avanzar al cálculo de las masas del Charmonium.

4.4. Cálculos de masa del Charmonium con parámetros de referencia

Otra prueba, consistirá en reproducir las masas “desnudas” (sin interacciones dependientes del espín), por medio de nuestro método, del Charmonium obtenidas en la referencia [2] en donde utilizaron una técnica numérica diferente. La energía cinética usada es la no relativista y el potencial que allí utilizan en el Hamiltoniano no perturbativo presenta el término tipo Coulomb más el potencial de confinamiento lineal, conocido como potencial de Cornell, ya discutido en la sección 2.3:

$$V(r) = -\frac{4\alpha}{3r} + \sigma r \quad (4.25)$$

Los parámetros que se utilizan se muestran en la tabla 4.3:

Parámetros referencia		
α	$\sigma(MeV)$	$m(MeV)$
0.29	1306	1218.5

Tabla 4.3: Parametros utilizados en la referencia [2]

Los resultados obtenidos por medio de la base generalizada y por la referencia [2] se muestran en la tabla 4.4, donde debe recordarse que las masa se calcula de la siguiente forma:

$$M_{n,l} = 2m + E_{n,l} \quad (4.26)$$

Donde $E_{n,l}$ son los autovalores que surgen en la diagonalización de la matriz Hamiltoniana y m es la masa asignada a cada quark.

En esta tabla es posible observar las buenas concordancias entre los resultados obtenidos con la base generalizada, donde el comportamiento asintótico de las funciones de onda es el sugerido por el potencial de confinamiento (véase la tabla 3.1 para el potencial de Cornell), con las masas obtenidas en la referencia.

Los buenos resultados obtenidos son producto de la modificación del comportamiento asintótico en base a este confinamiento particular (ec (4.25)). Sin embargo, un confinamiento lineal puede no ser el más apropiado para mejorar los resultados numéricos. Por lo tanto lo más conveniente es cambiar

Charmonium		
Estado	$M_{n,l}^{BG} (MeV)$	$M_{n,l}^{ref} (MeV)$
1s	3086	3086
2s	3829	3828
3s	4427	4404
4s	5110	—
1p	3573	3573
2p	4179	4179
3p	4697	—
4p	5163	—
1d	3944	3944
2d	4484	—
3d	4965	—
4d	5405	—

Tabla 4.4: Masas sin interacciones hiperfinas halladas a partir de la base generalizada (segunda columna) utilizando los parámetros citados en la tabla 4.3, comparadas con las masas obtenidas en la referencia [2] (tercera columna)

la forma del potencial de confinamiento, lo cual, modificará automáticamente el comportamiento asintótico de la base generalizada. Éste cambio no afectará la ortonormalidad de las mismas, asegurando la efectividad del método para hallar las masas de los diferentes estados del Charmonium.

4.5. Energías del átomo de hidrógeno y del Charmonium utilizando la base de oscilador armónico

Algunos detalles de la base de oscilador armónico y las ventajas que esta presenta ya fueron resumidas en la sección 2.4.1. En esta sección se mostrará el espectro del átomo de hidrógeno y del Charmonium utilizando la base de oscilador armónico en la construcción de la matriz hamiltoniana para su diagonalización y minimización. Los resultados para la energía del átomo de hidrógeno obtenidos utilizando la base de oscilador armónico se muestran en la segunda columna de la tabla 4.5. Se observa la buena concordancia para

el estado base, una aproximación aceptable para el primer estado excitado por lo menos para $l = 1, 2$ y unos resultados no aceptables para los siguientes estados excitados. Estas discrepancias son debidas, a la diferencia entre los comportamientos asintóticos de la base y del potencial del sistema físico lo cual genera una clara deficiencia en el cálculo de las energías de los estados excitados.

Esto se ve aún con más claridad al comparar con los datos obtenidos utilizando la base generalizada, con la cual se obtienen mejores resultados para los estados excitados.

Espectro átomo de hidrogeno			
Estado	$E_{n,l}^{OA}(eV)$	$E_{n,l}^{BG}(eV)$	$E_{n,l}^{exacto}(eV)$
1s	-13.5	-13.6	-13.6
2s	0.5	-3.4	-3.4
3s	—	-1.2	-1.5
1p	-3.4	-3.4	-3.4
2p	-1.2	-1.5	-1.5
3p	1.3	-0.7	-0.85
1d	-1.51	-1.51	-1.51
2d	-0.8	-0.85	-0.85
3d	-0.04	-0.5	-0.54

Tabla 4.5: Espectro del átomo de hidrógeno utilizando la base de OA (segunda columna), base generalizada BG, (tercera columna) comparado con el resultado exacto (cuarta columna)

Por otro lado las masas del Charmonium obtenidas utilizando los parámetros de la tabla 4.3 se presentan en la tabla 4.7 donde se han obtenido a partir de la base de oscilador armónico, base generalizada, de la referencia [2], y por último nuevamente con base de oscilador armónico pero realizando un fit sobre los parámetros fenomenológicos de tal manera que reproduzcan mejor los datos de la referencia, encontrando los valores que se muestran en el tabla 4.6. Utilizando estos parámetros se encuentran las masas del Charmonium que se exponen en la quinta columna de la tabla 4.7.

Utilizando la base de oscilador se obtienen buenos resultados para los estados de menor energía para cada $l = 0, 1, 2$ muy cerca de los obtenidos por la base generalizada, sin embargo, los estados excitados no siguen el mismo patrón. Esto muestra las limitaciones de esta base en el cálculo de la masas

Parámetros con base de oscilador		
α	$\sigma(MeV)$	$m(MeV)$
0.33	1390	1382

Tabla 4.6: Parametros encontrados con la base de oscilador armónico que mejor reproducen los datos de la referencia [2]

para los estados excitados, pues los resultados obtenidos resultan ser mucho mayores de lo esperado, defecto importante si se tiene en cuenta que aún los resultados obtenidos en la referencia estan lejos de los valores experimentales (sin interacciones finas e hiperfinas) como se mostrará posteriormente.

Espectro del Charmonium				
Estado	$M_{n,l}^{OA}(MeV)$	$M_{n,l}^{BG}(MeV)$	$M_{n,l}^{ref}(MeV)$	$M_{n,l}^{nuevofit}(MeV)$
1s	2819.2	3086	3086	3077
2s	3688	3829	3828	3930.7
3s	4598.3	4427	4404	4804.9
4s	5731	5110	—	5869.2
1p	3310.6	3573	3573	3576
2p	4144.6	4179	4179	4387.7
3p	4980.2	4697	—	5194.5
4p	5872.5	5163	—	6022.3
1d	3750.45	3944	3944	4009.6
2d	4577	4484	—	4812.3
3d	5401.2	4965	—	5612.3
4d	6225	5405	—	6410.6

Tabla 4.7: Masas del Charmonium utilizando la base de oa (segunda columna), base generalizada, (tercera columna) y referencia utilizando parámetros de la tabla 4.3 (cuarta columna). En la quinta columna se exponen las masas halladas con base de oscilador armónico y con nuevos parámetros: $m = 1382MeV$, $\sigma = 1390MeV$, $\alpha = 0,33$

Capítulo 5

Espectro del Charmonium utilizando un modelo no relativista con potencial de confinamiento de la forma r^k

En el capítulo anterior se validó el método de DM implementando la base generalizada, por medio de la reproducción del espectro de energía de un caso analítico conocido: el potencial de Coulomb. Se estudió también los valores de las masas “desnudas” del Charmonium encontradas en la referencia [2], las cuales no pueden ser calculadas analíticamente. Por esta razón, el método ya ha probado ser confiable y es posible avanzar en el estudio del espectro del Charmonium utilizando un modelo de potencial con confinamiento diferente al lineal. Al modificar el comportamiento del potencial de confinamiento se añade un parámetro más al modelo de potencial y se modifica automáticamente el comportamiento asintótico de la base generalizada, manteniéndose su ortonormalidad.

Con el fin de reproducir el espectro del Charmonium se utilizará un modelo de potencial en el cual no se tendrán en cuenta las correcciones relativistas de las interacciones dependientes del espín (espín-orbita, espín-espín y tensorial). Debido a esto no será posible utilizar de forma directa los datos experimentales de las masas de los diferentes estados del Charmonium.

En base a lo anterior se hallará en la sección 5.1 a partir de los datos experimentales, el valor de las masas de cuatro estados del Charmonium sustrayendo por medio de una hipótesis perturbativa los efectos correspondientes

a las interacciones dependientes del espín, las cuales serán identificadas con las siglas IDE. Llamaremos estas masas sin IDE masas “desnudas”.

A continuación en la sección 5.2 se realizará un fit sobre los parámetros del potencial de tal manera que se reproduzcan de la forma más aproximada posible los valores de las masas desnudas obtenidas a partir de los datos experimentales. También en la misma sección será realizado el fit sobre los parámetros fenomenológicos utilizando la base de oscilador armónico y los resultados serán comparados con los previamente calculados y con los de la referencia [2]. Finalmente se discutirán los resultados obtenidos.

5.1. Masas sin las correcciones dependientes del espín a partir de los datos experimentales

Puesto que en este trabajo no se estudian las correcciones debidas a las IDE, es necesario comparar las masas obtenidas utilizando la base generalizada con el valor experimental de las masas sin estas interacciones que llamamos “masas desnudas”.

Con este fin hacemos la hipótesis que la IDE pueden ser tratadas perturbativamente.

La expresión perturbativa del Hamiltoniano esta conformada por la interacción espín-espín, espín-orbita y tensorial como se expone a continuación:

$$H^{(1)} = U_{ss}(r)\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + U_{LS}(r)\vec{L} \cdot \vec{S} + U_T(r)O_T(\hat{r}, \vec{s}_1 \vec{s}_2) \quad (5.1)$$

Donde el operador de la interacción tensorial esta dada por:

$$O_T(\hat{r}, \vec{s}_1 \vec{s}_2) = 12[(\vec{s}_1 \cdot \hat{r})(\vec{s}_2 \cdot \hat{r}) - \frac{1}{3}\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2] \quad (5.2)$$

Dada la estructura de la IDE podemos utilizar estados acoplados de la forma:

$$|n; l, S, J, M\rangle = \sum_{m_l, m_s} |n; l; m_l\rangle |S, m_s\rangle \langle l, m_l; S, m_s | J, M\rangle = [|n; l\rangle \otimes |S\rangle]_{J, M} \quad (5.3)$$

Recordemos que $l \geq 0$ y $S = 0, 1$

Despreciaremos, como es costumbre en física del Charmonium, los elementos

5.1. CHARMONIUM SIN CORRECCIONES DEPENDIENTES DEL ESPÍN 45

no diagonales en l dados por el operador tensorial de la ecuación (5.2). Por tanto la ecuación de autovalores se escribe de la siguiente forma:

$$(H^{(0)} + H^{(1)})|n; l, S, J, M\rangle = (E_{n,l}^{(0)} + E_{n,l}^{(1)})|n; l, S, J, M\rangle \quad (5.4)$$

Analicemos perturbativamente cada término del Hamiltoniano de la IDE. Los términos espín-espín y espín-orbita son comunmente tratados con la formula de Landé. De donde se obtienen los siguientes resultados:

$$\langle n, l, S, J, M | (\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2) U_{ss}(r) | n, l, S, J, M \rangle = \left[\frac{1}{2} S(S+1) + \frac{3}{4} \right] W_{n,l}^{ss} \quad (5.5)$$

$$\langle n, l, S, J, M | (\vec{S} \cdot \vec{L}) U_{LS}(r) | n, l, S, J, M \rangle = \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] W_{n,l}^{LS} \quad (5.6)$$

Donde $W_{n,l}^{ss}$ y $W_{n,l}^{LS}$ representan los elementos de matriz de $U_{ss}(r)$ y $U_{LS}(r)$ con la funciones de onda radiales.

Finalmente los elementos de matriz diagonales de la interacción tensorial se pueden calcular de manera estándar por medio del algebra de momentum angular [21],[25]. Los resultados, bien conocidos en la literatura [2], tienen la siguiente forma:

$$\langle n, l, S, J, M | U_T(r) O_T(\hat{r}, \vec{s}_1 \vec{s}_2) | n, l, S, J, M \rangle = (1 - \delta_{l,0}) \delta_{S,1} W_{n,l}^T K_{l,J}^T \quad (5.7)$$

Donde $K_{l,J}^T$ es:

$$K_{l,J}^T = \begin{cases} -\frac{2(l+1)}{2l-1}, & \text{para } J = l - 1 \\ 2, & \text{para } J = l \\ -\frac{2l}{2l+3}, & \text{para } J = l + 1 \end{cases}$$

Utilizando las anteriores ecuaciones es posible escribir la corrección a primer orden en la teoría de perturbaciones:

$$\begin{aligned} \langle n, l, S, J, M | H^{(1)} | n, l, S, J, M \rangle &= W_{n,l}^{ss} \left[\frac{1}{2} S(S+1) - \frac{3}{4} \right] + \\ & W_{n,l}^{LS} \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] + (1 - \delta_{l,0}) \delta_{S,1} W_{n,l}^T K_{l,J}^T \end{aligned} \quad (5.8)$$

Podemos expresar ahora la masa de los diferentes estados del Charmonium de la siguiente forma:

$$\mathcal{M}_{n,l,S,J} = M_{n,l}^{(0)} + \langle n, l, S, J, M | H^{(1)} | n, l, S, J, M \rangle \quad (5.9)$$

El término $\mathcal{M}_{n,l}$ representa la masa experimental del Charmonium en un determinado estado y $M_{n,l}^{(0)}$ es la masa “desnuda” es decir, sin las IDE.

A partir de las anteriores ecuaciones, se puede extraer las masas $M_{n,l}^{(0)}$ de los datos de Particle Data Group (PDG) [26]. Por claridad se reproduce una tabla con los datos experimentales que serán utilizadas en esta sección.

Masas Experimentales	
Estado	$M_{Exp}(MeV)$
1^1S_0	$2980,4 \pm 1,2$
1^3S_1	$3096,916 \pm 0,011$
1^1P_1	$3526,21 \pm 0,25$
1^3P_0	$3415,16 \pm 0,35$
1^3P_1	$3510,59 \pm 0,10$
1^3P_2	$3556,26 \pm 0,11$
2^1S_0	3638 ± 5
2^1S_1	$3686,093 \pm 0,034$
3^3S_1	4040 ± 10

Tabla 5.1: Masas experimentales de los estados del Charmonium extraídas del PDG

Para los estados 1^1S_0 y 1^3S_1 la corrección debido a la interacción espín-orbita y tensorial se anulan y solo permanece la espín-espín.

Utilizando las masas experimentales, la ecuación (5.9) se reduce a las siguientes expresiones para cada estado respectivamente:

$$\mathcal{M}(1^1S_0) = M_{1,0}^{(0)} - \frac{3}{4}W_{1,0}^{ss} \quad (5.10)$$

$$\mathcal{M}(1^3S_1) = M_{1,0}^{(0)} + \frac{1}{4}W_{1,0}^{ss} \quad (5.11)$$

Resolviendo el sistema simple de ecuaciones obtenemos:

$$M_{1,0}^{(0)} = 3067,78MeV \quad (5.12)$$

$$W_{1,0}^{ss} = 116,5MeV \quad (5.13)$$

5.1. CHARMONIUM SIN CORRECCIONES DEPENDIENTES DEL ESPÍN47

Se puede proceder de manera semejante para hallar $M_{1,1}$:

$$\mathcal{M}(1^1P_1) = M_{1,1}^{(0)} - \frac{3}{4}W_{1,1}^{ss} \quad (5.14)$$

$$\mathcal{M}(1^3P_0) = M_{1,1}^{(0)} + \frac{1}{4}W_{1,1}^{ss} - 2W_{11}^{LS} - 4W_{11}^T \quad (5.15)$$

$$\mathcal{M}(1^3P_1) = M_{1,1}^{(0)} + \frac{1}{4}W_{1,1}^{ss} - W_{11}^{LS} + 2W_{11}^T \quad (5.16)$$

$$\mathcal{M}(1^3P_2) = M_{1,1}^{(0)} + \frac{1}{4}W_{1,1}^{ss} + W_{11}^{LS} - \frac{2}{5}W_{11}^T \quad (5.17)$$

Utilizando las masas experimentales (ver tabla 5.1) para resolver el sistema de ecuaciones se obtienen los siguientes valores para los coeficientes correspondientes a las interacciones espín-espín, espín-orbita y tensorial:

$$M_{1,1}^{(0)} = 3525,57MeV \quad (5.18)$$

$$W_{1,1}^{ss} = -0,8511MeV \quad (5.19)$$

$$W_{11}^{LS} = 34,93MeV \quad (5.20)$$

$$W_{11}^T = 10,08MeV \quad (5.21)$$

Realizando el mismo procedimiento para $n = 2; l = 2$ se obtiene

$$M_{2,0}^{(0)} = 3674MeV \quad (5.22)$$

$$W_{2,0}^{ss} = 48MeV \quad (5.23)$$

Utilizando los valores encontrados para $l = 0$ es posible hacer una extrapolación lineal y hallar el valor de $M_{3,0}$. Los resultados de las masas sin interacciones dependientes del espín, $M_{n,l}^{(0)}$ (masas “desnudas”), se muestran en la tabla 5.2

Charmonium	
Estado	$M_{n,l}^{(0)}(MeV)$
1S	3067.78
2S	3674.07
3S	4037.22
1P	3525.5

Tabla 5.2: Masas desnudas obtenidas de los datos experimentales

Debido a la falta de datos experimentales no es posible obtener las masas sin IDE de otros estados excitados correspondientes a $l = 1, 2$

5.2. Fit de parámetros con potencial de confinamiento de la forma σr^k

Con el fin de obtener mejores resultados en la reproducción de los valores de las masas de los estados del Charmonium de la tabla 5.2 se optará por la utilización de un potencial de confinamiento no lineal dado por $(\frac{r}{d})^k$. Es necesario aclarar que d es un parámetro “dummy” de valor $1 fm$ que se coloca para dar sentido dimensional al potencial de confinamiento; de esta forma σ tiene unidades de energía.

Utilizando la base generalizada con este potencial de confinamiento, se mantiene su carácter ortonormal al modificar su comportamiento asintótico acorde al potencial, proporcionando mejores resultados numéricos que la base convencional de OA.

El Hamiltoniano utilizado para realizar el fit sobre los parámetros del potencial es:

$$H = \frac{p^2}{m} - \frac{4\alpha}{3r} + \sigma \left(\frac{r}{d}\right)^k \quad (5.24)$$

Donde se ha tenido en cuenta que la masa reducida es $\mu = \frac{m}{2}$

El ajuste del espectro se llevará a cabo diagonalizando la matriz Hamiltoniana construida con la base generalizada, barriendo el parámetro variacional \bar{r} para encontrar el mínimo valor de energía y modificando los parámetros libres del potencial m, σ, α, k hasta encontrar los que mejor se ajusten a los datos experimentales.

Los parámetros del Hamiltoniano que mejor reproducen los valores de las masas desnudas (ver tabla 5.2) se muestran en la tabla 5.3 y los valores de masas obtenidas con estos parámetros se exponen en la tabla 5.4

Fit de parámetros			
α	$\sigma(MeV)$	$m(MeV)$	k
0.28	1145	1178	0.74

Tabla 5.3: Parámetros obtenidos al realizar el fit, utilizando los valores de las masas sin interacción espín-orbita ni hiperfinas

Los datos de la tabla 5.4 muestran una buena concordancia entre los resultados numéricos obtenidos utilizando la base generaliza y los obtenidos directamente de los datos experimentales, excepto en el estado $3S$. Esto puede ser explicado como resultado del efecto relativista, el cual, se hace más

Charmonium		
Estado	$M_{n,l}^{BG}(MeV)$	$M_{n,l}^{(0)}(MeV)$
1S	3068	3067.78
2S	3671.5	3674.07
3S	4121.6	4037.22
1P	3483.2	3525.5
1D	3779.3	—

Tabla 5.4: Masas, sin interacciones espín-orbita ni hiperfinas, obtenidas numéricamente. Donde el potencial de confinamiento es $V_{conf} = 1145MeV(r/d)^{0.74}$. En la tercera columna se reproducen las masas de la tabla 5.2

evidente en los estados más excitados. Aun así, la diferencia no es muy significativa y es bueno tener presente que este dato fue obtenido por extrapolación lineal debido a la ausencia de datos experimentales para el estado de singlete del tercer estado excitado.

Con el fin de comparar con los datos numéricos obtenidos previamente (tabla 5.4), serán hallados numéricamente los valores de las masas de los estados del Charmonium haciendo nuevamente un fit sobre los parámetros del potencial, pero utilizando la base de OA como base de prueba.

Los valores de los parámetros del potencial hallados, utilizando la base de OA, se muestran en la siguiente tabla 5.5 y las masas obtenidas para los estados del Charmonium se muestran en la tabla 5.6, y se contrastan con los obtenidos con la base generalizada.

Fit de parámetros			
α	$\sigma(MeV)$	$m(MeV)$	k
0.28	950	1240	0.79

Tabla 5.5: Parámetros obtenidos al realizar el fit, utilizando la base de OA

En la tabla 5.6 pueden ser comparados los valores obtenidos por las bases OA y BG. Se observa que los valores numéricos obtenidos por la base de OA son menos próximos a las masas “desnudas” extrapoladas de los datos experimentales consignados en la tercera columna de la tabla 5.6 en comparación con los obtenidos con la BG. En particular se observa como los estados excitados para $l = 0$, usando la base de OA, no son aceptables.

Charmonium			
Estado	$M_{n,l}^{BG}(MeV)$	$M_{n,l}^{OA}(MeV)$	$M_{n,l}^{(0)}(MeV)$
1S	3068	3073.9	3067.78
2S	3671.5	3716.5	3674.07
3S	4121.6	4614	4037.22
1P	3483.2	3428.8	3525.5
1D	3779.3	3696.3	—

Tabla 5.6: Masas, sin interacciones espín-orbita ni hiperfinas, obtenidas numéricamente. En las segunda y tercera columna se muestran las masas del Charmonium utilizando la base generalizada y base de OA. En la cuarta columna se reproducen las masas de la tabla 5.2

Los resultados anteriores siguen argumentando la superioridad de la BG frente a la base de OA en el cálculo de las masas de los estados del Charmonium debido a su carácter asintótico flexible.

5.3. Comparación de resultados

Con el fin de verificar que tan buenos son los resultados obtenidos con la base generalizada con respecto a las de OA y los de [2], se utilizará el χ^2 definido de la siguiente forma:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n (E_i^{exp} - E_i^{teo})^2 \omega \quad (5.25)$$

Donde tomamos, por razones de sencillez, $\omega = 1MeV^{-1}$, es decir un peso igual para cada estado. Es necesario aclarar que serán tomados como datos experimentales aquellos que se hallaron al restarle las interacciones dependientes del espín (tabla 5.2), es decir, las masas “desnudas”. Utilizando la ecuación (5.25) se hallaron los siguientes valores de χ^2 para los datos de la referencia [2] y los datos hallados numéricamente y relacionados en las tablas 5.4 5.6.

Donde χ_{ref}^2 fue hallado para los datos de la referencia [2], χ_{BG}^2 fueron hallados utilizando la BG, χ_{OA}^2 y con la base de OA.

Recuérdese que el potencial utilizado en la referencia es (2.6).

Al comparar los valores de la tabla 5.7 se observa que el mejor resultado se

valores del χ^2	
χ_{ref}^2	160809
χ_{BG}^2	8918
χ_{OA}^2	343877

Tabla 5.7: Valores obtenidos para el χ^2 para los datos hallados numéricamente

logra cuando se utiliza la base generalizada, evidenciando su utilidad en el cálculo numérico de energías de estados ligados.

5.4. Discusión de resultados

En el presente capítulo se han obtenido los valores de las masas desnudas de cuatro estados del Charmonium. Los resultados que más se acercan a los valores experimentales se obtuvieron cuando se utilizó la BG para construir la matriz Hamiltoniana con un potencial de confinamiento diferente al lineal. Esto fue sustentado con el cálculo del χ^2 pues, bajo estas condiciones, fue obtenido un valor menor en comparación con la referencia [2] y con el uso de la base de OA.

A nivel físico, de los resultados encontrados es posible inferir que la versión simplificada del potencial lineal de confinamiento no es la más efectiva en la reproducción del espectro del Charmonium. Por tanto, un potencial de confinamiento del tipo r^k se constituye en una mejor opción para la descripción del Charmonium.

Es importante destacar que estos resultados fueron obtenidos debido a que el comportamiento asintótico de la función de onda se adecúa a la forma del potencial de confinamiento. Esto indica que la adaptación del comportamiento asintótico la función de onda se constituye en un factor relevante en el cálculo numérico de las energías del sistema ligado.

Por otro lado los resultados obtenidos utilizando como base de prueba las funciones de OA, muestran que no es la más apropiada para construir el espectro del Charmonium. Esto se evidencia en los valores encontrados para los estados excitados los cuales son inaceptables en la descripción del espectro del sistema ligado.

En base a estos resultados es posible afirmar que el uso de la base generalizada permite resolver con mejor aproximación la ecuación de Schrödinger.

Capítulo 6

Espectro del Charmonium utilizando la energía cinética relativista

La corrección relativista, a primer orden en la teoría de perturbaciones, asociada a la energía cinética se considera parte importante de la estructura fina de sistemas ligados quark-antiquark, en especial para las correcciones a la energía relacionadas con los estados excitados.

La base elegida para construir la matriz Hamiltoniana es clave para realizar un buen cálculo numérico de estas correcciones y para optimizar el resultado. Recordemos que, en esta base, el comportamiento asintótico de las funciones de onda debería ser determinado por el potencial de confinamiento. Adicionalmente y para mayor precisión sería conveniente que dicha base permitiera trabajar en el espacio del momentum para realizar los cálculos con la expresión completa de la energía cinética relativista. Ambas cosas se logran con la base generalizada, sin embargo, con el fin de establecer la importancia de las correcciones y de comparar con los cálculos realizados con la energía cinética completa es conveniente realizar los cálculos del efecto relativista desde las dos perspectivas: 1) realizando la expansión en series y considerando el segundo término en forma perturbativa; 2) utilizando la expresión completa de la energía cinética.

En base a lo anterior, en este capítulo (ver sección 6.1) se calcularán las correcciones relativistas debido al segundo término en la expansión en serie de potencias de la energía cinética $-\frac{p^4}{4m^3}$ utilizando los parámetros de la referencia [2] y los obtenidos en la sección 5.1 (tabla 5.3). Posteriormente, en

la sección 6.2, se realizará el cálculo de las masas del Charmonium con la energía cinética relativista $2\sqrt{p^2 + m^2}$ utilizando los parámetros de la referencia [2] y adicionalmente los parámetros utilizados en la reproducción de las masas “desnudas” extrapoladas de los datos experimentales (Tabla 5.3). Se discutirán los resultados hallados comparando los valores obtenidos de las masas mas correcciones con los valores de masa obtenidos utilizando el término completo de la energía cinética.

Finalmente, en la sección 6.3, se realizará un nuevo fit sobre los parámetros libres utilizando la expresión completa de la energía cinética.

6.1. Corrección a primer orden de la energía cinética

Discutimos ahora el cálculo perturbativo de la corrección relativista a la energía cinética.

En el centro de masa del sistema se tiene que $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2 = \vec{p}$. por lo tanto la expansión de la energía cinética en potencias de p tiene la forma:

$$E_c = 2\sqrt{p^2 + m^2} - 2m \approx \frac{p^2}{m} - \frac{p^4}{4m^3} + \dots \quad (6.1)$$

Donde el último término representa el operador de corrección relativista.

En la base generalizada de los estados $|l; k\rangle$ (donde omitimos el número cuántico m_k) los elementos de matriz del operador corrección relativista se escriben como:

$$E_{l;k',k}^{CR} = -\frac{1}{4m^3} \langle l; k' | \hat{p}^4 | l; k \rangle \quad (6.2)$$

Recordemos que el procedimiento numérico de diagonalización del Hamiltoniano $H^{(0)}$ arroja, como resultado aproximado para los estados $|l; n\rangle_D$ (asociados a los autovalores $E_{k,l}^{(0)}$) una expresión de la forma:

$$|l; n\rangle_D = \sum_k a_k^n |l; k\rangle \quad (6.3)$$

donde los a_k^n representan las amplitudes dadas por el procedimiento de diagonalización; la suma se realiza sobre los diez estados de la base.

Utilizando la teoría de perturbaciones al primer orden, la corrección relativista de la energía cinética se escribe como:

$$E_{l,n}^{CR} = -\frac{1}{4m^3} \langle l; n | p^4 | l; n \rangle_D \quad (6.4)$$

$$= -\frac{1}{4m^3} \sum_{k'k} a_{k'}^{n*} a_k^n \langle l; k' | p^4 | l; k \rangle \quad (6.5)$$

Utilizando los parámetros de la tabla 4.3 se calculará $E_{n,l}^{CR}$. Los resultados se muestran en la tabla 6.1 donde a su vez se comparan con los autovalores $E_{n,l}^{(0)}$ del Hamiltoniano $H^{(0)}$. También allí se consigna la masa total del Charmonium $M_{n,l}$ definida por la expresión Ec(4.26).

Al comparar estas cantidades se podrá determinar si las correcciones a primer orden pueden ser consideradas como correcciones perturbativas. Adicionalmente se exponen los valores de las masas más la corrección respectiva $M'_{n,l} = M_{n,l} + E_{n,l}^{CR}$

Correcciones relativistas a primer orden Charmonium					
Estado	$E_{n,l}^{CR}(MeV)$	$E_{n,l}^{(0)}(MeV)$	$M_{n,l}(MeV)$	$M'_{n,l}(MeV)$	$M_{n,l}^{(0)}(MeV)$
1s	-65.9	648.9	3086	3020	3067.78
2s	-141.6	1392.5	3829	3687.9	3674.7
3s	-278.2	1990.8	4427	4149.6	4037.2
4s	-765.8	2666.4	5110	4337.6	—
1p	-34.8	1136.2	3573	3538.3	3525.5
2p	-92.5	1742.7	4179	4087.2	—
3p	-181.6	2266.5	4697	4521.9	—
4p	-413.6	2803.1	5163	4826.5	—
1d	-17.9	1507.7	3944	3926.8	—
2d	-62.3	2047.5	4484	4422.3	—
3d	-137.2	2532.8	4965	4832.6	—
4d	-324.2	3033.2	5405	5146	—

Tabla 6.1: Correcciones relativistas a primer orden calculadas utilizando $m = 1218,5MeV$, $\alpha = 0,29$, $\sigma = 1306MeV$, donde el potencial es $V = -\frac{4\alpha}{3r} + \sigma(\frac{r}{d})$

Se repite el cálculo de las correcciones relativistas en el caso del potencial $V = -\frac{4\alpha}{3r} + \sigma(\frac{r}{d})^k$ con $k = 0,74$ utilizando los parámetros hallados en el capítulo anterior, los cuales están consignados en la tabla 5.3. Los resultados se muestran en la tabla 6.2.

Correcciones relativistas a primer orden Charmonium					
Estado	$E_{n,l}^{CR}(MeV)$	$E_{n,l}^{(0)}(MeV)$	$M_{n,l}(MeV)$	$M'_{n,l}(MeV)$	$M_{n,l}^{(0)}(MeV)$
1s	-54.3	712	3068	3013.7	3067.78
2s	-95.4	1315.46	3671.5	3576.1	3674.7
3s	-178.9	1765.60	4121.6	3942.7	4037.2
4s	-532	2285.89	4641.9	4109.8	—
1p	-23.6	1127.19	3483.2	3459.5	3525.5
2p	-55.1	1586.85	3942.8	3887.7	—
3p	-113.8	1971.15	4327.1	4213.3	—
4p	-306.9	2402.51	4758.5	4451.6	—
1d	-10.6	1423.26	3779.3	3768.6	—
2d	-33.8	1814.99	4170.9	4137.2	—
3d	-78.7	2159.84	4515.8	4437.1	—
4d	-218.1	2546	4902	4683.9	—

Tabla 6.2: Correcciones relativistas a primer orden, datos obtenidos en capítulo anterior $m = 1178MeV$, $\alpha = 0,28$, $\sigma = 1145MeV$, donde $M'_{n,l} = M_{n,l} + E_{n,l}^{RC}$

6.1.1. Discusión de resultados

En la sección anterior se han calculado los efectos relativistas de la energía cinética del Hamiltoniano $H^{(0)}$ perteneciente al Charmonium utilizando la teoría de perturbaciones a primer orden. En particular, se calculó el resultado de éstas correcciones utilizando los parámetros de la referencia [2], donde el Hamiltoniano utiliza el potencial de Cornell y la expresión **no** relativista de la energía cinética. En la tabla 6.1 se observan las correcciones en cuestión cuyos valores comparados con $E_{n,l}$ muestran la posibilidad de tratar el sistema de forma no relativista hasta el primer estado excitado. Sin embargo, la corrección relativista se vuelve apreciable para los estados excitados más altos. Por esta razón los datos indican que no es posible despreciar esta corrección relativista de la “estructura fina” del $c\bar{c}$.

Por otro lado, las correcciones que surgen utilizando el Hamiltoniano (5.24) con $k = 0,74$ se muestran en la tabla 6.2 son más pequeños que los correspondientes de la tabla 6.1. Pero, también en este caso, es necesario tener en cuenta estas correcciones para determinar el espectro de masa del $c\bar{c}$.

6.2. Cálculo con expresión exacta de la energía cinética relativista

Con el fin de estudiar un modelo relativista se utiliza en el Hamiltoniano el término de la energía cinética relativista completa. Por lo tanto, el Hamiltoniano $H^{(0)}$ que se utiliza en esta sección es:

$$H^{(0)} = 2\sqrt{p^2 + m^2} - \frac{4\alpha}{3r} + \sigma\left(\frac{r}{d}\right)^k \quad (6.6)$$

Recuérdese que d es un parámetro *dummy* de valor $1fm$

Como en la sección anterior utilizaremos los parámetros de la referencia [2] y se calcularán las masas a partir de este Hamiltoniano diagonalizando y minimizando al variar el parámetro \bar{r} . Los resultados se muestran en la tabla 6.3 y se comparan con las masas $M'_{n,l}$ obtenidas por medio de la corrección relativista.

Masa del Charmonium				
Estado	$M_{n,l}^R(MeV)$	$M'_{n,l}(MeV)$	$M_{n,l}(MeV)$	$M_{n,l}^{(0)}(MeV)$
1s	3031.4	3020	3085.9	3067.78
2s	3724.2	3687.9	3829.5	3674.7
3s	4338.6	4149.6	4427.9	4037.2
4s	5040.2	4337.6	5103.4	—
1p	3512	3538	3573.2	3525.5
2p	4052.4	4087.2	4179.7	—
3p	4503.7	4521.9	4703.5	—
4p	4902.2	4826.5	5240.1	—
1d	3865.4	3926	3944.7	—
2d	4336.3	4422.3	4484.5	—
3d	4747.3	4832.6	4969.8	—
4d	5117.4	5146	5470.2	—

Tabla 6.3: M_R es la masa $c\bar{c}$ utilizando la energía cinética relativista y $M'_{n,l} = M_{n,l} + E_{n,l}^{RC}$
 $m = 1218,5MeV, \alpha = 0,29, \sigma = 1306MeV$

Utilizando el potencial de Cornell (con $k = 1$) los resultados de los autovalores de masa no concuerdan bien con las masas “desnudas” calculadas a partir de los datos experimentales. En cambio, utilizando $k = 0,74$ los resultados mejoran. Se presentan entonces los resultados obtenidos utilizando

el Hamiltoniano (6.6) con el fin de reproducir el espectro del Charmonium . Los resultados se muestran en la tabla 6.4.

Masa del Charmonium				
Estado	$M_{n,l}^R(MeV)$	$M'_{n,l}$	$M_{n,l}(MeV)$	$M_{n,l}^{(0)}(MeV)$
1s	3021.9	3013.7	3068	3067.78
2s	3599.4	3576.1	3671.5	3674.7
3s	4092.2	3942.7	4121.6	4037.2
4s	4677.6	4109.8	4641.9	—
1p	3439.82	3459.54	3483.19	3525.5
2p	3861.9	3887.7	3942.8	—
3p	4199	4213.3	4327.1	—
4p	4487	4451.6	4758.5	—
1d	3728.2	3768.6	3779.3	—
2d	4100.12	4084.41	4170.99	—
3d	4382.2	4437.1	4515.8	—
4d	4645.2	4683.9	4902	—

Tabla 6.4: M_R es la masa $c\bar{c}$ utilizando la energía cinética relativista y $M'_{n,l} = M_{n,l} + E_{n,l}^{RC}$
 $m = 1178MeV, \alpha = 0,28, \sigma = 1145MeV$

6.2.1. Discusión de resultados

Como es bien conocido, los efectos relativistas son más evidentes para estados excitados, de tal manera que al utilizar la energía cinética relativista los estados excitados calculados numéricamente deberían estar más próximos a las masas extrapoladas de los datos experimentales (tabla 5.2). El anterior efecto se observa en la segunda columna de la tabla 6.3. Estos resultados indican una reducción de todos los valores de masa acercándose a los valores obtenidos en la tabla 5.2 en especial en el estado base, a diferencia de los estados excitados donde la diferencia sigue siendo marcada. Cuando se compara las tres últimas columnas de la tabla 6.3 podría inferirse que los datos obtenidos con la corrección a primer orden en la teoría de perturbaciones son más apropiados que los obtenidos con la energía cinética completa, sin embargo, debe tenerse en cuenta que las correcciones obtenidas para los altos estados excitados no pueden ser consideradas en verdad como correcciones como se explicó en la sección 6.1.1.

De igual forma se ha utilizado el Hamiltoniano con potencial de confinamiento con $k = 0,74$ y se han obtenido los resultados de la tabla 6.4. También se observa una reducción de los valores de masa del Charmonium en sus diferentes estados en proporción semejante al utilizar el potencial de Cornell. Estos resultados sugieren la realización de un nuevo fit sobre los parámetros fenomenológicos α , σ , m y k que lleven a una mejor reproducción del espectro experimental.

6.3. Fit de parámetros con la energía cinética relativista

Para cerrar este capítulo se mostrarán los resultados de las masas del Charmonium al haber realizado el fit empleando el Hamiltoniano de la ecuación (6.6), de tal manera que se reproduzcan de la mejor forma posible, los datos de la tabla 5.2. Los resultados se exponen en la primera columna de la tabla 6.5 y se comparan con las masas halladas con el Hamiltoniano no relativista (ver tabla 5.4) en la segunda columna y con las masas “desnudas” extraídas de los datos experimentales.

Charmonium			
Estado	$M_{n,l}^R(MeV)$	$M_{n,l}(MeV)$	$M_{n,l}^{(0)}(MeV)$
1S	3075.7	3068	3067.8
2S	3649	3671.5	3674.7
3S	4077.3	4121.6	4037.2
4S	4535.7	4643	—
1P	3496.9	3483.2	3525.5
2P	3921.4	3942.8	—
3P	4263.2	4327.1	—
1D	3786.8	3779.3	—
2D	4142.9	4171	—
3D	4444.3	4515.8	—

Tabla 6.5: Masas $c\bar{c}$ utilizando la energía cinética relativista con nuevos parámetros $m = 1205MeV, \alpha = 0,28, \sigma = 1160MeV, k = 0,74$

6.3.1. Cálculo de χ^2

Con los resultados obtenidos para la masas del Charmonium utilizando la energía cinética relativista completa, se calcula el valor del χ^2 , con el cual se obtiene una medida para comparar entre ellos los resultados obtenidos por diferentes modelos. En la última fila de la tabla 6.6 se consigna el valor de χ^2 obtenido con la expresión completa de la energía cinética relativista. Es

valores del χ^2	
χ_{ref}^2	160809
χ_{BG}^2	8922
χ_{QA}^2	343877
χ_{BGR}^2	3143

Tabla 6.6: Valores obtenidos para el χ^2 para los datos hallados numéricamente. En la última fila se halla el hallado con la energía cinética relativista

evidente que esta cantidad disminuye significativamente con respecto a los calculados en el capítulo 5. Esto muestra que los parámetros hallados en el fit utilizando la energía cinética relativista se ajustan de mejor forma a los valores de masas “desnudas” extrapoladas de los datos experimentales.

6.3.2. Discusión de resultados

En la presente sección se realizó el fit sobre los parámetros del potencial utilizando la energía cinética relativista en el Hamiltoniano. Al comparar las columnas de la tabla 6.5 se nota la mejor concordancia entre los resultados numéricos de los estados excitados utilizando la energía cinética relativista (véase figura 6.1), aunque el primer estado excitado se aleje un poco del valor de masa “desnuda”. A pesar de ello, el resultado del χ^2 obtenido al utilizar la energía cinética relativista completa fue el de menor valor en comparación con los hallados en el capítulo anterior.

Esto nos permite afirmar que es necesario para mayor precisión en la reproducción del espectro de energía, en particular de los estados excitados, utilizar en el Hamiltoniano la energía cinética relativista.

En otras palabras verificamos que los efectos relativistas no son despreciables tampoco para un sistema compuesto por quarks pesados como el Charmonium.

Vale la pena resaltar que los resultados obtenidos surgen como combinación

6.3. FIT DE PARÁMETROS CON LA ENERGÍA CINÉTICA RELATIVISTA 61

de varios factores: el uso de la energía cinética relativista completa, el potencial no lineal de confinamiento. A nivel numérico ha sido de gran importancia la utilización de las transformadas de Fourier de las funciones de onda de la base generalizada.

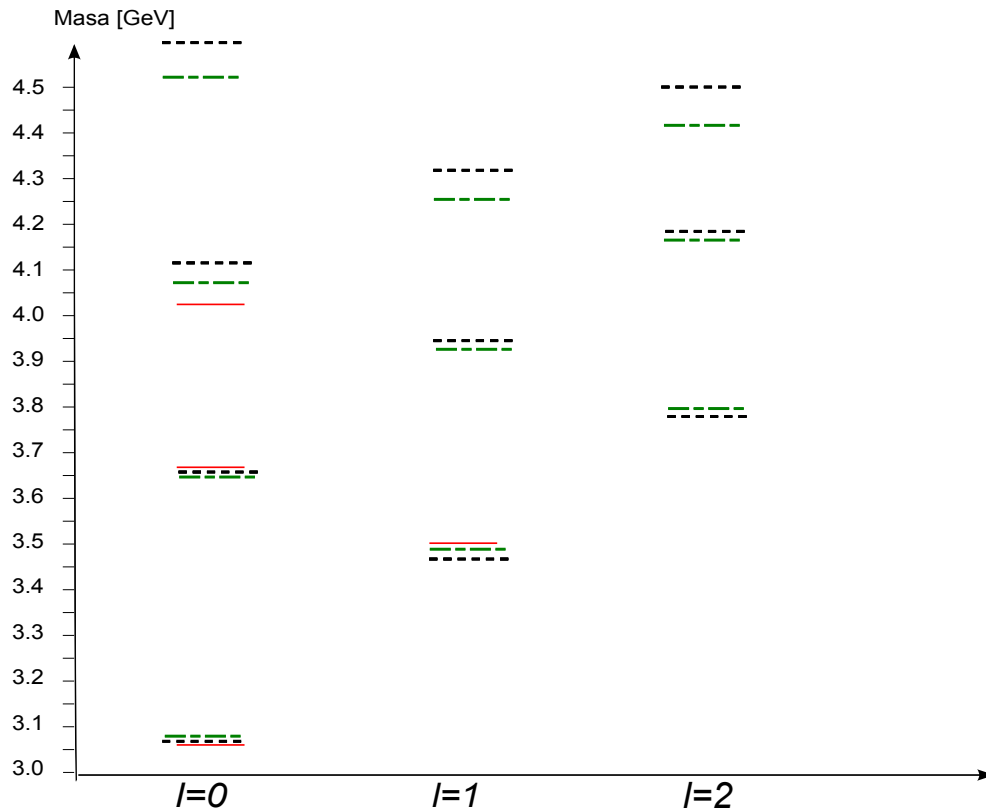


Figura 6.1: Espectro del Charmonium. Las barras rojas son las masas “desnudas” extrapoladas de los valores experimentales. Las líneas negras punteadas corresponden a los valores de masa hallados con la energía cinética no relativista y las verdes a las halladas con la energía cinética completa. Para los estados 3S y 1P se observan valores más cercanos a las masas desnudas utilizando la E_k relativista. Se observa también que los valores numéricos con E_k totalmente relativista son menores que los obtenidos con la E_k no relativista, en particular de los estados excitados.

Capítulo 7

Conclusiones y recomendaciones

7.1. Conclusiones

1. Partiendo de la base generalizada propuesta en [1] se encontró una expresión analítica para su transformada de Fourier, cuya forma permite ser aplicada en el cálculo numérico de los elementos de matriz del operador Hamiltoniano. Adicionalmente se estableció una relación analítica entre el comportamiento asintótico de la función de onda de la base generalizada y el potencial de interacción de un sistema ligado.
2. Para comprobar la utilidad de la base generalizada se reprodujo el espectro del átomo de hidrógeno y de las masas de los estados del Charmonium sin interacciones dependientes del espín con el Hamiltoniano dado en la referencia [2]. Se verificó que los resultados obtenidos por medio de la base generalizada son mejores que los generados por la base de OA estándar, debido a la flexibilidad en el comportamiento asintótico de la misma.
3. Utilizando la base generalizada se logró una mejor reproducción del espectro del Charmonium utilizando un potencial de confinamiento de la forma r^k en lugar del lineal. En particular se encontró un valor de $k = 0,74$ tanto en el caso relativista como no relativista.
4. A pesar que el Charmonium es considerado como un sistema compuesto por quarks pesados las correcciones relativistas realizadas sobre cada

uno de los estados muestran que no son despreciables en especial las pertenecientes a los estados excitados. Sin embargo, estas correcciones se hacen más pequeñas cuando el potencial de confinamiento tiene exponente $k = 0,74$ en comparación con el confinamiento lineal. Adicionalmente, los cálculos numéricos arrojaron valores más pequeños para las correcciones con mayor momento angular orbital, comportándose como otros sistemas ligados con descripción analítica (átomo de hidrógeno y positronium).

5. Se obtuvo una mejor solución de la ecuación de onda debido a que el comportamiento asintótico de la base generalizada se adapta al potencial de confinamiento. Adicionalmente su carácter ortonormal es conservado a pesar de la modificación de su comportamiento asintótico.
6. Al calcular los elementos de matriz del operador Hamiltoniano utilizando la energía cinética relativista se obtuvieron mejores resultados en comparación con los obtenidos con la energía cinética no relativista, en especial para los estados excitados. Si se toma el sistema como totalmente no relativista, se atribuirán los efectos relativistas a las demás interacciones, finas o hiperfinas, generando una descripción del espectro de energías menos precisa. Por tanto se concluye que si se desea construir el espectro del Charmonium con una aceptable descripción de los estados excitados, es necesario utilizar la energía cinética relativista.
7. Aunque lo recomendable es usar la energía cinética relativista completo el tiempo de cálculo utilizado, al implementar la rutina construida en fortran para la transformada de Fourier es muy grande. En consecuencia, con las máquinas que tenemos a disposición para el cálculo numérico realizar el fit de los parámetros del modelo de potencial es extremadamente difícil y demorado.

7.2. Recomendaciones

Como ya se mencionó un inconveniente importante en la implementación de la energía cinética relativista radica en la necesidad de realizar la transformada de Fourier de la función de onda propuesta, la cual generalmente no tiene una expresión analítica. Por lo tanto es necesario diseñar e implementar programas numéricos para realizar dicha transformada, los cuales requieren

de computadores con procesadores de alto rendimiento para encontrar el mínimo variacional de las energías del Hamiltoniano y aún más para realizar el proceso de fit de los parámetros del modelo de potencial.

Desafortunadamente durante el trabajo no se contaron con esos medios¹. En caso de tenerlos, se sugiere realizar los cálculos de los autovalores, implementando el programa desarrollado y que se muestra en el apéndice B.2. Así se podrá aproximar con mejor precisión el segundo estado excitado y en general obtener una mejor solución para el Hamiltoniano escogido.

Por otro lado, como es de esperar, el trabajo realizado puede ser continuado al adicionar las interacciones spin orbita e hiperfinas con lo cual se puede esperar una descripción más que aceptable del espectro del Charmonium.

¹Aunque vale la pena resaltar que se conto con el cluster del departamento de física, sin embargo, no es lo suficientemente rápido para el trabajo planteado

Apéndice A

Laplaciano de la base generalizada

Se encontró la ecuación (4.15) para la base generalizada. Su Laplaciano, en términos de la variable adimensional $s = \frac{r}{\bar{r}}$ se puede expresar de la siguiente forma analítica:

$$\nabla_s^2 R_{n,l} = \frac{d^2 R_{n,l}}{ds^2} + \frac{2}{s} \frac{dR_{n,l}}{ds} \quad (\text{A.1})$$

Puesto que $R_{n,l}$ depende de los polinomios de Laguerre es necesario encontrar su derivada y segunda derivada. Con este fin utilicemos el siguiente resultado [13]:

$$\frac{dL_n^\alpha(x)}{dx} = -L_{n-1}^{\alpha+1}(x) \quad (\text{A.2})$$

En nuestro caso el polinomio de Laguerre depende de la función $F(s)$ por tanto:

$$\frac{dL_n^\alpha(F(s))}{ds} = -L_{n-1}^{\alpha+1}(F(s)) \frac{dF(s)}{ds} \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{d^2 L_n^\alpha(F(s))}{ds^2} = -L_{n-1}^{\alpha+1}(F(s)) \frac{d^2 F(s)}{ds^2} + L_{n-2}^{\alpha+2}(F(s)) \left(\frac{dF(s)}{ds} \right)^2 \quad (\text{A.4})$$

La primera derivada de la función de onda radial es:

$$\frac{R_{n,l}}{ds} = \frac{1}{\bar{r}^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{n!}{\Gamma(\beta + n + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} f^{\frac{1}{2}} \left\{ -\frac{1}{2} f s^{\frac{3f+f\alpha-5}{2}} L_n^\alpha(s^f) \exp\left(-\frac{1}{2} s^f\right) + s^{\frac{f+f\alpha-3}{2}} \frac{dL_n^\alpha(s^f)}{ds} \exp\left(-\frac{1}{2} s^f\right) + \frac{f+f\alpha-3}{2} s^{\frac{f+f\alpha-5}{2}} L_n^\alpha(s^f) \exp\left(-\frac{1}{2} s^f\right) \right\} \quad (\text{A.5})$$

Realizando la segunda derivada y utilizando los resultados (A.3) y (A.4) y reemplazando en la ecuación (A.1) se obtiene el resultado

$$\begin{aligned}
\nabla_s^2 R_{n',l}(s) = & \left(\frac{n'}{\Gamma(\beta + n' + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} f^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}s^f\right) s^{\frac{f+f\alpha-3}{2}} \{ L_{n'}^\alpha(s^f) \left[\frac{1}{4} f^2 s^{2f-2} \right. \\
& - \frac{1}{2} f \left(\frac{3f + f\alpha - 5}{2} \right) s^{f-2} - \frac{1}{2} f \left(\frac{f + f\alpha - 3}{2} \right) s^{f-2} + \\
& \left. \left(\frac{f + f\alpha - 3}{2} \right) \left(\frac{f + f\alpha - 5}{2} \right) s^{-2} - f s^{f-2} + (f + f\alpha - 3) s^{-2} \right] - f s^{f-1} L_{n'-1}^{\alpha+1}(s^f) \left[-f s^{f-1} \right. \\
& \left. + (f + f\alpha - 3) s^{-1} + (f - 1) s^{-1} + 2s^{-1} \right] + L_{n'-2}^{\alpha+2}(s^f) \left[f^2 s^{2f-2} \right] \} \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

Apéndice B

Programas en fortran

B.1. Programa en fortran para hallar los elementos de matriz Hamiltoniano

```
Program matriz
implicit real*8(a-h,o-y)

double precision d1,Lag1,y1,d2,Lag2,y2,x1,prueba,elematriz,limsup
+,parti,c2,
+Lagd2,Lagd22,cinetica,pot,Laguerre2,potencial,rbar,mat,ce,cen,cent
+,rbar1,rbar2,men
INTEGER INFO, LDA, LWORK, N,fu,ar,nu,lu,jo,nn,jj,ii,kk,ll,mm
dimension mat(100,100)
character*1 jobz,uplo

*****
dimension vec1(30)
dimension vec(30)
dimension a(10,10) ! matriz diagonaliz.
dimension aw(10)
dimension awork(4000)

jobz='V'
uplo='U'
```

```

lda=10
lwork=4000
*****
10  read*, fu,v,d1,limsup,parti,rbar1,rbar2
    ar=fu
    h=v
    d2=d1
    c2=d1
    jo=1
    do 500 jo=1,10
    rbar=rbar2+((rbar1-rbar2)/10)*(jo)
    nu=0
    lu=0
    do 20 l=0,fu
    do 30 n=0,ar

    i=1
    b=0
    ce=0
    d=0
    do while(i.lt.parti)
    i=i+1
    x=(limsup/parti)*i
    call radial1(1,v,d1,Lag1,x,e,c2)
    call part1de2(n,h,d2,Lag2,x,c2)
    call part2de2(n,h,d2,Lagd2,x,c2)
    call part3de2(n,h,d2,Lagd22,x,c2)
    call radial2(n,h,d2,Laguerre2,x,c2)
    prueba=Lag1*((Lag2-Lagd2+Lagd22)*(2.718281828**(-0.5*x**c2))*(sqrt
+(c2)*x**((c2+c2*e-3)/2)))*(x**2)*(limsup/parti)
    b=b+prueba
    cen=Lag1*Laguerre2*(limsup/parti)
    ce=ce+cen
    pot=Lag1*Laguerre2*x*(limsup/parti)
    d=d+pot
    end do
    cinetica=(-38098.00590/(rbar**2))*b*orto1(1,d1,v,parti,limsup)*or

```

```

+to2(n,d2,h,parti,limsup)
  cent=(38098.00590/(rbar**2))*ce*orto1(1,d1,v,parti,limsup)*
+orto2(n,d2,h,parti,limsup)*(v*(v+1))
  potencial=(-1.440961287/rbar)*d*orto1(1,d1,v,parti,limsup)*orto2(
+n,d2,h,parti,limsup)
  elematriz=(cinetica+potencial+cent)*10**6
  nu=n+1
  lu=l+1
  a(nu,lu)=elematriz
C   print*,a(nu,lu),1,n 30   continue 20   continue
*****
*   call dsyev(jobz,uplo,n,a,lda,aw,awork,lwork,info)
    call DSYEV( JOBZ, UPLO, N, A, LDA, AW, AWORK, LWORK, INFO )
  write(*,*)
  write(*,*)'valores propios',rbar,jo
  do 150 j=1,ar+1
    write(*,*)aw(j)
*****
*****
    nn=1
    do 100 jj=1,ar+1
      if(aw(nn).le.aw(jj))then
        aw(nn)=aw(nn)
      else
        aw(nn)=aw(jj)
      end if
100  continue

*****
*****
150  continue
    print*, 'menor',aw(nn)
    vec(jo)=aw(nn)
500  continue
*****
*****
    write(*,*)' menores'
    do 550 mm=1,10          !Escribo los menores

```

```

write(*,*)vec(mm)
550  continue
      kk=1
      do 160 ll=1,10
        if(vec(kk).le.vec(ll))then
          kk=kk
        else
          kk=ll
        end if
      do
160  continue
      write(*,*)'menor de menores',vec(kk),kk

      goto 10
      end

```

C*****

C*****

C En esta subrutina se calcula el primer polinomio de Laguerre

```

subroutine radial1(l,v,d1,Lag1,x,e,c2)

```

```

implicit real*8(a-h,o-y)

```

```

double precision d1,Lag1,y1,c2

```

```

m=-1

```

```

Lag1=0

```

```

do while(m.lt.1)

```

```

m=m+1

```

```

e=(2*v+3)/d1-1

```

```

c=1+e

```

```

k=0

```

```

g=1

```

```

do while(k.lt.m)

```

```

k=k+1

```

```

g=g*k

```

```

end do

```

```

i=0

```

```

    b=1
    do while (i.lt.l-m)
    i=i+1
    b=b*i
    end do
    u=c+1
    d=1
    do while (u.ge.e+m+2)
    u=u-1
    d=d*u
    end do
    y1=(d/(b*g))*((-1)**m)*((x**c2)**m)*sqrt((c2*x**(c2-1))*((x**c2)**
+e))*x**(-1)*(2.718281828**(-0.5*x**c2))
    Lag1=Lag1+y1
    end do
    return
end

C*****
C*****
C En esta subrutina se calcula el segundo polinomio de Laguerre
  subroutine part1de2(n,h,d2,Lag2,x,c2)
  implicit real*8(a-h,o-y)
  double precision d2,Lag2,y2,c2
  m=-1
  Lag2=0
  do while(m.lt.n)
  m=m+1
  e=(2*h+3)/d2-1
  c=n+e
  k=0
  g=1
  do while(k.lt.m)
  k=k+1
  g=g*k
  end do
  i=0
  b=1
  do while (i.lt.n-m)

```

```

i=i+1
b=b*i
end do
u=c+1
d=1
do while (u.ge.e+m+2)
u=u-1
d=d*u
end do
y2=(d/(b*g))*((-1)**m)*((x**c2)**m)*(0.25*c2**2*x**(2*c2-2)-0.5*c2
+*((3*c2+c2*e-5)/2)*x**(c2-2)-0.5*c2*((c2+c2*e-3)/2)*x**(c2-2)+((c2
++c2*e-3)/2)*((c2+c2*e-5)/2)*x**(-2)-c2*x**(c2-2)+(c2+c2*e-3)*x**(-
+2))
Lag2=Lag2+y2
end do
return
end

subroutine part2de2(n,h,d2,Lagd2,x,c2)
implicit real*8(a-h,o-y)
double precision d2,Lagd2,y2,c2
m=-1
Lagd2=0
do while(m.lt.n-1)
m=m+1
e=(2*h+3)/d2-1
c=n+e
k=0
g=1
do while(k.lt.m)
k=k+1
g=g*k
end do
i=0
b=1
do while (i.lt.n-1-m)
i=i+1
b=b*i

```



```

end do
u=c+1
d=1
do while (u.ge.e+m+3)
u=u-1
d=d*u
end do
y2=(d/(b*g))*((-1)**m)*((x**c2)**m)*(-c2*x**(c2-1)+(c2
++c2*e-3)*x**(-1)+(c2-1)*x**(-1)+2*x**(-1))*(c2*x**(c2-1))
Lagd2=Lagd2+y2
end do
return
end

```

```

subroutine part3de2(n,h,d2,Lagd22,x,c2)
implicit real*8(a-h,o-y)
double precision d2,Lagd22,y2,c2
m=-1
Lagd22=0
do while(m.lt.n-2)
m=m+1
e=(2*h+3)/d2-1
c=n+e
k=0
g=1
do while(k.lt.m)
k=k+1
g=g*k
end do
i=0
b=1
do while (i.lt.n-2-m)
i=i+1
b=b*i
end do
u=c+1
d=1

```

```

do while (u.ge.e+m+4)
u=u-1
d=d*u
end do

y2=(d/(b*g))*((-1)**m)*((x**c2)**m)*c2**2*x**(2*c2-2)
Lagd22=Lagd22+y2
end do
return
end
subroutine radial2(n,h,d2,Laguerre2,x,c2)
implicit real*8(a-h,o-y)
double precision d2,Laguerre2,y2,c2
m=-1
Laguerre2=0
do while(m.lt.n)
m=m+1
e=(2*h+3)/d2-1
c=n+e
k=0
g=1
do while(k.lt.m)
k=k+1
g=g*k
end do
i=0
b=1
do while (i.lt.n-m)
i=i+1
b=b*i
end do
u=c+1
d=1
do while (u.ge.e+m+2)
u=u-1
d=d*u
end do
y2=(d/(b*g))*((-1)**m)*((x**c2)**m)*sqrt((c2*x**(c2-1))*((x**c2)**

```

```

+e))*x**(-1)*(2.718281828**(-0.5*x**c2))
  Laguerre2=Laguerre2+y2
end do
return
end
double precision function orto1(l,d1,v,parti,limsup)

implicit real*8(a-h,o-y)
double precision parti,limsup,d1
e=(2*v+3)/d1-1
u=0
i=0
x=(limsup)/(parti)
do while (i.lt.parti)
  i=i+1
  p= x*i
  y=p**(1+e)*2.718281828**(-p)
  a=y*x
  u=u+a

end do
  j=0
  w=1
  do while(j.lt.1)
    j=j+1
    w=w*j
  end do

  orto1=sqrt(w/u)
  return
end
double precision function orto2(n,d2,h,parti,limsup)
implicit real*8(a-h,o-y)
double precision parti,limsup,d2
e=(2*h+3)/d2-1
u=0
i=0
x=(limsup)/(parti)

```

```
do while (i.lt.parti)
  i=i+1
  p= x*i
  y=p**(n+e)*2.718281828**(-p)
  b=y*x
  u=u+b

end do
  j=0
  w=1
  do while(j.lt.n)
    j=j+1
    w=w*j
  end do

  orto2=sqrt(w/u)
  return
end
```

B.2. Transformada de Fourier

```
100  read*,fu,v,ka,limsup,parti,sigm,masa,alpha,rbar1,rbar2
      d1=ka/2+1
      do 501 jo=1,5
        rbar=rbar2+((rbar1-rbar2)/5)*(jo)
        ar=fu
        h=v
        d2=d1
        c2=d1
        nu=0
        lu=0
        do 20 l=0,fu
          do 30 n=0,ar
            cinetica=0
            corr=0
            do 200 k= 1,170
              o=0.1*k
```

```

i=0
fom1=0
fom2=0
*   ce=0
   cor=0
   potencial=0
   do while(i.lt.parti)
   i=i+1
   x=(limsup/parti)*i
   call radial1(1,v,d1,Lag1,x,e,c2)
   call part1de2(n,h,d2,Lag2,x,c2)
   momen1=(0.000287547493)*orto1(1,d1,v,parti,limsup)*Lag1*(limsup/pa
+rti)*((sin(o*x))/(o*x))*x**2
   momen2=(0.000287547493)*orto2(n,d2,h,parti,limsup)*Lag2*(limsup/pa
+rti)*((sin(o*x))/(o*x))*x**2
   pot=-orto1(1,d1,v,parti,limsup)*Lag1*orto2(n,d2,h,parti,limsup)*
+Lag2*x*(limsup/parti)*(((1.33333333)*197.4635696*alpha)/rbar)
*   cen=Lag1*Lag2*(limsup/parti)
   co=Lag1*Lag2*x**(ka)*(x**2)*(limsup/parti)
   cor=cor+co
*   ce=ce+cen
   fom1=fom1+momen1
   fom2=fom2+momen2
   potencial=potencial+pot
   end do
*   open (9,file='fom.txt',status='new')
   dom(k)=0.1
*   momentum1(k)=fom1
*   momentum2(k)=fom2
   integra(k)=(1/(masa))*(1/(rbar**2))*fom1*fom2*o**4*(197.4635696*
+*5)
   integra1(k)=2*(197.4635696**3)*sqrt(((197.4635696/rbar)**2)*o**2+
+masa**2)*fom1*fom2*o**2
*
*   integra1(k)=-((0.25/(masa**3))*((197.4635696**7))*(1/(rbar**4)))*
+*fom1*fom2*o**6
   cornell=sigm*(rbar**ka)*cor*orto1(1,d1,v,parti,limsup)*orto2(n,d2,
+h,parti,limsup)

```

```
*      integra(k)=(rbar**(3))*fom1*fom2*o**2
*      cent=(38991.86132/masa)*(1/(rbar**2))*ce*orto1(1,d1,v,parti,limsup
*      +)*orto2(n,d2,h,parti,limsup)*(v*(v+1))
*      res(k)=dom(k)*integra(k)
*      cinetica=cinetica+res(k)
      res1(k)=dom(k)*integral(k)
      corr=corr+res1(k)
*      write(9,*) o,fom1,fom2
200    continue
      energia=(corr+potencial+cornell)
      nu=n+1
      lu=l+1
      a(nu,lu)=energia
*      write(*,*)a(nu,lu),nu,lu,cinetica,potencial,corr,cornell
30    continue 20    continue
      call DSYEV( JOBZ, UPLO, N, A, LDA, AW, AWORK, LWORK, INFO )
      write(*,*)
      write(*,*)'valores propios',rbar,jo
      do 150 j=1,ar+1
      write(*,*)aw(j)
150    continue 501    continue

      go to 100
      end
```

Bibliografía

- [1] M De Sanctis, A generalization of the Three-Dimensional Harmonic Oscillator Basis for Wave Functions with Non-Gaussian Asymptotic Behavior. EJTP, No. 23 (2010) 137144
- [2] Johannes Eisgplger. Quarkonium Spectroscopy: Beyond One Gluon Exchange. Diploma Thesis. Technische Universita Munchen. 2007
- [3] David J. Griffiths. Introduction to elementary particles. Jhon wiley and sons. 1987
- [4] Avinash Khare. The november J/ψ revolution: Twenty five yars later. arXiv:hep-ph/9910468v125Oct1999
- [5] Robert Eisberg. Fundamentos de física moderna. Ed Limusa-Wiley S.A. 1973
- [6] David J. Griffiths. Introduction to quantum mechanics. Second edition. Pearson Prentice Hall. 2005
- [7] N. Brambilla, M. Kramer, R. Mussa, A. Vairo. Heavy quarkonium physics. arXiv:hep-ph/0412158v2 26 Jul 2005
- [8] Moshinsky M. Smirnov Y. The Armonic Oscillator in Modern Physics. Harwood Academic Publishers. 1996
- [9] M. De Sanctis and P Quintero, Eur. Phys. J.A 46, 213 (2010).
- [10] Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe. Quantum mechanics. Voll. pag 814
- [11] Peskin M. Schroeder D. An introduction to quantum field theory. The advanced book program. 1995.

- [12] Particle Physics and the Schrödinger equation. Cambridge university press. 1997 pag 2
- [13] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik. Tables of integrals, series and products. Séptima edición. Elsevier academic press. Formula 8,979
- [14] E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita and M. Yan. Phys Rev D17, 11 de 1978
- [15] H. Fraunfelder, E. Henley. Subatomic Physics. pag 369
- [16] <http://www.lns.cornell.edu/public/reu/2004reports/willard.pdf>
- [17] Schoberl, F.F., Lucha W., 1998 HEP-PH/9811453
- [18] H. Ciftci, R. L. Hall, Q. D. Katadbeh. Coulomb plus power-law potentials in quantum mechanics. J. Phys. A: Math. Gen.36, 7001–7008(2003)
- [19] F. M. Ferrnandez. Variationally improved perturbation theory for central-field models. Eur. J. Phys. 24, 289 – 296(2003).
- [20] V.V. Kudryashov and V.I. Reshetnyak, Improved variational approach for the Cornell potential, arXiv:0911.4256v1[math-ph]22Nov2009
- [21] A. R. Edmons. Angular Momentum In Quantum Mechanics, Princeton University Press 1957, pag 81
- [22] J.J. Sakurai. Modern Quantum Mechanics. Addison Wesley Publishing Company. 1994
- [23] Leslie Ballentine. Quantum Mechanics A modern development. Word Scientific Publishing. 1998
- [24] L. Pauling, B. Wilson. Introduction to quantum mechanics whit aplicacion to chemistry. Mc Graw Hill Company. 1935
- [25] Jirimutu, WANG Hai-Jun, ZHANG Wei-Ning, Cheuk-Yin Wong. Meson spectra governed by the Fermi-Breit potential. CPC(HEP, NP), 2009, 33(3): 170-176.
- [26] Particle Data Group (C. Amsler et al.), Phys. Lett. B 667, 1 (2008) and 2009 partial update for the 2010 edition (URL: <http://pdg.lbl.gov>)