

EVALUACION DE INTEGRALES DE DOS ELECTRONES MEDIANTE EL TEOREMA DE CONVOLUCION DE FOURIER

H. Estrada B.
Departamento de Física. Universidad Nacional.
Santafé de Bogotá

RESUMEN

Mediante el empleo del teorema de convolución de Fourier se muestra una manera alternativa de calcular integrales muy frecuentes en física atómica.

ABSTRACT

With help of the Fourier convolution theorem it is shown an alternative way to calculate some integrals that oft appears in atomic physics.

1. INTRODUCCION

En la física atómica es de particular interés el cálculo de integrales de la forma:

$$\int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} \frac{\rho_1(\vec{r}_1)\rho_2(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (1)$$

que representan la energía de interacción coulumbiana de dos distribuciones de carga con densidades $\rho_1(\vec{r}_1)$ y $\rho_2(\vec{r}_2)$, Ω representa el volumen de integración [1,2]. Usualmente en los cursos de matemáticas para físicos y física atómica se discute el cálculo de ésta integral mediante el uso de la función generatriz de los polinomios de Legendre y el teorema de adición de los armónicos esféricos [3,4].

El propósito del artículo es presentar un método alternativo para la evaluación de la integral mediante el empleo del TEOREMA DE CONVOLUCION de Fourier. Por supuesto, no es el único método para realizar tales integrales [5,6], pero es en muchos casos el más simple.

Haciendo uso de éste procedimiento, el cálculo de la integral ofrece varias ventajas como se discute más adelante.

2. DEFINICIONES BASICAS

Antes de realizar la evaluación de (1), vale la pena recordar algunas definiciones básicas [6]. La convolución de dos funciones $f_1(x)$ y $f_2(x)$ definidas para todo valor de x es:

$$f_1(x)*f_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x-y) \cdot f_2(y) dy \quad (2)$$

donde $f_1(x)$ y $f_2(x)$ son funciones seccionalmente continuas e integrables. Como se demuestra en cualquier libro de análisis de Fourier [6]:

$$\mathfrak{F}[f_1(x)*f_2(x)] = F_1(\omega)F_2(\omega) \quad (3)$$

que corresponde al TEOREMA DE CONVOLUCION. $F_1(\omega)$ y $F_2(\omega)$ están definidas como las transformadas de Fourier de $f_1(x)$ y $f_2(x)$ respectivamente:

$$F_i(\omega) = \mathfrak{F}[f_i(x)]$$

La expresión (3) la podemos escribir nuevamente como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_1(x-y) \cdot f_2(y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} F_1(\omega)F_2(\omega) e^{-i\omega x} dx \quad (4)$$

El TEOREMA DE LA CONVOLUCION se puede extender fácilmente al caso de tres funciones donde la variable r es tridimensional [6]:

$$\int_{\Omega_1 \Omega_2} \int f(\vec{r}_3 - \vec{r}_2) g(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) h(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \sqrt{(2\pi)^3} \int_{\Omega_k} F(\vec{k})G(\vec{k})H(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_3} d\vec{k} \quad (5)$$

donde $F(\vec{k})$, $G(\vec{k})$ y $H(\vec{k})$ son las transformadas de Fourier de $f(\vec{r})$, $g(\vec{r})$, y $h(\vec{r})$ respectivamente.

3. EVALUACION DE LA INTEGRAL

Ahora teniendo en cuenta la definición (5), la integral (1) se considera

como la convolución de tres funciones:

$$\int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} \frac{\rho_1(\vec{r}_1) \rho_2(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \sqrt{(2\pi)^3} \int_{\Omega_k} F_1(k) F_2(k) F_3(k) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_3} d^3k \Big|_{\vec{r}_3=0} \quad (6)$$

donde $F_1(\vec{k}) = \mathfrak{F}[\rho_1(\vec{r})]$, $F_2(\vec{k}) = \mathfrak{F}[\frac{1}{r}]$ y $F_3(\vec{k}) = \mathfrak{F}[\rho_2(\vec{r})]$

Teniendo en cuenta [7]:

$$F_2(\vec{k}) = \mathfrak{F}[\frac{1}{r}] = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int_{\Omega} \frac{1}{\|\vec{r}\|} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k^2}$$

podemos escribir de nuevo la integral (6) como:

$$I = 4\pi \int_{\Omega_k} \frac{F_1(\vec{k}) F_3(\vec{k})}{k^2} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_3} d\vec{k} \Big|_{\vec{r}_3=0} \quad (7)$$

que es una integral evidentemente más sencilla de calcular. Con ayuda del TEOREMA DE CONVOLUCION de la transformada de Fourier se reemplaza el cálculo de los elementos matriciales de un operador de dos electrones entre dos distribuciones de carga de un centro, que es una integral en seis variables, por una integral en sólo tres variables. Además, no se hace necesarias las consideraciones usuales de tener en cuenta las relaciones de $r >$ y $r <$ presentes cuando se emplea la función generatriz de los polinomios de Legendre.

En los problemas de física atómica $\rho_i(\vec{r})$ se expresa generalmente como:

$$\rho_i(\vec{r}) = \frac{\chi_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (8)$$

donde los ángulos (θ, ϕ) corresponden a la posición del radio vector \vec{r} en el espacio de coordenadas. Al realizar la transformada de Fourier de esta función, es también posible separar la parte angular [8]:

$$F(k) = \mathfrak{F}[\rho(\vec{r})] = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int_{\Omega} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3r = \frac{g_l(k)}{k} Y_l^m(\Theta, \Phi) \quad (9)$$

(Θ, Φ) son los ángulos que definen el vector \vec{k} y

$$g_l(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^{-l} \int_0^{\infty} j_l(kr) \chi_l(r) dr \quad (10)$$

que es denominada la transformada de Hankel, y $j_l(r)$ está definido por [7]:

$$j_l(r) = (-x)^l [x^{-l} (d/dx)]^l \sin(x)/x$$

Con el objeto de ilustrar lo anterior, se presenta un del ejemplo del cálculo de (1) cuando:

$$\rho(r) = \frac{Z^3}{\pi} \frac{\chi(r)}{r} Y_0^0(\theta, \phi) \quad (11)$$

con

$$\chi(r) = r e^{-2Zr}$$

la transformada de Fourier de $\rho(r)$ está dada por (8). El cálculo explícito de $g_0(k)$ da como resultado:

$$g_0(k) = Z \sqrt{\frac{1}{2\pi^3}} \frac{(\frac{k}{2Z})}{(1 + (\frac{k}{2Z})^2)^2} \quad (12)$$

por lo tanto:

$$\int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} \frac{\rho_1(\vec{r}_1) \rho_2(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \frac{2Z^2}{\pi^2} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{(\frac{k}{2Z})^2}{k^2 (1 + (\frac{k}{2Z})^2)^4} [Y_0^0(\theta, \phi)]^2 k^2 \sin(\theta) dk d\theta d\phi \quad (13)$$

la evaluación de esta integral se realiza analíticamente haciendo uso de 3.194-3 de la referencia [7]. El resultado es:

$$I = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{5Z}{8\pi} \right] \quad (14)$$

que es el resultado al que se llega haciendo uso del método de la función generatriz de los polinomios de Legendre y el teorema de adición de los armónicos esféricos.

REFERENCIAS

- [1] B. H. Bransden, C. J. Joachain. Physics of Atoms and Molecules. Longman (1983)
- [2] M. Karplus, R. Porter. Atoms & Molecules. Benjamin (1971)
- [3] C. Johnson, L. Pedersen. Quantum Chemistry and Physics. Addison-Wesley (1974)
- [4] P. Morse, H. Feshbach. Methods of Theoretical Physics. McGraw-Hill (1954)
- [5] M. Weissbluth. Atoms and Molecules. Academic Press (1978)
- [6] I. Sneddon. Fourier Transforms. McGraw-Hill (1951)
- [7] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik. Table of Integrals, Series and Products. Academic Press (1980)
- [8] S. Flügge. Practical Quantum Mechanics. Springer Verlag (1974)