Ejercicio 1

Intro

La ecuación de Poisson que debe cumplir un potencial $\phi(\mathbf{r})$ generado por una densidad de carga $\rho(\mathbf{r})$ es

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = -4\,\pi\,\rho(\mathbf{r}) \ , \tag{1}$$

que para el caso de una carga puntual q ubicada en el origen resulta

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = -4\,\pi\,q\,\delta(\mathbf{r}) \ , \tag{2}$$

donde $\delta(\mathbf{r})$ es la función delta de Dirac 3D. Evitamos detalles, pero digamos que la simetría radial permite plantear el problema unidimensionalmente y la Ec.(2) posee solución de tipo Coulomb $\phi(\mathbf{r}) = q/r$.

Agreguemos que si cambiamos la ecuación de Poisson por la de Helmholtz inhomogénea

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + k^2\,\phi(\mathbf{r}) = -4\,\pi\,q\,\delta(\mathbf{r}) \ , \tag{3}$$

esta última, posee solución de la forma $\phi(\mathbf{r}) = q\,e^{ikr}/r$, pero si $k = i\alpha$ es imaginario puro la Ec.(3) toma la forma de la ecuación de Klein-Gordon,

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) - \alpha^2\,\phi(\mathbf{r}) = -4\,\pi\,q\,\delta(\mathbf{r}) \ , \tag{4}$$

de solución de tipo Yukawa $\phi(\mathbf{r}) = q\,e^{-\alpha r}/r$.

En todos los casos no estamos mostrando el conjunto completo de soluciones sino las que poseen sentido físico. En lo que sigue, para la transformada de Fourier $\mathcal{F}[V(\mathbf{r})](\mathbf{k})$ usaremos la notación mas sintética $\hat{V}(\mathbf{k})$.

a) Potencial de Coulomb

Se desea calcular la transformada de Fourier para el potencial de interacción entre dos partículas (inmersas en un medio de constante dieléctrica ε) cuya interacción es coulombiana, esto es

$$V_C(\mathbf{r}) = -\,\frac{e^2}{\varepsilon\,r}\,. \tag{5}$$

Haremos la transformada de Fourier de la función $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}$ omitiendo la constante $-e^2/\varepsilon$, la que agregaremos luego. Para la transformada planteamos entonces

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{r}\, e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, d^3\mathbf{r}\,, \tag{6}$$

que expresada en coordenadas esféricas (donde se alinea el eje z con el vector $\mathbf{k}$) resulta

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{1}{r}\, e^{-i\,k\,r\,\cos(\theta)}\, r^2\, \sin(\theta)\, d\theta\, d\varphi\, dr\,. \tag{7}$$

Simplificando r e integrando en φ se tiene

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-i\,k\,r\,u}\, r\, du\, dr\,, \tag{8}$$

donde hemos hecho el cambio de variables $u = \cos(\theta)$. Se obtiene, integrando en u, facilmente

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi \int_0^\infty \left(\frac{e^{-i\,k\,r\,u}\, r}{-ikr} \right)\Big|_{u=-1}^{u=1} dr\,, \tag{9}$$

es decir

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi i \int_0^\infty \left(\frac{e^{-i\,k\,r}}{k} - \frac{e^{i\,k\,r}}{k} \right) dr\,. \tag{10}$$

Acá se presenta el punto más delicado porque no existe el límite para $r \to \infty$ de las integrales en juego. La forma de regularizar esto es agregando al k una parte imaginaria con el signo adecuado para generar un decaimiento de las exponenciales. Pongamos entonces en la expresión de la izquierda $k = k_r - i\,k_I$ y en la de la derecha $k = k_r + i\,k_I$ (donde $k_I > 0$), de donde se tiene

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi i \int_0^\infty \frac{e^{-i\,(k_R - ik_I)\,r}}{(k_R - ik_I)} - \frac{e^{i\,(k_R + ik_I)\,r}}{(k_R + ik_I)}\; dr\,, \tag{11}$$

que al integrar resulta

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi i \left(\frac{e^{-i\,(k_R - ik_I)\,r}}{-i(k_R - ik_I)^2} - \frac{e^{i\,(k_R + ik_I)\,r}}{i(k_R + ik_I)^2} \right)\Big|_{r=0}^{r\to\infty}\,, \tag{12}$$

que, para evidenciar el comportamiento, reescribamos como

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi \left(-\frac{e^{-i\,k_R\,r}\, e^{-\,k_I\,r}}{(k_R - ik_I)^2} - \frac{e^{k_R\,r}\, e^{-\,k_I\,r}}{(k_R + ik_I)^2} \right)\Big|_{r=0}^{r\to\infty}\,. \tag{13}$$

Es fácil ver que tiende a cero la expresión para $r \to \infty$ y queda clara la elección de signos adoptada para la parte imaginaria de k. Por lo tanto tenemos

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi \left(\frac{1}{(k_R - ik_I)^2} + \frac{1}{(k_R + ik_I)^2} \right), \tag{14}$$

que puede reescribirse

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 4\pi \, \frac{(k_R^2 - k_I^2)}{(k_R^2 + k_I^2)^2} \,. \tag{15}$$

Ahora sí, ya resuelta la integración, tomamos límite $k_I \to 0$ haciendo desaparecer la componente imaginaria agregada al k. Resulta entonces

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{k^2} \,. \tag{16}$$

Por lo tanto, la ransformada de Fourier del potencial de Coulomb $V_C(\mathbf{r})$ es

$$\hat{V}_C(\mathbf{k}) = -\, \frac{4\pi \, e^2}{\varepsilon \, k^2} \,. \tag{17}$$

b) Potencial de Yukawa

Se desea calcular la transformada de Fourier del potencial para la interacción entre dos partículas (de nuevo inmersas en un medio de constante dieléctrica ε), pero en este caso cuya interacción viene dada por el potencial de Yukawa, es decir que ahora se tiene un potencial

$$V_Y(\mathbf{r}) = -\, \frac{e^2}{\varepsilon \, r} \, e^{-r/\lambda} \,. \tag{18}$$

Por comodidad llamaremos $\alpha = 1/\lambda$. Haremos ahora la transformada de Fourier de la función $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \, e^{-\alpha \, r}$ omitiendo nuevamente la constante $-e^2/\varepsilon$, que agregaremos luego. Planteamos en este caso entonces

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{r} \, e^{-\alpha \, r} \, e^{-i \, \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \, d^3\mathbf{r} \,, \tag{19}$$

que explicitando en coordenadas esféricas igual que antes resulta

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{r} \, e^{-\alpha \, r} \, e^{-i \, k \, r \, \cos(\theta)} \, r^2 \, \sin(\theta) \, d\theta \, d\varphi \, dr \,, \tag{20}$$

Simplificando r e integrando en φ se tiene

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-\alpha\, r}\, e^{-i\,k\,r\,u}\, r\, du\, dr\,, \tag{21}$$

donde hemos hecho el cambio de variables del ítem anterior ($u = \cos(\theta)$). Se obtiene, integrando en u, facilmente

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi \int_0^\infty \Big(\frac{e^{-\alpha\, r}\, e^{-i\,k\,r\,u}\, r}{-ikr}\Big)\Big|_{u=-1}^{u=1} dr\,, \tag{22}$$

es decir

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi i \int_0^\infty \Big(\frac{e^{-\alpha\, r}\, e^{-i\,k\,r}}{k} - \frac{e^{-\alpha\, r}\, e^{i\,k\,r}}{k}\Big)\, dr\,. \tag{23}$$

Reescribamos esta expresión levemente

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi i \int_0^\infty \frac{e^{(-i\,k-\alpha)\,r}}{k} - \frac{e^{(i\,k-\alpha)\,r}}{k}\, dr\,, \tag{24}$$

lo que nos sirve para comparar con la Ec.(11) del caso de Coulomb. El α (recordemos que $\alpha > 0$) cumple aquí el papel de la parte campleja de k que debió agregarse para regularizar la integral. Consecuentemente acá podemos integrar directamente, con lo que tendremos

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi i \Big(\frac{e^{(-i\,k-\alpha)\,r}}{k(-i\,k-\alpha)} - \frac{e^{(i\,k-\alpha)\,r}}{k(i\,k-\alpha)}\Big)\Big|_{r=0}^{r\to\infty}\,, \tag{25}$$

que evidentemente es

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi i \Big(\frac{e^{-i\,k\,r}\, e^{-\alpha\, r}}{k(-i\,k-\alpha)} - \frac{e^{i\,k\,r}\, e^{-\alpha\, r}}{k(i\,k-\alpha)}\Big)\Big|_{r=0}^{r\to\infty}\,. \tag{26}$$

Nuevamente para $r \to \infty$ se anula la expresión, de donde resulta

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 2\pi i \Big(\frac{1}{k(i\,k+\alpha)} + \frac{1}{k(i\,k-\alpha)}\Big)\,, \tag{27}$$

es decir

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = 4\pi\, \frac{1}{(k^2+\alpha^2)}\,. \tag{28}$$

Recordemos que vale $\alpha = 1/\lambda$, con lo cual la ransformada de Fourier del potencial de Yukawa $V_Y(\mathbf{r})$ es

$$\hat{V}_Y(\mathbf{k}) = -\,\frac{4\pi\, e^2}{\varepsilon\,(k^2 + (1/\lambda)^2)}\,. \tag{29}$$

c) Comparativa

Hacemos notar que si en la transformada del potencial de Yukawa se tomara $\lambda \to \infty$ (es decir $\alpha \to 0$ para la expresión (28)) se obtiene la transformada del potencial de Coulomb. Podría haberse calculado entonces la transformada del potencial de Coulomb simplemente como límite sin apantallamiento de la transformada del potencial de Yukawa, sin embargo se prefirió hacer los dos cálculos por separado para poder compararlos más detalladamente. Es claro que el parámetro α está jugando el papel del k_I agregado en la caso de Coulomb.

Comparemos sin mayores detalles ambos potenciales en juego, dados por las expresiones (5) y (18). Para esto mostramos la siguiente figura donde se tomaron como 1 las constantes. Hay que destacar que, en términos de λ, tenemos que para $r = \lambda$ ($r = 1$ en la figura) el potencial de Yukawa cayó respecto al de Coulomb en un factor e.

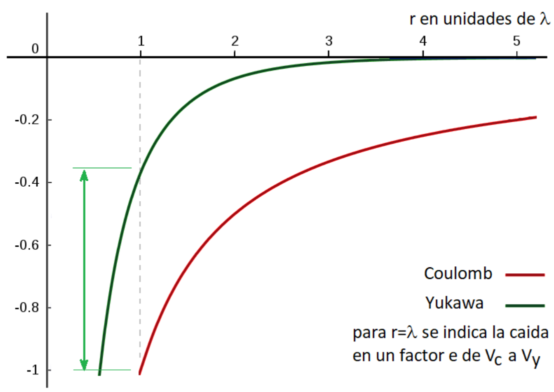

Figura 1: Comparación de los potenciales de Coulomb y de Yukawa. Se indica, para $r = 1$ el decaimiento en un factor e de uno respecto al otro.

Para comarar ahora ambas transformadas reescribamos la expresión dada en (28) como $\hat{V}(\mathbf{k}) = 4\pi \frac{1}{k^2(1+(\alpha/k)^2)}$ y tengamos en cuenta el desarrollo de Taylor de $f(x) = \frac{1}{1+x}$ para $x << 1$ (que corresponde a $(\alpha/k)^2 << 1$). De esto resulta

$$\hat{V}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{k^2}\left(1 - \left(\frac{\alpha}{k}\right)^2 + \left(\frac{\alpha}{k}\right)^4 - \cdots\right) \tag{30}$$

para comparar con la expresión dada en (16). O, si se prefiere (correspondiente a $k\lambda >> 1$) se tiene

$$\hat{V}_Y(\mathbf{k}) = -\frac{4\pi\, e^2}{\varepsilon\, k^2}\left(1 - \left(\frac{1}{k\lambda}\right)^2 + \left(\frac{1}{k\lambda}\right)^4 - \cdots\right) \tag{31}$$

para comparar con la expresión dada en (17).