



Universitat
de les Illes Balears

TRABAJO DE FIN DE GRADO

POTENCIALES QUARK-ANTIQUARK Y NIVELES ENERGÉTICOS DE ESTADOS MESÓNICOS

Laura Torres Guasp

Grado de Física

Facultad de Ciencias

Año académico 2022-23

POTENCIALES QUARK-ANTIQUARK Y NIVELES ENERGÉTICOS DE ESTADOS MESÓNICOS

Laura Torres Guasp

Trabajo de Fin de Grado

Facultad de Ciencias

Universidad de las Illes Balears

Año académico 2022-23

Palabras clave del trabajo:

potencial de Cornell, NRQCD, quarkonia, charmonio, botonio

Nombre Tutor/Tutora del Trabajo: Antonio Puente Ferrá

Se autoriza a la Universidad a incluir este trabajo en el Repositorio Institucional para su consulta en acceso abierto y difusión en línea, con fines exclusivamente académicos y de investigación

Autor/a		Tutor/a	
Sí	No	Sí	No
<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Resumen

En este estudio se abordará el análisis de los estados energéticos del charmonio y botonio considerándolos como sistemas no relativistas. Se empleará el potencial de Cornell para obtener los correspondientes autovalores del hamiltoniano, mediante la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger. En un principio, se realizará un ajuste inicial de parámetros utilizando un subconjunto de los valores experimentales proporcionados por el *Particle Data Group* (PDG). El objetivo principal es determinar la masa efectiva de los quarks presentes en estos mesones, el valor de la constante de acoplamiento fuerte y la intensidad del confinamiento en el potencial de Cornell.

A partir de los resultados obtenidos, realizaremos una estimación para los demás estados en el espectro del charmonio y botonio. Además, se aplicarán correcciones perturbativas para incorporar detalles más refinados en la estructura de niveles de ambos sistemas, comparando los resultados numéricos obtenidos con los valores experimentales disponibles.

Posteriormente, se llevará a cabo un nuevo ajuste de parámetros, tomando en consideración todos los estados disponibles en la base de PDG. Este nuevo análisis permitirá valorar si la selección previa de estados utilizada es representativa y adecuada para describir de manera precisa el espectro de estos sistemas.

Resum

En aquest estudi s'abordarà l'anàlisi dels estats energètics del charmoni i del botoni considerant-los com a sistemes no relativistes. S'emprarà el potencial de Cornell per obtenir els autovalors corresponents de l'hamiltonià, mitjançant la resolució numèrica de l'equació de Schrödinger. Al principi, es realitzarà un ajust inicial de paràmetres utilitzant un subconjunt dels valors experimentals proporcionats pel *Particle Data Group* (PDG). L'objectiu principal és determinar la massa efectiva dels quarks presents en aquests mesons, el valor de la constant d'acoblament fort i la intensitat del confinament al potencial de Cornell.

A partir dels resultats obtinguts, realitzarem una estimació per als altres estats a l'espectre del charmoni i botoni. A més, s'aplicaran correccions pertorbatives per incorporar detalls més refinats a l'estructura de nivells d'ambdós sistemes, comparant els resultats numèrics obtinguts amb els valors experimentals disponibles.

Posteriorment, es durà a terme un nou ajustament de paràmetres, prenent en consideració tots els estats disponibles a la base de PDG. Aquesta nova anàlisi permetrà valorar si la selecció prèvia d'estats utilitzada és representativa i adequada per descriure de manera precisa l'espectre d'aquests sistemes.

Abstract

This study will address the analysis of the energy states of charmonium and bottomonium, considering them as non-relativistic systems. The Cornell potential will be used to obtain the corresponding eigenvalues of the Hamiltonian through the numerical solution of the Schrödinger equation. Initially, an initial parameter fitting will be performed using a subset of the experimental values provided by the Particle Data Group (PDG). The main objective is to determine the effective mass of the quarks present in these mesons, the value of the strong coupling constant, and the strength of confinement in the Cornell potential.

Based on the obtained results, an estimation will be made for the remaining states in the charmonium and bottomonium spectra. Furthermore, perturbative corrections will be applied to incorporate more refined details in the level structure of both systems, comparing the numerical results with the available experimental values.

Subsequently, a new parameter fitting will be carried out, taking into consideration all the states available in the PDG database. This new analysis will allow us to assess whether the previous selection of states used is representative and suitable for accurately describing the spectrum of these systems.

Índice general

1	Introducción y objetivos	6
2	Quarkonia y NRQCD	9
2.1	Espectrometría de los estados quarkonia	9
2.2	Modelos de potencial	10
2.2.1	Potencial no perturbativo	10
2.2.2	Correcciones perturbativas	13
3	Metodología	14
3.1	Adimensionalización de la ecuación de Schrödinger	14
3.2	Resolución numérica	15
3.2.1	Test del modelo numérico	18
3.3	Estimación de parámetros por minimización de χ^2	18
4	Ajuste de parámetros y predicción de estados energéticos	21
4.1	Espectro de los estados quarkonia con correcciones perturbativas	21
4.2	Espectro de los estados quarkonia con parámetros variacionales en las correcciones perturbativas	27
4.2.1	Ajuste con una selección de estados	27
4.2.2	Ajuste con todos los estados	29
5	Conclusiones	32
	Apéndice A Propagación de errores a los parámetros del modelo	34
	Apéndice B Resultados numéricos	36
	Bibliografía	39

Introducción y objetivos

La cromodinámica cuántica (QCD, por sus siglas en inglés *Quantum chromodynamics*) es la teoría cuántica de campos que describe la interacción fuerte, en la que los gluones son los mediadores que se acoplan a los quarks y antiquarks, únicos fermiones elementales del Modelo Estándar con cargas de color. Hasta la fecha, estos constituyentes elementales no se han observado aislados, sino únicamente formando sistemas compuestos llamados hadrones. Los hadrones se dividen en dos familias, bariones (qqq) formados por tres quarks y mesones ($q\bar{q}$) compuestos de un quark y un antiquark, con espín semientero y entero respectivamente [1, 2]. Las propiedades de estos sistemas, medibles experimentalmente, proporcionan la única fuente de información accesible sobre las propiedades de sus constituyentes elementales. Es por ello que a la rama de la física encargada del estudio de las propiedades e interacciones entre quarks, se la conoce como física hadrónica. Dentro del marco teórico, el Modelo Estándar, concebido para explicar dichas observaciones experimentales, se asume la existencia de seis quarks (y sus antiquarks), de diferentes sabores y masas.

Los estados quarkonia son estados ligados formados por quarks cuya masa es considerablemente grande en comparación con la energía de interacción. Más concretamente, son mesones formados por un quark y un antiquark pesados del mismo sabor. Las partículas *charm* (c), *bottom* (b) y *top* (t) se consideran quarks de masa relativamente alta. Cabe mencionar que, debido a su gran masa e inestabilidad, no se ha detectado, ni se espera poder detectar en el futuro, ningún estado formado por el quark *top* [1]. Los estados observados han sido de gran relevancia a la hora de establecer el marco teórico propio de la física de partículas. A inicios del año 1964, Gell-Mann y Zweig proponen independientemente el Modelo Estándar que originalmente postulaba la existencia de tres quarks ligeros: *up* (u), *down* (d) y *strange* (s). No obstante, sucesivos avances científicos sugerían que debía existir al menos otra partícula que pudiese explicar ciertos fenómenos, como el mecanismo GIM¹ (Glashow, Iliopoulos y Maiani) que requiere de la existencia de un cuarto quark [4].

¹Este mecanismo se encarga de suprimir las corrientes neutras que cambian de sabor, como por ejemplo en la desintegración de los mesones K^0 y \bar{K}^0 [3]

No fue hasta 1974 que se confirmó la existencia de este cuarto quark. El mesón J/Ψ , compuesto por un quark *charm* y su antipartícula, fue descubierto como una resonancia producida por la aniquilación de un electrón y un positrón en dos centros distintos, BNL² y SLAC³ [5]. Este evento no solo fue importante por el descubrimiento de un nuevo quark con masa 1.27 ± 0.02 GeV/c² [6], sino que también supuso una confirmación sólida del modelo de quarks.

En 1977 se observa en Fermilab⁴, también a partir de la aniquilación electrón-positrón, un estado a una energía considerablemente mayor. Se trataba de una resonancia de baja energía, el estado más ligero de los denominados *upsilon* (Υ), formados por un quark *bottom* y su antiquark. Este suceso corroboraba la existencia de una tercera generación de quarks [1, 2]. El nuevo quark, con una masa de 4.18 ± 0.03 GeV/c², es alrededor de tres veces más pesado que el quark *c* [6].

Los mesones $c\bar{c}$ y $b\bar{b}$ se denominan charmonio y botonio, cuyos niveles energéticos son genéricamente referidos como quarkonia. El descubrimiento del sexto quark, el más masivo y arduo de encontrar, se confirmó en 1995 en las instalaciones del Fermilab. Su producción, a partir de colisiones protón-antiprotón a suficiente energía, no conduce sin embargo a la formación de estados ligados. Tras producirse y debido a su enorme masa 172.69 ± 0.30 GeV/c² [6], el quark *top* decae rápidamente a un quark *b* y un bosón W, impidiendo su hadronización (formación de estados ligados) con otras partículas [2].

En las últimas décadas, se han realizado avances experimentales significativos, que han permitido consolidar los valores obtenidos correspondientes a numerosos niveles tanto del charmonio como del botonio. Todo ello ha contribuido a una mayor comprensión de las propiedades de estos mesones pesados, motivando, a su vez, avances en los modelos teóricos y métodos de cálculo empleados.

QCD es una teoría asintóticamente libre, esto es, la intensidad de la interacción disminuye al aumentar la energía o cuadrimomento transferido, propiedad conocida como *libertad asintótica*. A cortas distancias de separación, cuando los momentos transferidos son mayores, es de esperar que la interacción entre los quarks sea lo suficientemente débil como para poder entenderse y tratarse perturbativamente.

A distancias mayores, en cambio, la interacción crece, siendo necesario aplicar otras técnicas, como LQCD (*Lattice QCD*), uno de los métodos de más éxito para abordar QCD desde un enfoque no perturbativo [7]. Desde la década de 1990, los resultados proporcionados por LQCD han evidenciado un aumento de la energía almacenada en el sistema a medida que los quarks se separan, apuntando a una densidad de energía constante contenida en el denominado tubo de flujo de color.

Actualmente, es frecuente el uso de teorías de campo efectivas (EFTs, por sus siglas en inglés Effective Field Theories), que son aproximaciones de las teorías fundamentales que describen el comportamiento del sistema a una cierta escala de energía. El estudio conjunto de LQCD con

²Laboratorio Nacional Brookhaven, Long Island, New York

³Centro del Acelerador Lineal de Stanford, California

⁴Laboratorio nacional del Departamento de Energía especializado en investigación de física de partículas de alta energía, Illinois

las EFTs aplicadas a QCD, ha ido desarrollándose en las últimas décadas, lo que ha facilitado y seguirá permitiendo en el futuro una mejor comprensión tanto de los estados quarkonia como de diversos aspectos de QCD. En particular, si los quarks participantes son suficientemente masivos, uno puede plantearse un abordaje no relativista del problema, en el que los niveles energéticos pueden obtenerse con técnicas de mecánica cuántica usando un potencial modelo que incorpore las características esenciales de QCD. Por lo tanto, en QCD la teoría efectiva que explica las propiedades de los sistemas formados por quarks pesados es NRQCD (QCD no relativista) [8].

Motivado por el, entonces reciente, descubrimiento de los primeros estados del charmonio, en 1974 se propone en la universidad de Cornell un análisis basado en un modelo no relativista con una interacción que incluye un término de corto alcance tipo coulomb (comportamiento $1/r$) y un término de confinamiento lineal de largo alcance, el llamado potencial de Cornell. Ambos términos incluyen parámetros asociados a la interacción fuerte, que permitieron entender y predecir características importantes del espectro de este sistema [9].

El objetivo fundamental de este trabajo es reproducir las energías de distintos estados del charmonio y del botonio resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con un potencial estático no perturbativo, el potencial de Cornell. En el proceso, encontraremos el valor de algunos parámetros importantes para QCD: la masa de los dos quarks pesados que componen estos estados, la constante de acoplamiento de la interacción fuerte, α_s y la constante relacionada con el potencial de confinamiento que llamaremos A . El valor de estas constantes se obtendrá a partir de las energías experimentales establecidas [6]. Para tal fin se implementará un código en Python que fijará estos parámetros minimizando la suma cuadrática de residuos entre los valores experimentales y los que se obtendrán resolviendo la correspondiente ecuación de Schrödinger. Finalmente, se incluirán correcciones perturbativas que permitirán romper la degeneración del potencial central, separando los niveles energéticos dependiendo de su espín y momento angular.

La memoria se ha estructurado de la siguiente forma; en el capítulo 2 se presenta una introducción de cómo se organizan los estados quarkonia, su similitud con los correspondientes a otros estados no relativistas en QED (Electrodinámica Cuántica) y el potencial que los describe en ambos casos. En el capítulo 3 se explica el algoritmo utilizado para obtener las energías de cada estado, la adimensionalización de las ecuaciones y el ajuste de parámetros del modelo. En el capítulo 4 se exponen los resultados obtenidos, la energía de los distintos estados y los parámetros obtenidos del ajuste anterior, comparándolos con los resultados de otros trabajos. Finalmente, en el capítulo 5 se sintetizan y resumen los resultados obtenidos en este trabajo y se sugieren posibles continuaciones del mismo. Por último, se incluyen dos apéndices; en el apéndice A, se proporciona una explicación detallada sobre cómo se han calculado las incertidumbres en los parámetros del ajuste. En el apéndice B se resumen, en forma de tablas, las energías obtenidas para todos los estados quarkonia usados en este trabajo.

Quarkonia y NRQCD

2.1 Espectrometría de los estados quarkonia

Como se ha mencionado en la introducción, los efectos relativistas pueden despreciarse a primer orden tanto en el charmonio como en el botonio debido a la gran masa de sus constituyentes elementales. La velocidad media reducida de los quarks en sus estados mesónicos es de hecho del orden de $\beta \sim 0.3$ y $\beta \sim 0.1$ para el charmonio y el botonio, respectivamente [10, 8]. Abordando con técnicas de mecánica cuántica no relativista, es factible investigar estos estados utilizando en principio un potencial central.

Los distintos estados del sistema quarks-antiquark se caracterizan mediante el espín total $\vec{S} = \vec{s}_1 \oplus \vec{s}_2$, suma vectorial de los dos espines $1/2$, que pueden acoplarse a espín total $S = 0$ (singlete) o $S = 1$ (triplete), el momento angular orbital relativo, \vec{L} y su acoplamiento para dar el momento angular total, $\vec{J} = \vec{L} \oplus \vec{S}$. Además, para cada uno de estos estados de momento angular, podemos encontrar sucesivos estados a energías crecientes, caracterizados por un número cuántico principal, $n = 1, 2, \dots$. A medida que aumenta este número, aumenta también la energía debido al mayor número de nodos de la función radial, $n_r = n - L - 1$, que contribuye a subir la energía cinética del estado. Así, es habitual utilizar la notación espectroscópica estándar, $n^{2S+1}L_{JPC}$ para designar los distintos estados. En esta notación $P = (-1)^{L+1}$ y $C = (-1)^{L+S}$ indican la paridad espacial y la paridad intrínseca de carga, que son los valores propios de estos estados mesónicos, correspondientes a las simetrías discretas de inversión de coordenadas y de conjugación de carga, respectivamente [5].

Cabe mencionar que, en general, al igual que ocurre en física nuclear o en la descripción de algunas resonancias hadrónicas de alta energía, ni S ni L tienen por qué ser buenos números cuánticos. En general, únicamente lo es su acoplamiento, J así como P y C que sirven para etiquetar los estados [5], como se aprecia en la notación J^{PC} utilizada en la figura 2.1.

En este trabajo utilizaremos la notación espectroscópica usual, cuando no haya ambigüedad en cuanto a momento angular orbital, o la notación aceptada históricamente cuando esta sea el

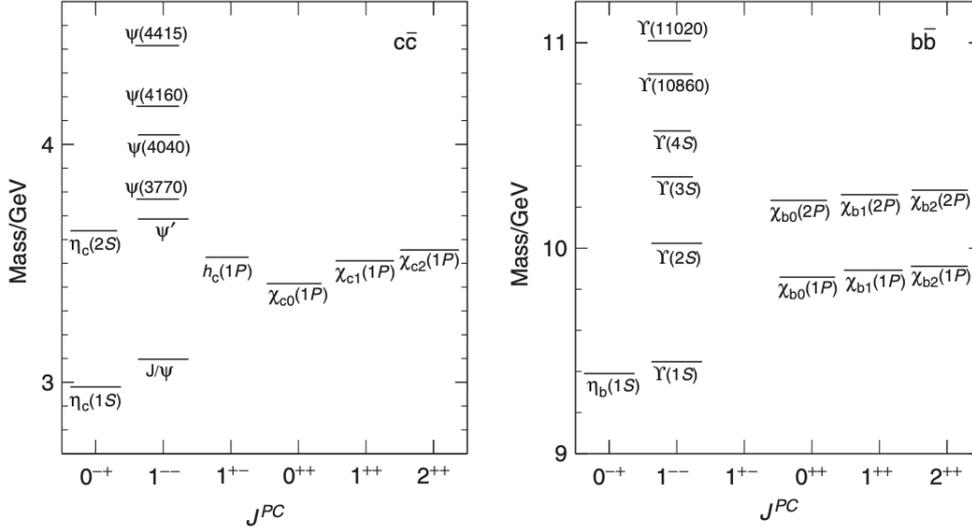


Figura 2.1. Algunos estados del charmonio ($c\bar{c}$) y botonio ($b\bar{b}$). Imagen extraída de [10].

uso habitual en la bibliografía más actual. Hay que decir que, dependiendo de la antigüedad de las distintas referencias usadas, la notación puede haber cambiado, como es el caso, por ejemplo, del estado Ψ' del charmonio en la figura 2.1 que actualmente es referido como $\Psi(2S)$ [6].

Los estados $J^{PC} = 1^{--}$ son los únicos que se generan mediante las aniquilaciones de e^-e^+ o de $\mu^-\mu^+$. El resto de niveles energéticos se observa desde las desintegraciones de otros estados excitados. Por ejemplo, en el charmonio, se estudia el decaimiento del estado $\Psi(2S)$ a través de diversos canales de desexcitación, como la producción de mesones ligeros, radiación electromagnética o la emisión de pares leptónicos. A partir de la distribución de masas invariante de los productos del decaimiento, se pueden detectar señales estadísticamente significativas de procesos que involucran la producción de estados $\chi_{cJ}(1P)$ del charmonio. Una forma común de detectar estos estados es usando *Cristall balls*, detectores que captan fotones y electrones de alta energía provenientes de la desintegración de estados excitados [1].

2.2 Modelos de potencial

2.2.1 Potencial no perturbativo

El descubrimiento del charmonio constituyó un estímulo para el desarrollo de potenciales quark-antiquark basados en propiedades de QCD, desempeñando un papel crucial en la comprensión de la espectrometría de los estados mesónicos. El charmonio, históricamente, ha sido estudiado junto al positronio (e^-e^+) debido a las similitudes que presentan. Ambos son sistemas que están compuestos por una partícula y su correspondiente antipartícula y, además, en ambos pueden despreciarse a primer orden los efectos relativistas. La principal diferencia entre el charmonio y el positronio es que sus propiedades son descritas por QCD y QED respectivamente.

Si se comparan los estados del charmonio y del positronio (figura 2.2), a pesar de la diferencia

de escala entre ambos gráficos, se observa cierta similitud. Históricamente, la notación usada para los números cuánticos principales es distinta en el charmonio ($n = n_r + 1$) y en el positronio ($n = n_r + l + 1$). Contrastando las ondas $1S$ y $2S$ de ambos se deduce que al menos a cortas distancias el potencial debe tener la misma dependencia, $1/r$. No obstante, el positronio presenta estados casi degenerados (por ejemplo, los estados $2S$ y $2P$), hecho este no observado en los estados del charmonio. Este resultado indica que el potencial de los quarkonia debería incluir algún término adicional que rompa esta degeneración, típica del potencial de Coulomb [1, 11].

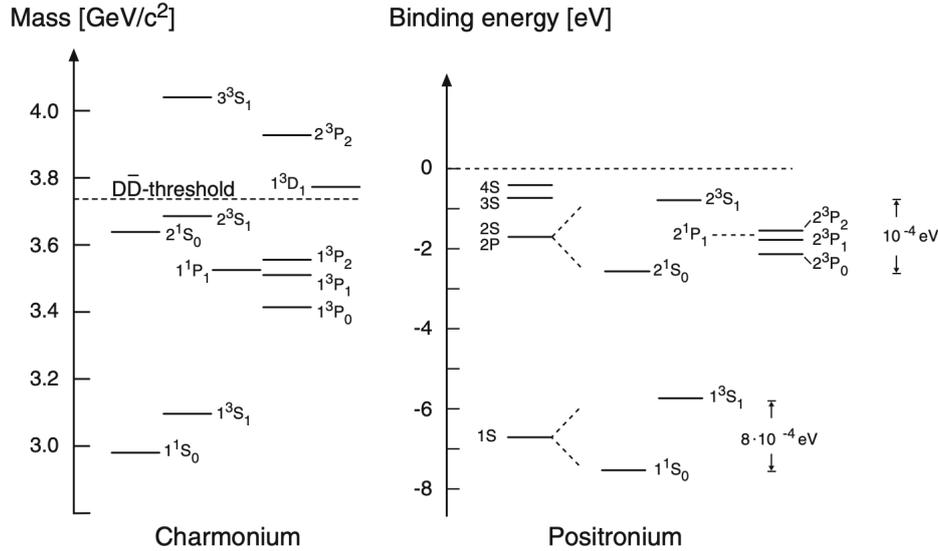


Figura 2.2. Niveles energéticos del Charmonio y Positronio. Imagen extraída de [1].

En QCD, el potencial obtenido mediante diagramas de Feynman dominantes por el intercambio de un gluón exhibe una dependencia $1/r$ a corta distancia. Los resultados de QED conducen a la misma relación por el intercambio de un fotón:

$$\text{QED} : V(r) = Q_1 Q_2 \frac{\alpha \hbar c}{r}, \quad \text{QCD} : V(r) = C \frac{\alpha_s \hbar c}{r}. \quad (2.1)$$

En estos potenciales intervienen las constantes de acoplamiento de sus respectivas teorías cuánticas, α y α_s . Estas constantes adimensionales representan la intensidad de la interacción entre partículas elementales, cuyas cargas se acoplan a los bosones mediadores de las mismas. Una consecuencia de la teoría de campos, es que dichas constantes no son tales, sino que dependen del cuadrimomento transferido $|q^2| = Q^2$. Para un mismo cambio en el valor de Q^2 , la variación cuantitativa inducida en QED es mucho más débil que en QCD [1]. Estudiando diagramas de Feynman donde intervienen gráficos con bucles, es común encontrar expresiones matemáticas que generan resultados divergentes. Pese a ello, en teorías con simetría gauge, estos ‘infinitos’ pueden ser absorbidos por procedimientos de renormalización conduciendo a una redefinición de parámetros. Específicamente, este procedimiento da lugar a una constante de acoplamiento renormalizada, también llamada *running coupling constant*, $\alpha_s(Q^2)$. La variación a primer orden

(1 bucle) puede escribirse como:

$$\alpha(Q^2) = \frac{\alpha(\mu^2)}{1 + \mathcal{Z}(Q)\beta_0 \cdot \alpha(\mu^2) \ln\left(\frac{Q^2}{\mu^2}\right)}, \quad \alpha_s(Q^2) = \frac{\alpha_s(\mu^2)}{1 + \beta_0\alpha_s(\mu^2) \ln\left(\frac{Q^2}{\mu^2}\right)}, \quad (2.2)$$

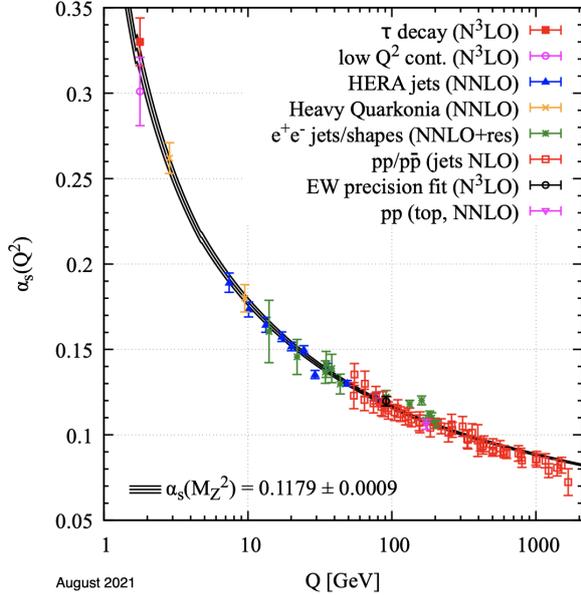


Figura 2.3. Constante de acoplamiento fuerte en función de la escala de energía Q . Imagen extraída de [6].

donde $Z(Q)$ es una función que cuantifica la contribución de cada fermión cargado de la teoría, en función de la escala de energías. La constante β_0 es distinta en cada teoría cuántica de campos; mientras que en QED tiene un valor fijo de $-1/(3\pi)$, en QCD se define como $(33 - 2n_f)/(12\pi)$ siendo n_f el número de sabores de quark activos a una escala de energía determinada. El valor de β_0 es siempre negativo en interacciones electromagnéticas, por el contrario, en interacciones fuertes es siempre positivo debido a la existencia de solo 6 sabores. Este resultado conlleva un comportamiento distinto en la *running coupling constant*. En QED, al ser $\beta_0 < 0$, la intensidad de la interacción crece con Q^2 . En cambio, con $\beta_0 > 0$, en QCD ocurre lo contrario; la intensidad disminuye a energías y cuadrimentos transferidos mayores (ver figura 2.3). Este fenómeno se llama *libertad asintótica*.

Por otro lado, en las ecuaciones (2.2), mientras que en QED comúnmente se toma la escala de referencia de baja energía, $\alpha(\mu^2 = 0) \approx 1/137$, en QCD es habitual utilizar la masa del bosón Z^0 , $\alpha_s(\mu^2 = M_Z^2) = 0.1179 \pm 0.0009$ [6].

En QCD, la contribución del potencial a cortas distancias dada por la ecuación (2.1), incorpora la constante C , que representa el factor de color. Este factor depende de las cargas de color de los quarks (o antiquarks) que intercambian el gluón, quedando fijadas por la superposición coherente característica del entorno hadrónico. La hipótesis de confinamiento de color establece que los únicos hadrones observados experimentalmente hasta la fecha, son sistemas totalmente neutros de color [1, 2, 10], esto es, singletes de color. Para el caso mesónico, dicho estado conduce a un factor de color $C = -4/3$.

En el potencial, además de esta componente (proporcional a $1/r$), debe existir un término responsable del confinamiento que domine a largas distancias. A medida que los quarks se alejan, la interacción entre ellos aumenta gradualmente, dando lugar a un tubo de flujo de color formado por gluones (manteniendo neutra la carga de color total). Pese a que esta contribución de larga distancia se ha modelado por distintos autores con potenciales tipo oscilador armónico o logarítmico [11], estudios de *Lattice QCD* confirman que la mejor descripción de la energía contenida en el tubo se obtiene a partir de un confinamiento lineal, $V(r) = Ar$. En esta

expresión, A es una constante, habitualmente referida como ‘tensión de cuerda’ y cuyo valor es aproximadamente 1 GeV/fm [7]. En resumen, el potencial que combina ambas contribuciones es el llamado potencial de Cornell, siendo el modelo de potencial que mejor describe los estados quarkonia. Este se escribe como

$$V_{\text{Cornell}}(r) = -\frac{4}{3} \frac{\alpha_s \hbar c}{r} + Ar, \quad (2.3)$$

donde el primer término domina a cortas distancias y el segundo prevalece a largas distancias y es responsable del confinamiento.

2.2.2 Correcciones perturbativas

La energía de interacción, $E^{(\text{int})}$, obtenida con el potencial de Cornell de la ecuación (2.3) y sumada con la masa de los quarks (en GeV), proporciona buenas aproximaciones a los valores experimentales recogidos en [6]. Sin embargo, este simple potencial central presenta una limitación, no es posible diferenciar los estados energéticos ni por espín ni por momento angular. Para solventar esta restricción es habitual añadir correcciones perturbativas, incluyendo términos dependientes de espín y momento angular orbital,

$$\hat{V}_{SD}(\vec{r}) = V_{SS}(\vec{r}) (2\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2) + V_{LS}(r) (\hat{L} \cdot \hat{S}) + V_T(r) \left(-\frac{1}{2} \hat{S}_{12} \right), \quad (2.4)$$

donde V_{SS} acompaña al término espín-espín, el cual diferencia los estados singlete y triplete de espín; por su parte, V_{LS} y V_T intervienen en la estructura fina de los estados quarkonia a partir de los términos espín-orbita y tensor. Este potencial se obtiene de la interacción de Breit-Fermi por el intercambio de un gluón en el límite no relativista. En unidades naturales ($\hbar = c = 1$), las componentes de cada término de la ecuación (2.4) vienen dadas por [5, 12]:

$$V_{SS}(\vec{r}) = \frac{1}{3m_q^2} \nabla^2 V_V(r) = \frac{16\pi\alpha_s}{9m_q^2} \delta(\vec{r}), \quad (2.5)$$

$$V_{LS}(r) = \frac{1}{2m_q^2 r} \left(3 \frac{dV_V}{dr} - \frac{dV_S}{dr} \right) = \frac{2\alpha_s}{m_q^2 r^3} - \frac{A}{2m_q^2 r}, \quad (2.6)$$

$$V_T(r) = \frac{1}{6m_q^2} \left(3 \frac{d^2 V_V}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{dV_V}{dr} \right) = -\frac{14\alpha_s}{9m_q^2 r^3}, \quad (2.7)$$

con V_V y V_S , los términos vector y escalar que se corresponden con el término coulombiano y de confinamiento lineal de la ecuación (2.3), respectivamente. Estas correcciones permiten una descripción más precisa de los niveles energéticos del charmonio y botonio.

En capítulo 4, nos limitamos al uso de los términos espín-espín y espín-orbita de la ecuación (2.4). Estos se añaden, mediante la de teoría de perturbaciones, a los estados de energía procedentes del potencial de Cornell simple.

Metodología

Considerando charmonio y botonio en NRQCD, podemos obtener las energías de los diferentes estados resolviendo la ecuación de Schrödinger estacionaria utilizando el potencial de Cornell. Al ser este un potencial central, podemos separar la función de onda en una parte radial y otra angular $\Psi(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$. Una vez hecha actuar la laplaciana, podemos escribir la ecuación radial reducida

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\ddot{u}_{nl}(r) + \left(V_{\text{Cornell}}(r) + \frac{\hbar^2 \cdot l(l+1)}{2\mu r^2} \right) u_{nl}(r) = E_{nl}^{(\text{int})} u_{nl}(r), \quad (3.1)$$

donde $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ es la función radial reducida y $\mu = m_q/2$ la masa reducida (siendo $m_{\bar{q}} = m_q$, la masa del quark). Los valores propios de la ecuación, $E_{nl}^{(\text{int})}$ incluyen la energía cinética y de interacción que, añadidos a la masa propia del sistema, proporcionan la energía total de nuestro modelo teórico, $E = 2m_q + E^{(\text{int})}$. Estas energías serán las funciones, dependientes del valor de los parámetros m_q , α_s y A , que utilizaremos posteriormente para minimizar las diferencias cuadráticas con los datos experimentales y, así, obtener el valor de dichos parámetros asociados a nuestro modelo NRQCD.

3.1 Adimensionalización de la ecuación de Schrödinger

Antes de resolver numéricamente la ecuación (3.1), introducimos escalas y variables adimensionales, \mathcal{E} , \tilde{x} y \tilde{A} según

$$E^{(\text{int})} = e_0 \mathcal{E}, \quad r = l_0 \tilde{x}, \quad A = \frac{e_0}{l_0} \tilde{A}, \quad (3.2)$$

donde e_0 y l_0 son parámetros con dimensiones de energía y longitud, respectivamente. Teniendo en cuenta la definición de $V_{\text{Cornell}}(r)$ dada en la ecuación (2.3) e introduciendo las expresiones

anteriores, la ecuación de Schrödinger queda

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(\tilde{x})}{l_0^2 d\tilde{x}^2} = \left(-\frac{4}{3} \frac{\alpha_s \hbar c}{l_0 \tilde{x}} + \tilde{A} \frac{e_0}{l_0} \cdot l_0 \tilde{x} + \frac{\hbar^2 \cdot l(l+1)}{2\mu l_0^2 \tilde{x}^2} - e_0 \mathcal{E} \right) u(\tilde{x}). \quad (3.3)$$

Simplificando y dividiendo ambos lados de la ecuación por e_0 :

$$\frac{\hbar^2}{2\mu l_0^2 e_0} \frac{d^2 u(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} = \left(-\frac{4}{3} \frac{\alpha_s \hbar c}{l_0 e_0 \tilde{x}} + \tilde{A} \tilde{x} + \frac{\hbar^2}{2\mu l_0^2 e_0} \frac{l(l+1)}{\tilde{x}^2} - \mathcal{E} \right) u(\tilde{x}). \quad (3.4)$$

Dado que hay dos parámetros libres, e_0 y l_0 , podemos imponer dos condiciones sobre los coeficientes de la ecuación. En aras de simplicidad, igualamos a 1 las fracciones $\hbar^2/(\mu l_0^2 e_0)$ y $\alpha_s \hbar c/(l_0 e_0)$, lo que implica:

$$e_0 = \mu c^2 \alpha_s^2, \quad l_0 = \frac{\hbar}{\alpha_s \mu c}. \quad (3.5)$$

Sustituyendo estos resultados en la ecuación (3.4) se obtiene:

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 u(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} = \left(-\frac{4}{3} \frac{1}{\tilde{x}} + \tilde{A} \tilde{x} + \frac{l(l+1)}{2\tilde{x}^2} - \mathcal{E} \right) u(\tilde{x}), \quad (3.6)$$

que es la ecuación de Schrödinger adimensionalizada, donde podemos definir un potencial efectivo

$$V_{\text{eff}}(\tilde{x}) = -\frac{4}{3} \frac{1}{\tilde{x}} + \tilde{A} \tilde{x} + \frac{l(l+1)}{2\tilde{x}^2}. \quad (3.7)$$

En la siguiente sección hacemos uso de la ecuación (3.6) para calcular los valores de \mathcal{E} en función del único parámetro restante, \tilde{A} . Una vez obtenidas las soluciones $\mathcal{E}(\tilde{A})$ para cada uno de los niveles y determinadas las escalas de energía y longitud, las energías y funciones radiales se obtendrán como $E = 2m_q + e_0 \mathcal{E}(\tilde{A})$ y $u(r) = \frac{1}{\sqrt{l_0}} u(\tilde{x})$. En aras de la simplicidad, en el resto de la memoria se escribirá x en lugar de \tilde{x} .

3.2 Resolución numérica

El algoritmo numérico que vamos a utilizar para determinar las soluciones de la ecuación (3.6) es el método de Numerov, cuyo error es $\mathcal{O}(h^6)$. Este es un algoritmo eficiente para resolver ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden que no incluyan término en primera derivada.

La ecuación adimensionalizada (3.6) en su versión discreta se puede reescribir

$$\ddot{u}_i = g_i u_i, \quad \text{con} \quad g_i = 2(V_{\text{eff}}(x_i) - \mathcal{E}), \quad (3.8)$$

donde los puntos sobre la función u representan derivadas espaciales respecto de la variable adimensional. El enfoque principal de este algoritmo consiste en discretizar el dominio en una malla espacial y utilizar diferencias finitas centradas para aproximar la segunda derivada,

$$\ddot{u}_i \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}, \quad (3.9)$$

siendo h el paso de integración. Luego, se realiza una expansión de Taylor de las componentes u_{i+1} , u_{i-1} y u_i hasta quinto orden en h y, teniendo en cuenta la ecuación (3.8) se obtiene otra expresión para \ddot{u}_i . Igualando esta expresión con la dada en la ecuación (3.9), tras reagrupar términos se llega a

$$\left(1 - \frac{h^2}{12}g_{i+1}\right)u_{i+1} - 2\left(1 + \frac{5h^2}{12}g_i\right)u_i + \left(1 - \frac{h^2}{12}g_{i-1}\right)u_{i-1} = 0 + \mathcal{O}(h^6). \quad (3.10)$$

Para obtener autovalores precisos, es necesario integrar esta ecuación hacia la derecha y hacia la izquierda, aislando u_{i+1} y u_{i-1} , respectivamente, hasta lograr la continuidad de la función y su primera derivada en un punto intermedio, x_r . Este se conoce como el método de *matching*, donde, también se tienen que cumplir las condiciones de contorno e imponer que la función de onda tenga el número de nodos correspondiente a cada estado energético. Es habitual elegir como punto de empalme el punto de malla más cercano a cumplir la condición $g(x_r) = 0$ por la derecha, que define el punto de retorno clásico.

El potencial efectivo de la ecuación (3.7) presenta una divergencia cuando $x \rightarrow 0$. Con el fin de obtener una mejor precisión en nuestro cálculo, en lugar de usar una malla equiespaciada, aplicaremos un paso no constante que aporte una mayor densidad de puntos en zonas cercanas al punto singular en $x = 0$. Para ello, se realiza el siguiente cambio en la variable independiente

$$\xi = a \ln x + bx \implies x = e^{(\xi - bx)/a}, \quad (3.11)$$

con a y b constantes reales. En la ecuación anterior, ξ define una malla auxiliar con paso constante que se extiende desde $\xi_0 \equiv \xi(x_0)$ hasta $\xi_N \equiv \xi(x_N)$, siendo x_0 lo suficientemente cercano a la singularidad ($x_0 = 10^{-16}$) y x_N suficientemente grande tal que $x_r < x_N$, con N el número total de puntos. Para cada valor de ξ se resuelve la ecuación no lineal (3.11) mediante el método de *Newton Raphson*, lo que proporciona una malla $\{x_i\}$ con puntos no equiespaciados. Las constantes a y b regulan la cantidad de puntos cerca y lejos de la singularidad. En la figura 3.1 puede observarse la densidad de puntos variable tomando, como ejemplo, $a = 0.5$ y $b = 1$ para cincuenta puntos de malla.

Con este cambio de variable la segunda derivada de la ecuación (3.8) se reescribe utilizando la regla de la cadena como:

$$\frac{du}{dx} = \frac{d\xi}{dx} \frac{du}{d\xi} = \omega(x) \frac{du}{d\xi}, \quad (3.12)$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \omega^2(x) \frac{d^2u}{d\xi^2} + \frac{d\omega(x)}{dx} \frac{du}{d\xi}, \quad (3.13)$$

siendo $\omega(x) = (a + bx)/x$ la derivada de ξ respecto de x . La nueva definición de la segunda derivada de u (ecuación (3.13)) presenta derivadas primeras que son incompatibles con el formalismo de Numerov de la ecuación (3.9). Por ello, se realiza un cambio en la variable dependiente:

$$u = f\phi, \quad (3.14)$$

siendo f y ϕ funciones reales y eligiendo f tal que elimine la influencia de las primeras derivadas.

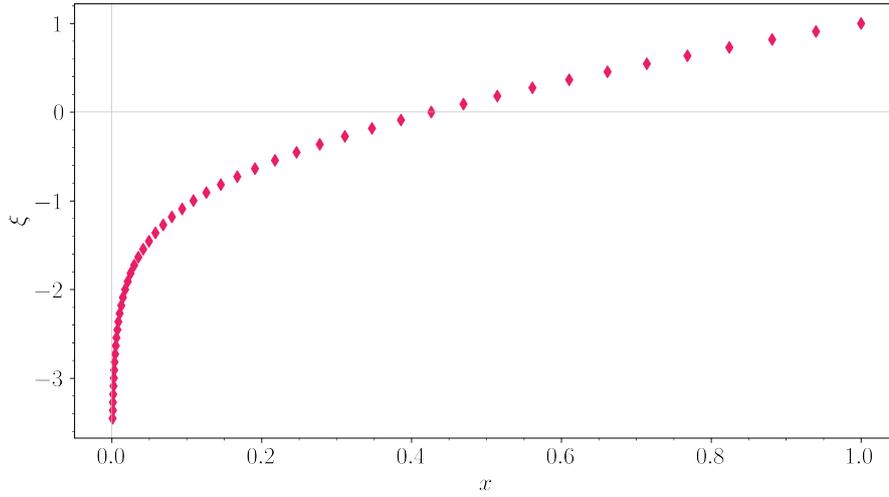


Figura 3.1. Dependencia de ξ con x dada en la ecuación (3.11). Se ha utilizado $x_N = 1$ y $N = 50$. Con el propósito de lograr una representación visual más clara, se utiliza $x_0 = 0.001$ en esta imagen.

Con este fin, se calcula la segunda derivada respecto de x de la ecuación anterior, teniendo en cuenta las ecuaciones (3.12) y (3.13). Antes cabe mencionar que las derivadas respecto x se denotan con puntos, mientras que aquellas que son respecto de ξ se marcan con primas. Así, se obtiene

$$\ddot{u} = f\ddot{\phi} + 2\dot{f}\dot{\phi} + \ddot{f}\phi = f(\omega^2\phi'' + \dot{\omega}\phi') + 2\dot{f}\omega\phi' + \ddot{f}\phi = f\omega^2\phi'' + (f\dot{\omega} + 2\dot{f}\omega)\phi' + \ddot{f}\phi. \quad (3.15)$$

Agrupando los coeficientes según el orden de las derivadas de ϕ , se consigue eliminar ϕ' imponiendo $f\dot{\omega} + 2\dot{f}\omega = 0$, es decir

$$\frac{1}{f} \frac{df}{dx} = -\frac{1}{2\omega} \frac{d\omega}{dx} \implies f = \frac{\mathcal{C}}{\sqrt{\omega}}, \quad \forall \mathcal{C} \in \mathbb{R}. \quad (3.16)$$

Por simplicidad se escoge $\mathcal{C} = 1$. Entonces, introduciendo $f = 1/\sqrt{\omega}$ en las ecuaciones (3.14) y (3.15) se tiene

$$u = \frac{\phi}{\sqrt{\omega}}, \quad \ddot{u} = \omega^{3/2}\phi'' - \frac{1}{2} \left(\frac{\omega\ddot{\omega} - \frac{3}{2}\dot{\omega}^2}{\omega^{5/2}} \right) \phi. \quad (3.17)$$

Sustituyendo estas expresiones en la ecuación (3.8) e incorporando la función ω y sus derivadas, se llega a

$$\phi'' = G\phi \quad \text{con} \quad G(x) = \frac{x^2}{(a+bx)^2} \left(g(x) + \frac{a(a+4bx)}{4x^2(a+bx)^2} \right), \quad (3.18)$$

que es la ecuación cuya versión discreta resolveremos numéricamente con el método de Numerov. En la integración hacia delante, necesitamos dos valores iniciales para arrancar la recurrencia. Estos son $\phi_0 = 10^{-8}$, irrelevante pues finalmente quedará fijado por la condición de normalización y ϕ_1 , que podemos relacionar con ϕ_0 a través del comportamiento asintótico (en $r \rightarrow 0$) para potenciales centrales en 3D, *i.e.* $u(r) \approx C r^{l+1}$. Trasladado a nuestra función, tenemos $\phi_1 = \phi_0 \sqrt{\omega_1/\omega_0} (x_1/x_0)^{l+1}$.

Por otro lado, los valores iniciales para la integración hacia atrás son $\phi_N = 0$ y $\phi_{N-1} = (-1)^{n_r} \cdot 10^{-6}$, siendo n_r el número de nodos de la función de onda. El valor de $\phi_N = 0$ incorpora la condición de contorno para estados ligados, mientras que el valor absoluto de ϕ_{N-1} es de nuevo irrelevante pues quedará fijado por la condición de normalización, representada por la siguiente integral

$$1 = \int_0^\infty x^2 R_{nl}^2 dx = \int_0^\infty u_{nl}^2 dx = \int_{\xi_0}^{\xi_\infty} \left(\frac{\phi}{\sqrt{\omega}} \right)^2 \frac{d\xi}{\omega} = \int_{\xi_0}^{\xi_\infty} \left(\frac{\phi}{\omega} \right)^2 d\xi. \quad (3.19)$$

El último punto de la malla radial, $\xi_N \approx \xi_\infty$ debe encontrarse suficientemente alejado del punto de retorno clásico, a fin de no comprimir las funciones de onda y modificar el comportamiento asintótico.

3.2.1 Test del modelo numérico

Con el objetivo de verificar la efectividad del algoritmo de Numerov, se lleva a cabo un ejemplo que involucra resultados analíticos bien conocidos, los estados energéticos y las funciones de onda del electrón del átomo de hidrógeno. Este sistema se describe mediante el potencial de Coulomb

$$V(r) = -\frac{\alpha\hbar c}{r} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3.20)$$

que a partir la ecuación de Schrödinger proporciona los siguientes autovalores

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{a_0} = -\frac{1}{2n^2} \mathcal{H}, \quad (3.21)$$

siendo a_0 el radio de Bohr, $\mathcal{H} = m_e c^2 \alpha^2 \approx 27.21$ eV la unidad de energía (Hartree) y n el número cuántico principal. La expresión analítica para la parte radial de la función de onda viene dada por

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right), \quad (3.22)$$

donde L_{n-l-1}^{2l+1} es la función asociada de Laguerre.

En el ejemplo que se expone en la figura 3.2 observamos como las funciones radiales numéricas solapan con las exactas tanto para las ondas S , como para las P . Además, la energía obtenida en cada caso (situadas en las leyendas de las imágenes) es muy similar a las que se obtienen con la ecuación (3.21).

3.3 Estimación de parámetros por minimización de χ^2

Como ya se ha mencionado en el capítulo 1, el objetivo de este trabajo es obtener los valores de la masa de los quarks, m_q con $q = c, b$; la constante de acoplamiento, α_s , y la intensidad del confinamiento, A , que minimizan la diferencia entre las energías calculadas numéricamente, $E^{(\text{teo})}$, y las experimentales del PDG [6], $E^{(\text{exp})}$. Para cuantificar esta diferencia se utiliza la

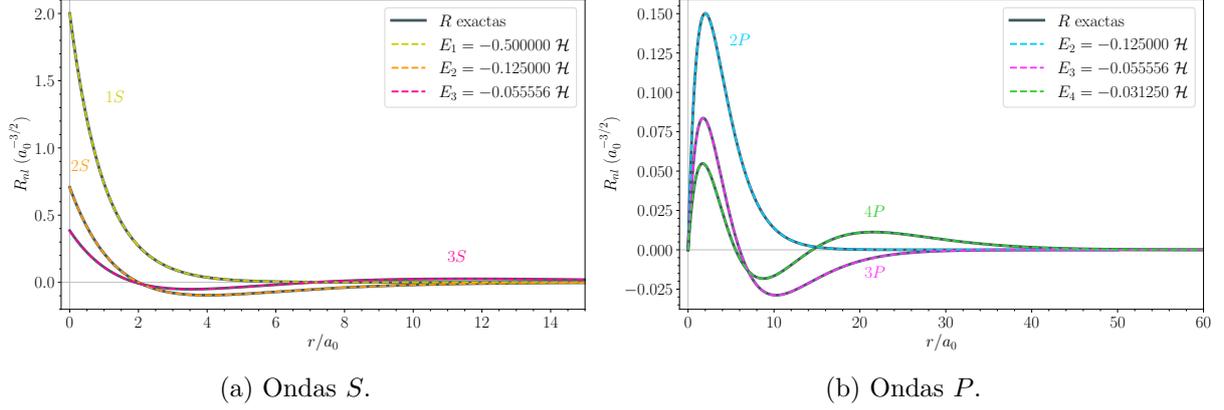


Figura 3.2. Comparación de las funciones radiales numéricas (líneas discontinuas) y exactas (línea continua) para algunos niveles del átomo de hidrógeno. Para la resolución numérica se ha utilizado $N = 200$.

siguiente función [13]

$$\chi^2(\vec{\alpha}) = \sum_{I=1}^n w_I \left(E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}) - E_I^{(\text{exp})} \right)^2. \quad (3.23)$$

Esta función cuantifica las diferencias cuadráticas (o residuos) entre las energías del modelo teórico y los valores experimentales. En general, es habitual el uso de factores peso dependientes de la precisión experimental de cada medida, $w_I = 1/(\sigma_I^{\text{exp}})^2$. Sin embargo, en algunos casos estos errores difieren en varios órdenes de magnitud entre los distintos estados. Esto sucede, con el estado del charmonio J/ψ que tiene un error de $6 \cdot 10^{-6}$ GeV, mientras que, por ejemplo, el estado $\psi(4040)$ tiene una incertidumbre de 10^{-3} GeV. Estas grandes diferencias provocan que, al minimizar la suma de residuos, los estados con mayor precisión dominen el cálculo y los que tienen poca precisión sean prácticamente irrelevantes. Por este motivo hemos optado por realizar un ajuste sin pesos, es decir tomamos $w_I = 1/n$, con n el número de estados usados en el ajuste. Donde sí se han tenido en cuenta los diferentes errores experimentales es en la propagación al error en los parámetros del modelo (véase Apéndice A).

El vector de parámetros $\vec{\alpha}$, del cual depende χ^2 , viene dado por $\vec{\alpha} = (m_q, e_0, \tilde{A})$. Nuestro modelo viene dado por $E^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}) = 2m_q + e_0 \mathcal{E}(\tilde{A})$, donde cabe recordar que e_0 es proporcional a m_q y α_s (ecuación (3.5)). Por otro lado, $\mathcal{E}(\tilde{A})$ es la energía de interacción que se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger por el método de Numerov descrito en la sección anterior. Entonces, la función χ^2 desarrollada tiene siguiente forma

$$\chi^2(\vec{\alpha}) = \frac{1}{n} \sum_{I=1}^n \left[2m_q + e_0 \mathcal{E}_I(\tilde{A}) - E_I^{(\text{exp})} \right]^2. \quad (3.24)$$

Al tratarse de una función no lineal, para encontrar el mínimo de la función y determinar los parámetros m_q , e_0 y \tilde{A} es útil proceder iterativamente, linealizando el problema. Partiendo del desarrollo de Taylor

$$\chi^2(\vec{\alpha}) = \chi^2(\vec{\alpha}^{(i)}) + \sum_j \frac{\partial \chi^2(\vec{\alpha}^{(i)})}{\partial \alpha_j} (\alpha_j - \alpha_j^{(i)}) + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \frac{\partial^2 \chi^2(\vec{\alpha}^{(i)})}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k} (\alpha_j - \alpha_j^{(i)}) (\alpha_k - \alpha_k^{(i)}) + \dots, \quad (3.25)$$

donde el superíndice hace referencia al valor de los parámetros en la iteración anterior, el vector $\vec{\alpha}$ que minimiza nuestra función debe satisfacer [13]

$$\nabla_j \chi^2(\vec{\alpha}) = \nabla_j \chi^2(\vec{\alpha}^{(i)}) + \sum_k \frac{\partial^2 \chi^2(\vec{\alpha}^{(i)})}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k} (\alpha_k - \alpha_k^{(i)}) = 0. \quad (3.26)$$

Definiendo $\delta \alpha_k = (\alpha_k - \alpha_k^{(i)})$ y teniendo en cuenta que las segundas derivadas de χ^2 constituyen la matriz Hessiana \mathcal{H}_{jk} , se tiene

$$\mathcal{H}_{jk}(\vec{\alpha}^{(i)}) \delta \alpha_k = -\nabla_j \chi^2(\vec{\alpha}^{(i)}), \quad (3.27)$$

que es un sistema de ecuaciones lineales cuya solución iterativa determina el valor de α_k . Las expresiones generales del gradiente y la matriz Hessiana usando la ecuación (3.24) resultan

$$\nabla_j \chi^2(\vec{\alpha}^{(i)}) = \frac{\partial \chi^2}{\partial \alpha_j} = \frac{2}{n} \sum_I \left(E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^{(i)}) - E_I^{(\text{exp})} \right) \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^{(i)})}{\partial \alpha_j}, \quad (3.28)$$

$$\mathcal{H}_{jk}(\vec{\alpha}^{(i)}) = \frac{\partial^2 \chi^2(\vec{\alpha}^{(i)})}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k} = \frac{2}{n} \sum_I \left[\left(E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^{(i)}) - E_I^{(\text{exp})} \right) \frac{\partial^2 E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^{(i)})}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k} + \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^{(i)})}{\partial \alpha_j} \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^{(i)})}{\partial \alpha_k} \right]. \quad (3.29)$$

Gracias a la adimensionalización realizada en la sección 3.1, los parámetros m_q y e_0 no intervienen en el cálculo de la energía de interacción, $\mathcal{E}(\tilde{A})$. El hecho de tener un único parámetro no trivial, \tilde{A} reduce considerablemente el tiempo de cálculo. Las derivadas de $E^{(\text{teo})}$ respecto a los parámetros triviales (m_q y e_0) se pueden calcular analíticamente. Sin embargo, las derivadas respecto de \tilde{A} se calculan numéricamente utilizando fórmulas centradas

$$\frac{\partial \mathcal{E}_I(\tilde{A})}{\partial \tilde{A}} = \frac{\mathcal{E}_I(\tilde{A} + h) - \mathcal{E}_I(\tilde{A} - h)}{2h}, \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_I(\tilde{A})}{\partial \tilde{A}^2} = \frac{\mathcal{E}_I(\tilde{A} + h) - 2\mathcal{E}_I(\tilde{A}) + \mathcal{E}_I(\tilde{A} - h)}{h^2}. \quad (3.31)$$

Ajuste de parámetros y predicción de estados energéticos

A continuación, se muestran los resultados obtenidos al aplicar la metodología descrita en el capítulo 3 en diferentes casos. En la sección 4.1, se determina la estructura gruesa de un conjunto de estados y posteriormente, se aplican correcciones perturbativas para distinguirlos en función de su estructura fina. En la sección 4.2, estas correcciones se incluyen en un nuevo cálculo de χ^2 , lo que proporciona directamente la estructura fina del espectro.

4.1 Espectro de los estados quarkonia con correcciones perturbativas

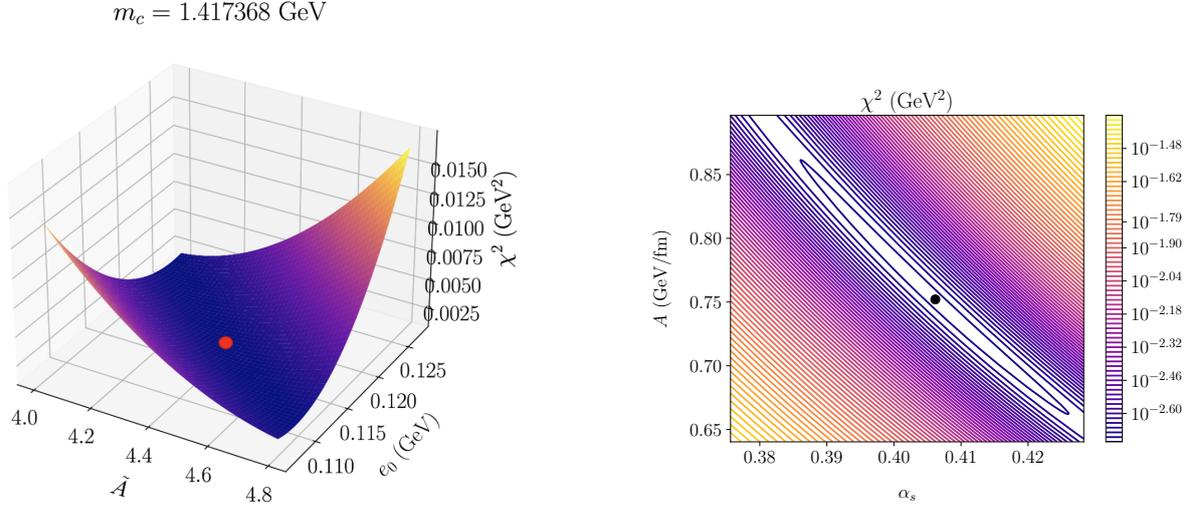
En esta sección, se eligen algunos estados del charmonio y del botonio para hacer el ajuste de parámetros, $\vec{\alpha} = (m_q, e_0, \tilde{A})$. El conjunto de estados escogido lo integran los primeros que fueron descubiertos para ambos mesones, es decir, los estados n^3S_1 con $n = 1, 2, 3$ y los tres primeros estados 1^3P_J con $J = 0, 1, 2$. El objetivo de esta sección es utilizar los parámetros que resultan del ajuste de estos seis estados para determinar luego las energías de otros estados.

	m_q (GeV)	e_0 (GeV)	\tilde{A}	χ^2 (GeV ²)	l_0 (fm)
$c\bar{c}$	1.4175 ± 0.0010	0.1170 ± 0.0007	4.40 ± 0.05	0.001960	0.6852 ± 0.0019
$b\bar{b}$	4.7170 ± 0.0006	0.2414 ± 0.0008	1.118 ± 0.007	0.000296	0.2615 ± 0.0016

Tabla 4.1. Resultados de la minimización de la función χ^2 para el charmonio, $c\bar{c}$, y el botonio, $b\bar{b}$. El parámetro dimensional l_0 se obtiene indirectamente del ajuste y es útil para futuros cálculos.

Los valores de m_q , e_0 y \tilde{A} obtenidos utilizando los estados 1^3S_1 , 2^3S_1 , 3^3S_1 y 1^3P_J con $J = 0, 1, 2$, tanto para el charmonio como el botonio, se muestran en la tabla 4.1. Por conveniencia de notación, a partir de esta sección utilizaremos $m_q = m_q c^2$. Antes de hacer uso de estos parámetros para estimar las energías de otros estados, se ha comprobado la unicidad del mínimo

de la función χ^2 . En la figura 4.1, se muestra la dependencia de χ^2 con los parámetros e_0 y \tilde{A} dejando la masa del quark constante. En ambas figuras se aprecia como solo existe un mínimo, cuyas coordenadas coinciden con los valores de ajuste. La constante de acoplamiento y y



(a) Representación 3D de χ^2 según los parámetros \tilde{A} y e_0 . El punto mínimo de color rojo es $(e_0, \tilde{A}, \chi^2) = (0.117 \text{ GeV}, 0.401, 0.00196 \text{ GeV}^2)$.

(b) Variación de χ^2 con los parámetros A y α_s . El punto mínimo de color negro es $(\alpha_s, A, \chi^2) = (0.406, 0.752 \text{ GeV}/\text{fm}, 0.00196 \text{ GeV}^2)$.

Figura 4.1. Dependencia de la función χ^2 con los parámetros para el charmonio.

la relacionada con el confinamiento a grandes distancias, se obtienen aplicando $\alpha_s = \sqrt{2e_0/m_q}$ y $A = \tilde{A} \cdot e_0/l_0$, sus valores se muestran en la siguiente tabla

	m_q (GeV)	α_s	A (GeV/fm)
$c\bar{c}$	1.4175 ± 0.0010	0.4063 ± 0.0012	0.751 ± 0.011
$b\bar{b}$	4.7170 ± 0.0006	0.3200 ± 0.0005	1.031 ± 0.007

Tabla 4.2. Parámetros de QCD: la masa de los quarks, m_q , la constante de acoplamiento, α_s y la tensión de cuerda, A , obtenidos a partir de la tabla 4.1.

En los resultados de la tabla 4.2, las masas resultantes de ambos quarks son mayores a las proporcionadas por PDG [6]: $m_c = 1.27 \pm 0.02 \text{ GeV}$ y $m_b = 4.18 \pm 0.03 \text{ GeV}$. Cálculos de distintos esquemas de renormalización [14] obtienen resultados muy similares a estos. Sin embargo, en estudios no perturbativos de *Lattice* QCD [6] se considera que las masas de estos quarks son respectivamente 1.5 GeV y 4.5 GeV.

La constante de acoplamiento para el charmonio es ligeramente mayor que en el botonio, lo cual es consistente con la libertad asintótica de QCD, comentada en la sección 2.2. De hecho, la variación y el valor concreto de α_s varía según el orden de las series perturbativas y el esquema de renormalización que se use [15], aunque para los estados quarkonia se estima que debería oscilar entre 0.19 y 0.4. Consistente con los resultados de la tabla 4.2.

Por otro lado, la tensión de cuerda, que representa la densidad de energía almacenada en el tubo de color, es mayor en el botonio en comparación con el charmonio. Esto implica que en la

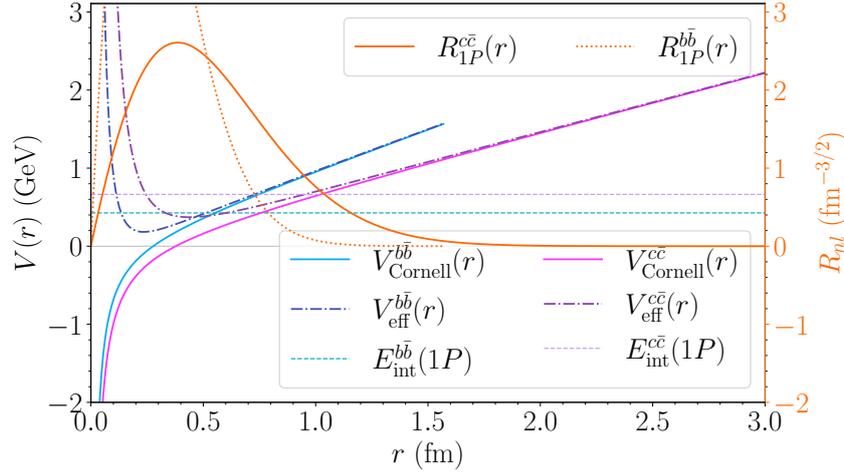


Figura 4.2. Potencial de Cornell para los estados $c\bar{c}$ y $b\bar{b}$ con los parámetros de la tabla 4.2. También se muestra un ejemplo del potencial efectivo y la energía de interacción de las ondas $1P$. Además, se grafican las funciones de onda radiales para ambos mesones en el eje de la derecha.

parte lineal del potencial, el botonio tendrá una pendiente mayor, tal y como se muestra en la figura 4.2. Además y como consecuencia de lo anterior, para este mesón las funciones radiales se extienden hasta un r_{\max} menor a las del charmonio.

Los resultados de la tabla 4.2 son coherentes con otros trabajos que siguen un procedimiento similar. Por ejemplo, en la referencia [16] se obtiene: $(m_c, \alpha_s, A) = (1.406 \text{ GeV}, 0.491, 0.8311 \text{ GeV/fm})$ y $(m_b, \alpha_s, A) = (4.733 \text{ GeV}, 0.356, 1.049 \text{ GeV/fm})$ para el charmonio y el botonio, respectivamente.

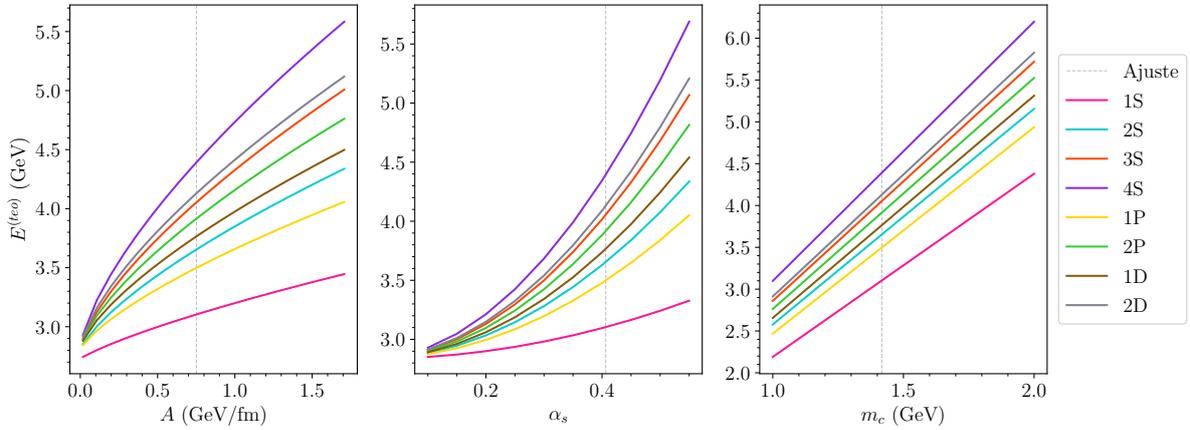


Figura 4.3. Comportamiento de la energía teórica al variar cada uno de los parámetros de la tabla 4.2 para el charmonio. La energía teórica es $E^{(\text{teo})} = 2m_q + e_0\mathcal{E}(\tilde{A})$.

En el gráfico de la izquierda de la figura 4.3 se observa que en $A = 0$ los niveles energéticos presentan un valor de $E^{(\text{teo})}$ degenerado, ya que este punto corresponde al potencial de Coulomb puro. A medida que A aumenta, se observa un comportamiento aproximadamente lineal, a partir de 0.5 GeV/fm . En la imagen de la derecha, en la que se varía la masa del quark, todos los estados muestran una relación lineal, al igual que en la tensión de cuerda, donde la pendiente es más pronunciada para aquellos estados con energías más altas. En cuanto a la dependencia con la constante de acoplamiento (gráfico central), se observa una relación cuadrática, ya que $E^{(\text{teo})}$

depende de α_s a través de e_0 (ver ecuación (3.5)). En resumen, un pequeño cambio de estos parámetros (manteniendo constantes el resto) afecta en distinta medida a los diferentes niveles de energía. Este comportamiento también se extiende al botonio.

A continuación, con el objetivo de analizar la rotura de degeneración de los estados según sus diferentes números cuánticos, se aplican correcciones perturbativas, utilizando las ecuaciones (2.5) y (2.6). En otras palabras, se añade a la energía los siguientes términos

$$E_{SD}(\vec{\alpha}) = E^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}) + \langle V_{SS}(\vec{r}) (2\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2) \rangle + \langle V_{LS}(r)(\hat{L} \cdot \hat{S}) \rangle. \quad (4.1)$$

Los valores esperados de estas correcciones vienen dados por

$$\langle V_{SS}(\vec{r}) (2\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2) \rangle = \frac{2\alpha_s(\hbar c)^3}{9m_q^2} \cdot [2S(S+1) - 3]R_{nl}^2(r=0), \quad (4.2)$$

$$\langle V_{LS}(r)(\hat{L} \cdot \hat{S}) \rangle = \frac{1}{2}(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \left[\frac{2\alpha_s \cdot (\hbar c)^3}{m_q^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle - \frac{A \cdot (\hbar c)^2}{2m_q^2} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \right], \quad (4.3)$$

donde

$$\left\langle \frac{1}{r^n} \right\rangle = \int_0^\infty dr \frac{r^2 R_{nl}^2(r)}{r^n} = l_0^{-n} \int_{\xi_0}^{\xi_\infty} d\xi \frac{u_{nl}^2(x)}{\omega \cdot x^n}, \quad (4.4)$$

recordando que x es una variable adimensional que depende de ξ y que l_0 aporta las unidades a la integral (secciones 3.1 y 3.2).

La corrección espín-espín, al ser proporcional a $R_{nl}(r=0)$ (ecuación (4.2)), solo afecta a las ondas S, ya que son las únicas cuya función de onda no se anula en el origen, tal y como se observa en las figuras 4.6a y 4.6b. Por otra parte, el término espín-órbita de la ecuación (4.3) no afecta a estas ondas S porque en estas $(\hat{L} \cdot \hat{S})$ se anula. Estas perturbaciones aplicadas a los espectros de los estados quarkonia se observan en las figuras 4.4 y 4.5.

En estas figuras, cada estado presenta tres líneas de colores distintos: la gris representa los valores experimentales [6]; la azul, los estados $E^{(\text{teo})}$ obtenidos mediante el potencial de Cornell y, la rosa los valores de E_{SD} calculados a partir de la ecuación (4.1). Además, los estados con un punto gris son los usados en el ajuste de χ^2 .

En el charmonio (figura 4.4), los estados $E^{(\text{teo})}$ que han intervenido en el ajuste (línea azul con punto) se aproximan al valor experimental para las ondas S. Sin embargo, para los estados $1P$, al haber degeneración del momento angular J , el potencial de Cornell por sí solo no es capaz de diferenciar los tres estados, dando como resultado para la energía un valor intermedio. El mismo comportamiento se observa para el botonio, figura 4.5. Para este último, en general, los valores teóricos se asemejan más a los experimentales debido a que, tal y como muestra la tabla 4.1, los resultados de χ^2 para el botonio son un orden de magnitud inferior a los del charmonio. En concreto, puesto que los niveles energéticos experimentales de los estados $1P$ presentan poca varianza, el valor medio obtenido ajusta bien el promedio experimental. Además, consistentemente con la figura 4.5 y la tabla 4.1, un mejor ajuste conlleva un menor valor de χ^2 y esto, a su vez, una reducción de las incertidumbres de los parámetros.

La estimación de los demás estados tanto para el charmonio como para el botonio (líneas azules sin puntos), es razonable considerando las limitaciones del potencial de Cornell. Sin embargo, para el estado 1^1S_0 el resultado teórico se aparta bastante del experimental, ya que a diferencia de los estados $1P$, no se ha calculado un promedio entre el singlete y el triplete en $1S$. Otros casos como, por ejemplo, los estados 2^3D_1 y 1^3D_2 en el charmonio, y los estados 4^3S_1 y 5^3S_1 del botonio, también muestran una discrepancia entre los valores teóricos y experimentales mayor al resto.

Al examinar las líneas correspondientes a las correcciones perturbativas (representadas en color rosa), se observa que muchas de ellas se acercan al valor experimental o incluso se sitúan justo por encima de él, como es el caso del estado 1^1S_0 . Sin embargo, esto no ocurre en todos los casos. En las figuras 4.4 y 4.5, los estados 2^1S_0 y 1^3S_1 , que presentaban buenos *fits* con la energía teórica $E^{(teo)}(\vec{\alpha})$, se han desplazado considerablemente del valor experimental tras aplicar las correcciones. En otros casos, la diferencia entre las rayas azules y las rosas es nula, como se observa en las ondas D de los dos quarkonia, donde la contribución espín-orbita es muy pequeña comparada con la de las ondas P . Se espera que al incluir el término tensor de la ecuación (2.4) (que no se ha considerado en esta memoria) se mejore el ajuste de las ondas D .

Para acabar esta sección, en la tabla B.3 se ha estimado la energía cinética y la velocidad relativa, $\beta \equiv v/c$, para un conjunto de estados de ambos mesones, usando los parámetros de la tabla 4.2. Con ello se puede obtener una estimación de β para cada quark. Si $\beta_q = \beta_{rel}/2$, entonces se deduce de nuestros datos que $0.293 \lesssim \beta_c \lesssim 0.327$ y $0.177 \lesssim \beta_b \lesssim 0.195$ para el charmonio y el botonio, respectivamente. Estos resultados son similares a las β 's presentadas en la sección 2.1. Como se había comentado, estas velocidades medias son lo suficientemente bajas para describirlos como sistemas no relativistas a primer orden.

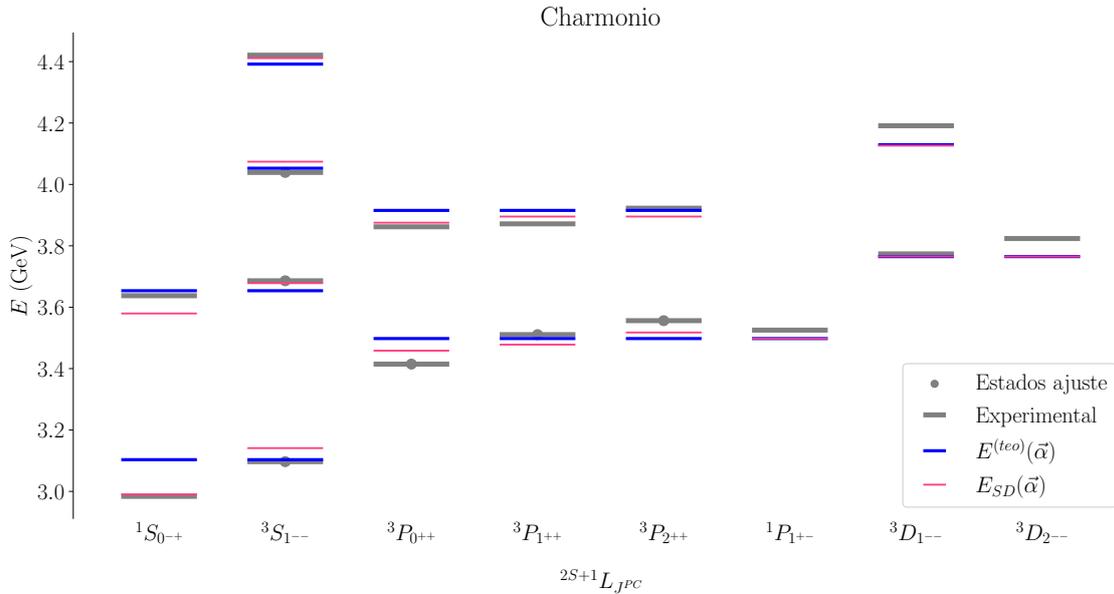


Figura 4.4. Espectro del charmonio calculado con los parámetros de la tabla 4.2. Los valores numéricos de los niveles energéticos se pueden encontrar en la tercera y cuarta columna de la tabla B.1.

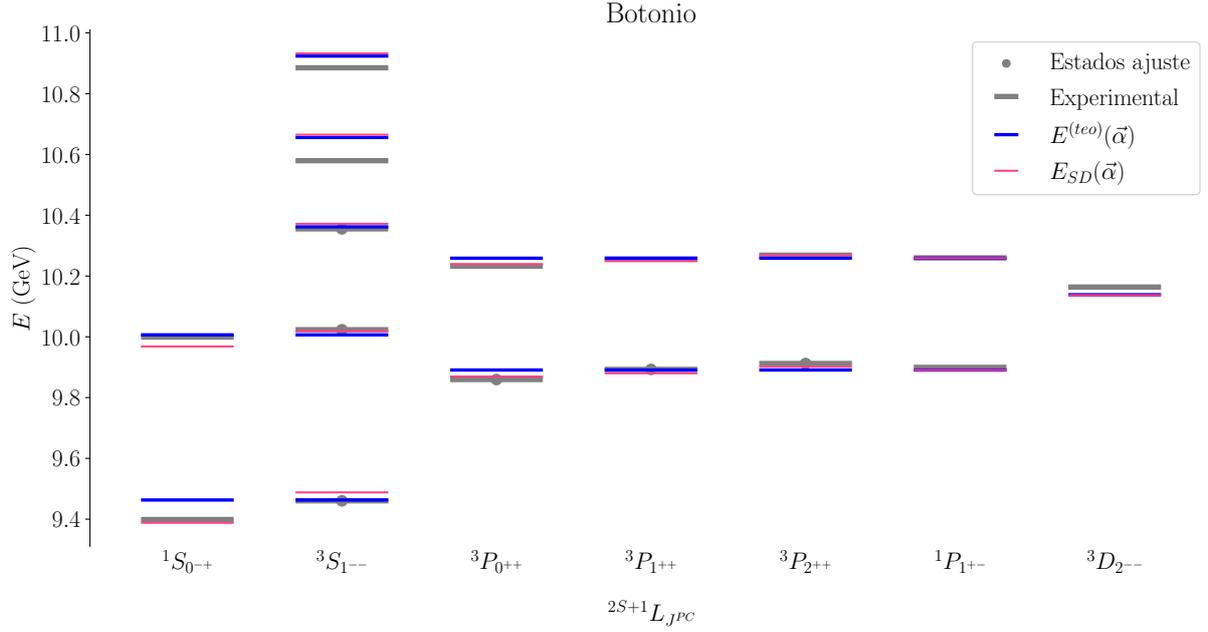


Figura 4.5. Espectro del botonio calculado con los parámetros de la tabla 4.2. Los valores numéricos de las energías se encuentran en la tercera y cuarta columna de la tabla B.2.

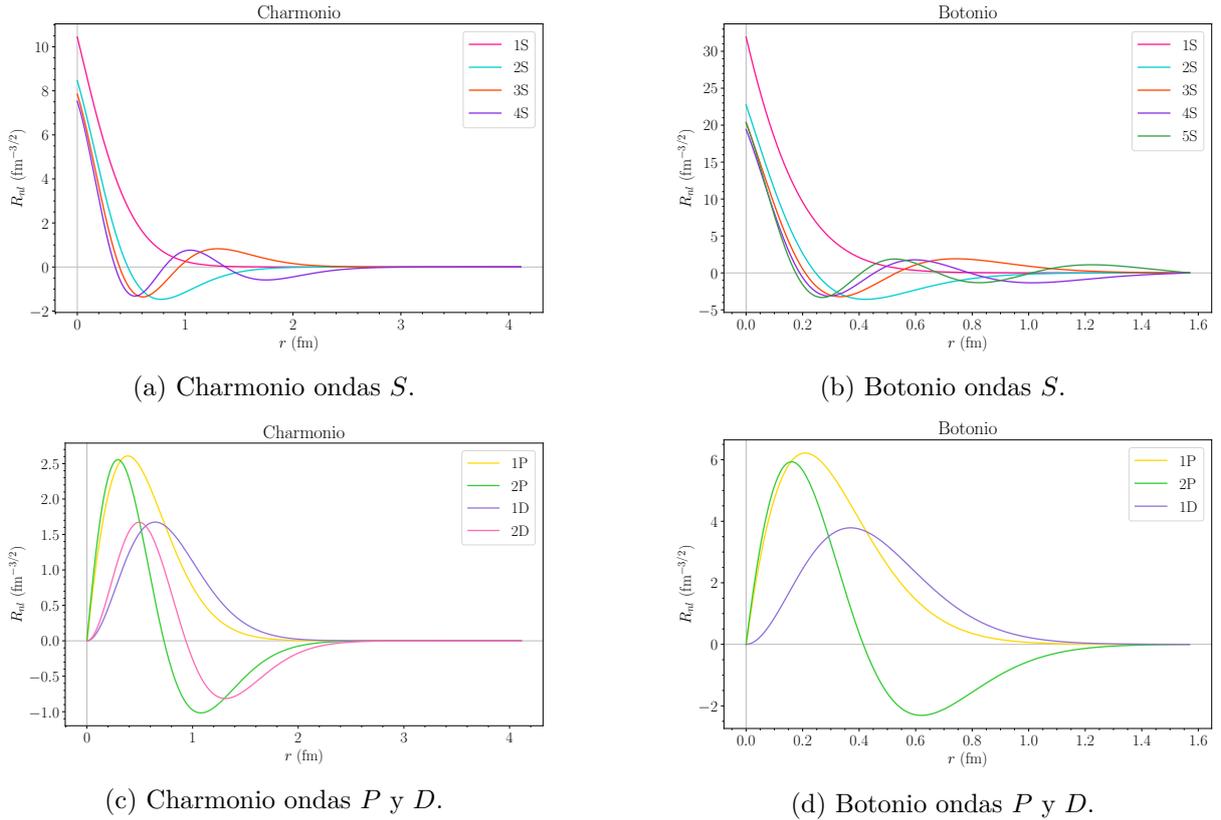


Figura 4.6. Representación gráfica de la función radial de los estados $c\bar{c}$ y $b\bar{b}$ asociados con los parámetros de la tabla 4.2.

4.2 Espectro de los estados quarkonia con parámetros variacionales en las correcciones perturbativas

4.2.1 Ajuste con una selección de estados

En esta sección, se busca realizar un ajuste más preciso que el de la sección anterior utilizando la misma selección de estados más el estado 1^1S_0 . Se aplicarán las correcciones perturbativas de espín-espín y espín-órbita, incluyendo parámetros variacionales λ_{SS} y λ_{LS} . Como se menciona en el capítulo 2, el potencial dependiente de espín, V_{SD} , se obtiene considerando diagramas con intercambio de un gluón. Si, por el contrario, se hubieran considerado diagramas a orden superior, cabe la posibilidad de que las constantes presentes en las definiciones de V_{SS} y V_{LS} (ecuaciones (2.5) y (2.6)) sufriesen modificaciones. Este es el principal motivo por el cual se incluyen los parámetros λ_{SS} y λ_{LS} .

La incorporación de estos dos parámetros aumenta la dimensión del vector $\vec{\alpha}$ definido en la sección 3.3. A la versión expandida de $\vec{\alpha}$ la llamaremos $\vec{\alpha}^* = (m_q, e_0, \tilde{A}, \lambda_{SS}, \lambda_{LS})$. A partir de ahora, utilizaremos $\vec{\alpha}^*$ para realizar el ajuste de parámetros de χ^2 y la energía en este nuevo modelo teórico será:

$$E_{SD}^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^*) = 2m_q + e_0\mathcal{E}(\tilde{A}) + \lambda_{SS}\langle V_{SS}(r)(2\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2) \rangle + \lambda_{LS}\langle V_{LS}(r)(\hat{L} \cdot \hat{S}) \rangle. \quad (4.5)$$

Los cálculos perturbativos, al igual que en la sección anterior, vienen dados por las ecuaciones (4.2) y (4.3). Con este modelo, los resultados del nuevo ajuste se resumen en la tabla 4.3.

	m_q (GeV)	e_0 (GeV)	\tilde{A}	λ_{SS}	λ_{LS}	χ^2 (GeV ²)	l_0 (fm)
$c\bar{c}$	1.5140 ± 0.0010	0.2510 ± 0.0010	1.185 ± 0.010	0.3423 ± 0.0012	1.19555 ± 0.0025	0.000283	0.4528 ± 0.0014
$b\bar{b}$	4.7540 ± 0.0007	0.3058 ± 0.0013	0.722 ± 0.006	0.470 ± 0.015	1.321 ± 0.011	0.000042	0.2315 ± 0.0020

Tabla 4.3. Resultados del ajuste de χ^2 con siete estados (1^1S_0 , n^3S_1 y 1^3P_J , con $n = 1, 2, 3$ y $J = 0, 1, 2$) y cinco parámetros. En este ajuste se tienen en cuenta las correcciones perturbativas.

A partir de los resultados de la tabla anterior se calculan las constantes relevantes para este estudio, las cuales se recogen en la tabla 4.4.

	m_q (GeV)	α_s	A (GeV/fm)	λ_{SS}	λ_{LS}
$c\bar{c}$	1.5140 ± 0.0010	0.5756 ± 0.0011	0.655 ± 0.007	0.3423 ± 0.0012	1.19555 ± 0.0025
$b\bar{b}$	4.7540 ± 0.0007	0.3586 ± 0.0008	0.954 ± 0.010	0.470 ± 0.015	1.321 ± 0.011

Tabla 4.4. Parámetros de QCD (m_q , α_s y A) y los añadidos a las correcciones espín-espín (λ_{SS}) y espín-órbita (λ_{LS}) para los estados quarkonia.

Al comparar los resultados obtenidos con los de la sección anterior, presentados en la tabla 4.2, se nota un ligero incremento en las masas de los quarks. Este nuevo ajuste también ha repercutido en la constante de acoplamiento que, en el caso del charmonio, ha aumentado en más de un 40%. Se ha llegado a la conclusión de que tal crecimiento se debe a la incorporación del estado 1^1S_0 . En cuanto a la constante de confinamiento, ambas han disminuido, pero en el

caso del botonio aún se mantiene cercana a 1 GeV/fm.

Los espectros calculados con el nuevo ajuste se muestran en las figuras 4.7 y 4.8. Comparándolos con los resultados de E_{SD} de las figuras 4.4 y 4.5 de la sección anterior, se observa una leve mejora en la predicción de los niveles energéticos al introducir los parámetros variacionales. Para el caso del charmonio, esta mejora es apreciable en los estados 2^1S_0 y 1^3S_1 . Recordemos que en la sección anterior, los valores energéticos de estos estados se alejaron de los experimentales al añadir las correcciones perturbativas. Sin embargo, con este ajuste se logra corregir significativamente esta situación es como queda reflejado en la figura 4.7. Pese a esta mejora, las energías de algunos estados como el 4^3S_1 y 2^3D_1 se alejan de los valores experimentales.

Al igual que en el caso del charmonio, para el botonio (figura 4.8) también se obtienen mejores resultados para los estados $\eta(2S)$ y $\Upsilon(1S)$. La estimación de todos sus estados ya era bastante precisa en el ajuste anterior, pero en esta sección se aprecia una considerable mejora en todas las ondas S , especialmente en el estado 5^3S_1 . Todos los estados teóricos del botonio parecen superponerse con los experimentales, excepto el estado 4^3S_1 , sobre el que se discutirá en el capítulo 5.

En general, el ajuste del charmonio y del botonio puede considerarse mejor que el anterior, ya que en esta sección se logra reducir el valor de χ^2 en un orden de magnitud.

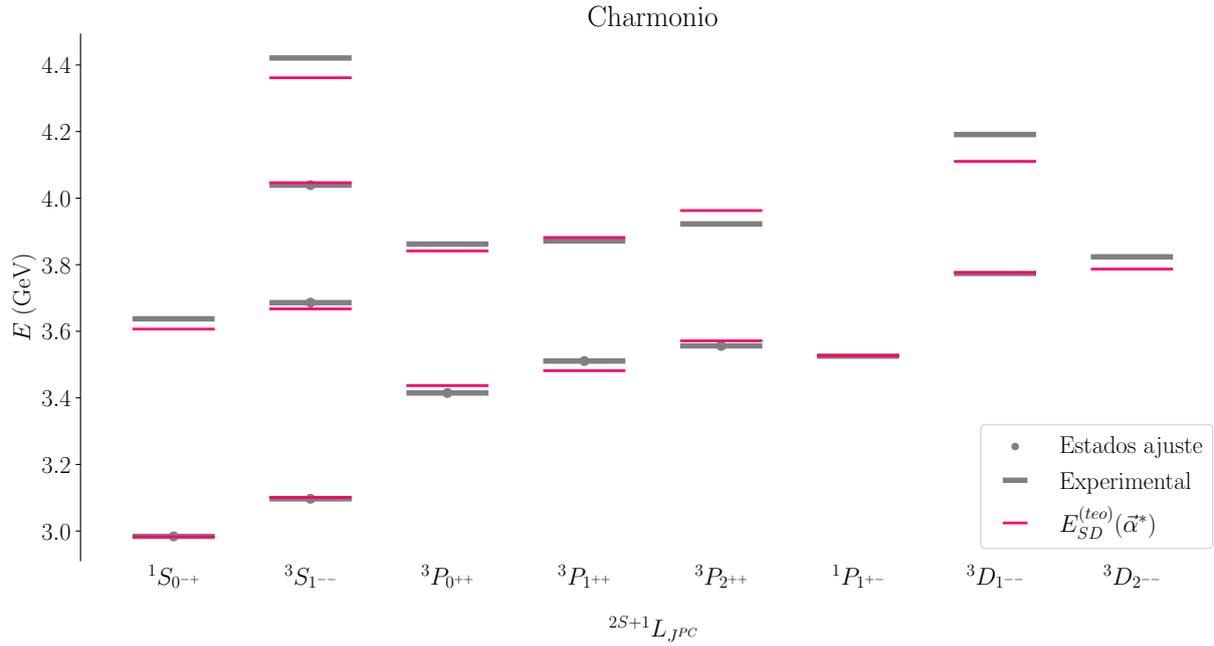


Figura 4.7. Espectro de energías teórico y experimental del charmonio asociado a los parámetros de la tabla 4.4. Los valores exactos de cada estado se encuentran en la quinta columna de la tabla B.1.

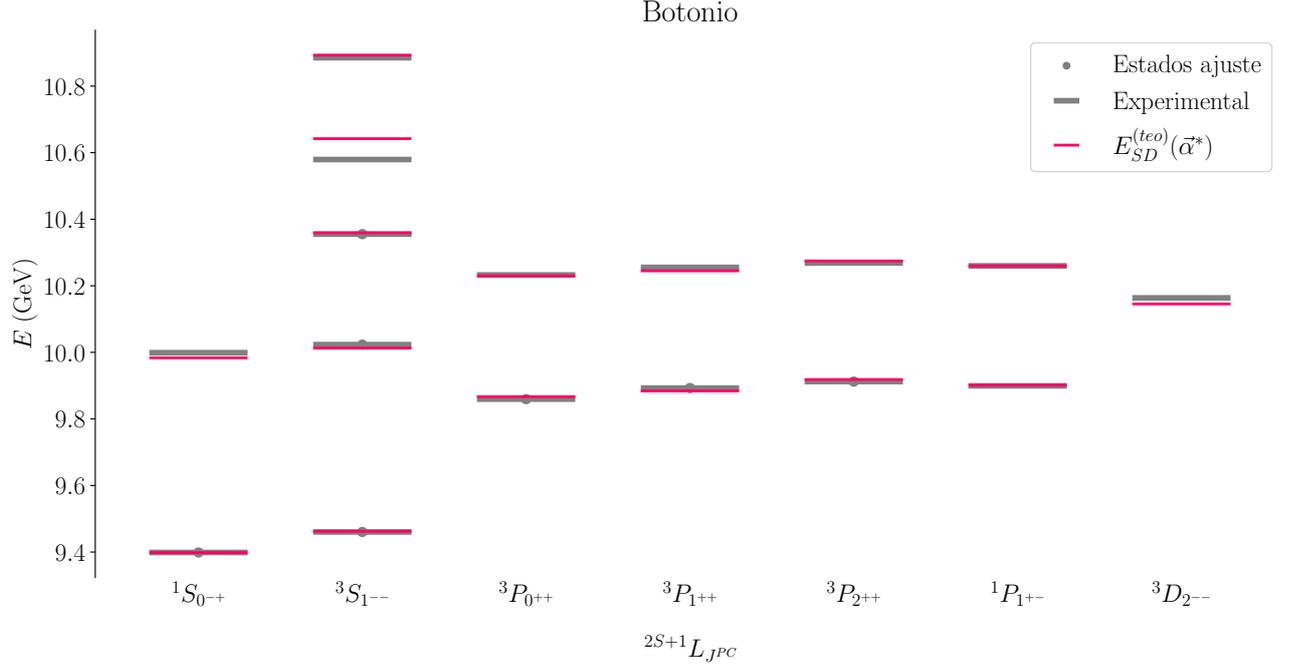


Figura 4.8. Espectro de energías teórico y experimental del botonio asociado a los parámetros de la tabla 4.4. Los valores exactos de cada estado se encuentran en la quinta columna de la tabla B.2.

4.2.2 Ajuste con todos los estados

En esta breve sección, se lleva a cabo un análisis similar al de la sección anterior. La única diferencia radica en que, en este caso, se utilizan todos los estados del charmonio y del botonio para llevar a cabo el ajuste de parámetros. Los resultados obtenidos en tal ajuste se encuentran resumidos en las tablas 4.5 y 4.6.

	m_q (GeV)	e_0 (GeV)	\tilde{A}	λ_{SS}	λ_{LS}	χ^2 (GeV ²)	l_0 (fm)
$c\bar{c}$	1.475 ± 0.005	0.215 ± 0.005	1.62 ± 0.07	0.317 ± 0.006	1.07 ± 0.19	0.000677	0.491 ± 0.007
$b\bar{b}$	4.7759 ± 0.0013	0.3390 ± 0.0020	0.582 ± 0.007	0.343 ± 0.016	1.169 ± 0.014	0.000223	0.219 ± 0.003

Tabla 4.5. Resultados de la minimización de χ^2 con ajuste de 5 parámetros para el charmonio y el botonio utilizando todos los estados quarkonia y teniendo en cuenta las correcciones perturbativas.

	m_q (GeV)	α_s	A (GeV/fm)	λ_{SS}	λ_{LS}
$c\bar{c}$	1.475 ± 0.005	0.544 ± 0.006	0.721 ± 0.04	0.317 ± 0.006	1.07 ± 0.19
$b\bar{b}$	4.7759 ± 0.0012	0.3767 ± 0.0012	0.898 ± 0.014	0.343 ± 0.016	1.169 ± 0.014

Tabla 4.6. Masas de quarks los pesados (m_q), constante de acoplamiento (α_s), constante de confinamiento (A) y parámetros variacionales (λ_{SS} y λ_{LS}) para los estados $c\bar{c}$ y $b\bar{b}$. Estos valores se obtienen introduciendo correcciones perturbativas en el ajuste por χ^2 utilizando todos los estados quarkonia.

Los resultados obtenidos con este ajuste son muy parecidos a los de la sección anterior 4.2.1, en la que solo se utilizaban siete estados en el ajuste (tabla 4.4). Las masas de los quarks son bastante similares, al igual que las constantes de acoplamiento. Por su parte, la tensión de cuerda

del charmonio se asemeja más al primer ajuste, en el que solo se utiliza el potencial de Cornell para obtener la energía (tabla 4.2). En cambio, para el botonio el valor de A aunque se reduce, sigue estando más cerca de 1 GeV/fm que para el charmonio. Además, de la tabla 4.4, destaca la similitud entre las constantes λ_{SS} y λ_{LS} de ambos estados quarkonia.

El uso todos los estados en el ajuste conduce a que los espectros mostrados en las figuras 4.9 y 4.10 sean los que mejor concuerdan con los resultados experimentales. En el charmonio el estado más beneficiado es el $4S$ que consigue reducir considerablemente su distancia al valor experimental, en comparación al anterior resultado. Para el botonio, las gráficas tanto de esta sección como de la anterior son prácticamente idénticas, excepto por una mejor predicción del estado $4S$.

En resumen, aunque en la sección 4.1 se logra un buen ajuste al considerar únicamente los resultados con un potencial de Cornell, las perturbaciones agregadas posteriormente requieren de parámetros variacionales que acompañen a los términos V_{SS} y V_{LS} para obtener un ajuste más preciso. Además, en la selección de estados utilizada en el ajuste de la sección 4.1, sería necesario incluir el estado 1^1S_0 para obtener resultados representativos que abarquen a todos los niveles energéticos.

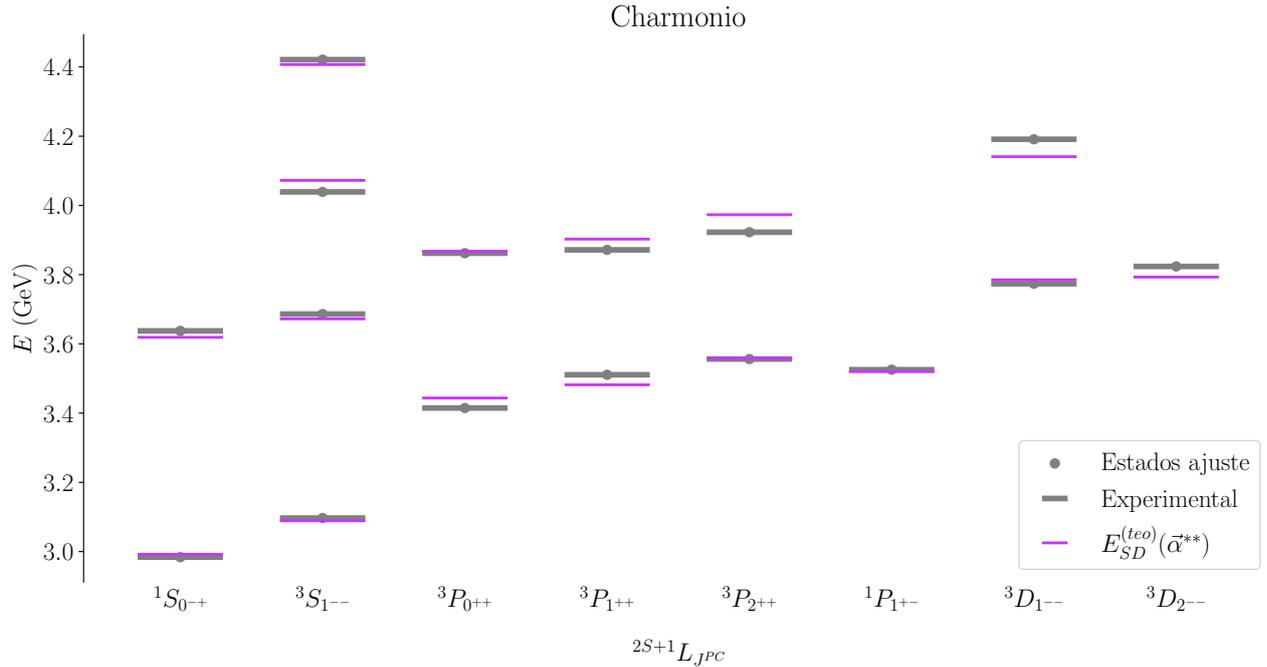


Figura 4.9. Espectro del charmonio calculado con los parámetros de las tablas 4.5 y 4.6.

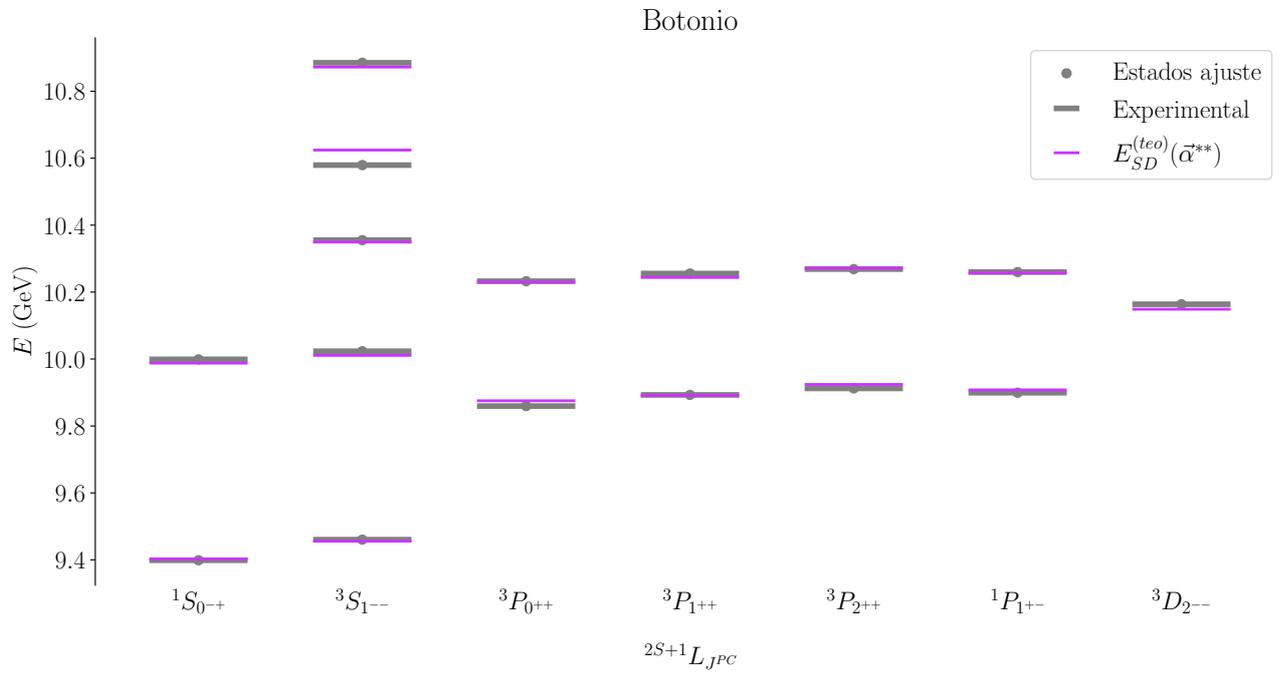


Figura 4.10. Espectro del botonio calculado con los parámetros de las tablas 4.5 y 4.6.

Conclusiones

En este trabajo, se han investigado las características de los niveles energéticos de dos mesones; el charmonio y el botonio como estados no relativistas (NRQCD), utilizando un potencial de Cornell como modelo de interacción. Además, se han analizado las constantes asociadas a este potencial (α_s y A), las cuales están relacionadas con propiedades fundamentales de la Cromodinámica Cuántica (QCD) como la libertad asintótica y el confinamiento de color. Como se comenta en el capítulo 2, estas propiedades explican la existencia de los quarks únicamente en hadrones neutros de color, así como su comportamiento como partículas libres a distancias cortas, a diferencia de lo que ocurre en la Electrodinámica Cuántica (QED). Por otro lado, dos de los parámetros obtenidos en este trabajo, la masa de los quarks y la constante de acoplamiento, presentan un comportamiento de *running constant*. Es decir, no son constantes sino que dependen de Q^2 y se estudian mediante series de potencias y teorías de renormalización.

El propósito de la memoria ha sido determinar, utilizando el potencial de Cornell, los tres parámetros α_s , m_q y A , ajustando los niveles energéticos de un conjunto de estados a los valores experimentales tabulados en el PDG. Con estos parámetros ya calibrados, el objetivo buscado ha sido predecir las energías de otros estados quarkonia siguiendo la metodología y del algoritmo numérico descrito en el capítulo 3.

En el capítulo 4 se presentan los resultados, que resumimos aquí en las tablas 5.1 y 5.2.

Sección	m_c (GeV)	α_s	A (GeV/fm)	λ_{SS}	λ_{LS}	χ^2 (GeV ²)
4.1	1.4175 ± 0.0010	0.4063 ± 0.0012	0.751 ± 0.011	-	-	0.001960
4.2.1	1.5140 ± 0.0010	0.5756 ± 0.0011	0.655 ± 0.007	0.3423 ± 0.0012	1.19555 ± 0.0025	0.000283
4.2.2	1.475 ± 0.005	0.544 ± 0.006	0.721 ± 0.04	0.317 ± 0.006	1.07 ± 0.19	0.000677

Tabla 5.1. Recopilación de los parámetros obtenidos en las distintas secciones para el charmonio.

Los resultados obtenidos en este capítulo indican que el estado 1^1S_0 y otros seis estados (n^3S_1 con $n = 1, 2, 3$ y 1^3P_J con $J = 0, 1, 2$) ofrecen un ajuste representativo para el resto de estados tanto en el caso del mesón $c\bar{c}$ como en el caso del $b\bar{b}$. Esto se evidencia en las tablas resumen 5.1 y 5.2, donde se observa una mayor similitud entre los resultados de las secciones 4.2.1 y 4.2.2, en

Sección	m_b (GeV)	α_s	A (GeV/fm)	λ_{SS}	λ_{LS}	χ^2 (GeV ²)
4.1	4.7170 ± 0.0006	0.3200 ± 0.0005	1.031 ± 0.007	-	-	0.000296
4.2.1	4.7540 ± 0.0007	0.3586 ± 0.0008	0.954 ± 0.010	0.470 ± 0.015	1.321 ± 0.011	0.000042
4.2.2	4.7759 ± 0.0012	0.3767 ± 0.0012	0.898 ± 0.014	0.343 ± 0.016	1.169 ± 0.014	0.000223

Tabla 5.2. Recopilación de los parámetros obtenidos en las distintas secciones para el botonio.

las cuales, a diferencia de la sección 4.1, sí se usa el estado 1^1S_0 en el ajuste.

Viendo los resultados del charmonio y del botonio, se deduce que los parámetros variacionales que acompañan al término espín-espín y espín-orbita han sido de gran ayuda a la hora de predecir las energías teóricas. En la sección 4.2.2, al usar todos los estados quarkonia para el ajuste, los niveles energéticos son más precisos y, por tanto podemos decir que, los valores obtenidos para λ_{SS} y λ_{LS} incorporan de una manera efectiva la contribución de diagramas de Feynman de mayor orden. Una contribución que, a la vista de la gran similitud entre las λ 's para el charmonio y el botonio, es aproximadamente independiente del mesón.

Resulta intrigante observar que en todos los ajustes realizados para los estados del botonio, el estado $4S$ calculado numéricamente no coincide completamente con el valor experimental. Una posible explicación es que dicho estado no posea un momento angular orbital bien definido, lo que sugiere que no es una onda S pura, sino más bien una mezcla entre una onda S y una onda D .

En resumen, las masas de los quarks, aunque están un poco alejadas a los valores del PDG [6], se adaptan a los valores propuestos por *Lattice* QCD, al igual que la tensión de cuerda. Aún no existe un consenso sobre los valores de la constante de acoplamiento para el charmonio y el botonio, pero los resultados de este trabajo son consistentes con otros estudios que han hecho un análisis similar, como por ejemplo los del artículo [17], donde los valores que presentan para el charmonio y el botonio son respectivamente: $m_c = 1.479$ GeV y $m_b = 4.75$ GeV; $\alpha_s^c = 0.546$ y $\alpha_s^b = 0.35$; $A_c = 0.772$ GeV/fm y $A_b = 0.963$ GeV/fm. Todos ellos muy similares a los valores de los parámetros obtenidos en las secciones 4.2.1 y 4.2.2.

Con el objetivo de mejorar los resultados obtenidos en este trabajo, se propone como proyecto futuro la inclusión de los tres términos perturbativos (espín-espín, espín-órbita y tensor) en la ecuación de Schrödinger junto al potencial de Cornell y seguir el mismo procedimiento presentado en el capítulo 3. Esto implicaría generalizar el algoritmo utilizado para tratar con estados mezcla de diferentes momentos angulares orbitales. Sin lugar a dudas, ello permitiría una mayor precisión en el modelado teórico de los quarkonia, que conduciría a una mejor concordancia con los resultados experimentales.

Propagación de errores a los parámetros del modelo

Los parámetros de QCD que se hallan en la sección 3.3 presentan incertidumbres debido a que hay variables que intervienen en la función χ^2 (ecuación (3.24)) que tienen errores asociados, las energías experimentales $E^{(\text{exp})}$. Para determinar estas incertidumbres, primero es necesario linealizar la energía de nuestro modelo, $E^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}) = 2m_q + e_0\mathcal{E}(\tilde{A})$, mediante un desarrollo de Taylor entorno del mínimo de χ^2 , $\vec{\alpha}^0 = (m_q^0, e_0^0, \tilde{A}^0)^1$,

$$E_I^{(\text{L})}(\vec{\alpha}) = E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0) + \nabla E_I^{(\text{teo})} \cdot \delta\vec{\alpha}, \quad (\text{A.1})$$

donde se introduce el vector $\delta\vec{\alpha} = \vec{\alpha} - \vec{\alpha}^0$. Entorno del mínimo, la función χ^2 vendrá aproximada entonces por

$$F(\vec{\alpha}) = \sum_I w_I (E_I^{(\text{L})}(\vec{\alpha}) - E_I^{(\text{exp})})^2. \quad (\text{A.2})$$

Al igual que la función χ^2 , el gradiente de esta nueva función es nulo para $\vec{\alpha} = \vec{\alpha}^0$

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_i} = \frac{\partial F}{\partial \delta\alpha_i} = 2 \sum_I w_I \left(E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0) + \nabla E_I^{(\text{teo})} \cdot \delta\vec{\alpha} - E_I^{(\text{exp})} \right) \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0)}{\partial \alpha_i} = 0. \quad (\text{A.3})$$

Tras agrupar los términos en $\delta\vec{\alpha}$, la ecuación (A.3) se puede escribir como

$$\sum_j \left[\sum_I w_I \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0)}{\partial \alpha_i} \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0)}{\partial \alpha_j} \right] \delta\alpha_j = - \sum_I w_I \left(E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0) - E_I^{(\text{exp})} \right) \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0)}{\partial \alpha_i}, \quad (\text{A.4})$$

donde aparece una nueva matriz, que podemos definir como

$$M_{ij} = \sum_I w_I \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0)}{\partial \alpha_i} \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0)}{\partial \alpha_j}. \quad (\text{A.5})$$

¹En la sección 4.2 la energía teórica tiene en cuenta las correcciones perturbativas con parámetros λ_{SS} y λ_{LS} , por lo tanto, el vector α incluye también esos parámetros.

Por último, se aísla $\delta\vec{\alpha}$ de la ecuación (A.4) calculado la matriz inversa, M_{ij}^{-1} :

$$\delta\alpha_i = M_{ij}^{-1} \left[- \sum_I w_I \left(E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0) - E_I^{(\text{exp})} \right) \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0)}{\partial \alpha_j} \right]. \quad (\text{A.6})$$

Partiendo de esta ecuación es posible obtener, por propagación cuadrática de los errores en las energías experimentales, los correspondientes errores en nuestros parámetros

$$\sigma_{\alpha_i}^2 = \sigma_{\delta\alpha_i}^2 = \sum_I \left(\frac{\partial \delta\alpha_i}{\partial E_I^{(\text{exp})}} \sigma_{E_I^{(\text{exp})}} \right)^2 = \sum_I \left(w_I \sigma_{E_I^{(\text{exp})}} \sum_j M_{ij}^{-1} \frac{\partial E_I^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^0)}{\partial \alpha_j} \right)^2. \quad (\text{A.7})$$

Resultados numéricos

En las siguientes tablas se resumen los valores numéricos de todos los estados de energía del charmonio (tabla B.1) y del botonio (tabla B.2) obtenidos en el capítulo 4. Las columnas 3 y 4 de estas tablas corresponden a la sección 4.1 en la que los valores de $E^{(\text{teo})}(\vec{\alpha})$ provienen del potencial de Cornell simple, mientras las energías $E_{SD}(\vec{\alpha})$ se obtienen añadiendo correcciones perturbativas a los estados energéticos anteriores. Las columnas 5 y 6 recogen los resultados de las secciones 4.2.1 y 4.2.2 respectivamente, donde se agregan las variables λ_{SS} y λ_{LS} en la minimización de residuos. Los valores resaltados en negrita son los que se utilizan en el ajuste de parámetros. Por otro lado, en la tabla B.3 se presentan algunos valores esperados como la energía cinética y la velocidad relativa reducida de algunos estados mesónicos.

$n^{2S+1}L_J$	J^{PC}	$E^{(\text{teo})}(\vec{\alpha})$ (GeV)	$E_{SD}(\vec{\alpha})$ (GeV)	$E^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^*)$ (GeV)	$E_{SD}^{(\text{teo})}(\vec{\alpha}^{**})$ (GeV)	PDG (GeV)
1^1S_0	0^{-+}	3.1034	2.9904	2.9830	2.9920	2.9839 ± 0.0004
1^3S_1	1^{--}	3.1034	3.1411	3.1008	3.0889	3.096900 ± 0.000006
1^3P_0	0^{++}	3.4979	3.4585	3.4368	3.4436	3.41471 ± 0.00030
1^3P_1	1^{++}	3.4979	3.4782	3.4817	3.4817	3.51067 ± 0.00005
1^1P_1	1^{+-}	3.4979	3.4979	3.5266	3.5198	3.52537 ± 0.00014
1^3P_2	2^{++}	3.4979	3.5176	3.5714	3.5580	3.55617 ± 0.00007
2^1S_0	0^{-+}	3.6537	3.5796	3.6067	3.6189	3.6377 ± 0.0011
2^3S_1	1^{--}	3.6537	3.6784	3.6673	3.6722	3.68610 ± 0.00006
1^3D_1	1^{--}	3.7649	3.7651	3.7760	3.7850	3.7737 ± 0.0004
1^3D_2	1^{--}	3.7649	3.7656	3.7869	3.7929	3.8235 ± 0.0005
2^3P_0	0^{++}	3.9153	3.8753	3.8414	3.8674	3.862 ± 0.050
2^3P_1	1^{++}	3.9153	3.8953	3.8818	3.9026	3.87165 ± 0.00006
2^3P_2	2^{++}	3.9153	3.8953	3.9626	3.9731	3.9225 ± 0.0010
3^3S_1	1^{--}	4.0527	4.074	4.0464	4.0723	4.039 ± 0.001
2^3D_1	1^{--}	4.1293	4.1264	4.1104	4.1407	4.191 ± 0.005
4^3S_1	1^{--}	4.3918	4.4113	4.3616	4.4068	4.421 ± 0.004

Tabla B.1. Estados energéticos del charmonio calculados en las distintas secciones del trabajo. La primera columna es la notación espectroscópica habitual $n^{2S+1}L_J$ para cada estado y la segunda columna, la notación que utiliza el PDG, J^{PC} . En la tercera hasta la sexta columna son los resultados energéticos obtenidos en las distintas secciones del capítulo 4. La última columna son los valores experimentales del PDG [6].

$n^{2S+1}L_J$	J^{PC}	$E^{(\text{teo})}(\bar{\alpha})$ (GeV)	$E_{SD}(\bar{\alpha})$ (GeV)	$E_{SD}^{(\text{teo})}(\bar{\alpha}^*)$ (GeV)	$E_{SD}^{(\text{teo})}(\bar{\alpha}^{**})$ (GeV)	PDG (GeV)
1^1S_0	0^{-+}	9.4630	9.3879	9.3982	9.4021	9.3987 ± 0.0020
1^3S_1	1^{--}	9.4630	9.4880	9.4623	9.4557	9.4604 ± 0.00010
1^3P_0	0^{++}	9.8907	9.8692	9.8669	9.8753	9.85944 ± 0.00031
1^3P_1	1^{++}	9.8907	9.8799	9.8841	9.8915	9.89278 ± 0.00031
1^1P_1	1^{+-}	9.8907	9.8907	9.9013	9.9078	9.8993 ± 0.0008
1^3P_2	2^{++}	9.8907	9.9014	9.9184	9.9240	9.91221 ± 0.00031
2^1S_0	0^{-+}	10.0064	9.9683	9.9837	9.9878	9.999 ± 0.004
2^3S_1	1^{--}	10.0064	10.0191	10.0129	10.0109	10.0234 ± 0.0005
1^3D_2	1^{--}	10.1385	10.1371	10.1455	10.1487	10.1637 ± 0.0014
2^3P_0	0^{++}	10.2586	10.2393	10.2302	10.2299	10.23250 ± 0.00050
2^3P_1	1^{++}	10.2586	10.2489	10.245	10.2437	10.25546 ± 0.00050
2^1P_1	1^{+-}	10.2586	10.2586	10.2598	10.2574	10.2598 ± 0.0012
2^3P_2	2^{++}	10.2586	10.2682	10.2747	10.2712	10.26865 ± 0.00050
3^3S_1	1^{--}	10.3618	10.3720	10.3591	10.3494	10.3551 ± 0.0005
4^3S_1	1^{--}	10.6558	10.6651	10.6421	10.6243	10.5794 ± 0.0012
5^3S_1	1^{--}	10.9238	10.9323	10.8931	10.8724	10.8852 ± 0.0026

Tabla B.2. Estados energéticos del botonio calculados en las distintas secciones del trabajo. La primera columna es la notación espectroscópica habitual $n^{2S+1}L_J$ para cada estado y la segunda columna, la notación que utiliza el PDG, J^{PC} . En la tercera hasta la sexta columna son los resultados energéticos obtenidos en las distintas secciones del capítulo 4. La última columna son los valores experimentales del PDG [6].

En la tabla B.3, se muestra el valor esperado de la energía cinética, $\langle \hat{T} \rangle$, y la velocidad relativa, $\beta_{\text{rel}} \equiv v/c$, de los mesones. Estos se calculan con los resultados obtenidos en la sección 4.2.2 mediante:

$$\langle \hat{T} \rangle = E^{(\text{int})} - \langle \hat{V}_{\text{Cornell}} \rangle = e_0 \mathcal{E}(\tilde{A}) + \frac{4}{3} \alpha_s \hbar c \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle - A \langle r \rangle, \quad (\text{B.1})$$

$$\gamma_{\text{rel}} = \frac{\langle \hat{T} \rangle}{m_q} + 1, \quad \beta_{\text{rel}} = \sqrt{1 - \frac{1}{\gamma_{\text{rel}}^2}}. \quad (\text{B.2})$$

En la tabla B.3, también se recogen los valores esperados radiales $\langle r \rangle$ y $\langle r^{-1} \rangle$ calculados a partir de la ecuación (4.4).

	$c\bar{c}$				$b\bar{b}$			
	$\langle \hat{T} \rangle$ (GeV)	$\beta_{\text{rel}} = v/c$	$\langle r \rangle$ (fm)	$\langle r^{-1} \rangle$ (fm $^{-1}$)	$\langle \hat{T} \rangle$ (GeV)	$\beta_{\text{rel}} = v/c$	$\langle r \rangle$ (fm)	$\langle r^{-1} \rangle$ (fm $^{-1}$)
1S	0.334	0.587	0.401	3.430	0.395	0.385	0.206	6.869
1P	0.345	0.594	0.671	1.734	0.326	0.354	0.379	3.092
2S	0.415	0.634	0.821	1.990	0.388	0.382	0.466	3.516
1D	0.400	0.625	0.885	1.247	0.356	0.368	0.514	2.155
2P	0.455	0.653	1.022	1.330	0.403	0.389	0.596	2.301

Tabla B.3. Valores esperados de la energía cinética, $\langle \hat{T} \rangle$; del radio $\langle r \rangle$ y de su inversa $\langle r^{-1} \rangle$. También se calculan β 's relativas para un conjunto de estados del charmonio y botonio. Valores obtenidos a partir de los resultados de la sección 4.1.

Bibliografía

- [1] Bogdan Povh et al. *Particles and Nuclei*. 7th. Berlin, Germany: Springer, 2015. ISBN: 9783662463212.
- [2] Robert Mann. *An Introduction to Particle Physics and the Standard Model*. Boca Raton, FL: CRC Press, 2010. ISBN: 9781420082605.
- [3] Hong-Jian He y Luciano Maiani. “50 years of the GIM mechanism”. En: *CERN Courier* (2020). URL: <https://cerncourier.com/a/50-years-of-the-gim-mechanism/>.
- [4] “November 1974: Discovery of the Charmed Quark”. En: *APS News* 26.10 (nov. de 2017). URL: <https://www.aps.org/publications/apsnews/201711/history.cfm>.
- [5] M.B. Voloshin. “Charmonium”. En: *Progress in Particle and Nuclear Physics* 61.2 (2008), págs. 455-511. ISSN: 0146-6410. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2008.02.001>.
- [6] R. L. Workman et al. “Review of Particle Physics”. En: *PTEP* 2022 (2022), pág. 083C01. DOI: [10.1093/ptep/ptac097](https://doi.org/10.1093/ptep/ptac097).
- [7] J Greensite. “The confinement problem in lattice gauge theory”. En: *Progress in Particle and Nuclear Physics* 51.1 (2003), págs. 1-83. ISSN: 0146-6410. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0146-6410\(03\)90012-3](https://doi.org/10.1016/S0146-6410(03)90012-3).
- [8] N. Brambilla et al. “Heavy Quarkonium Physics”. En: (2005). arXiv: [hep-ph/0412158](https://arxiv.org/abs/hep-ph/0412158) [[hep-ph](https://arxiv.org/abs/hep-ph/0412158)].
- [9] E. Eichten et al. “Spectrum of Charmed Quark-Antiquark Bound States”. En: *Phys. Rev. Lett.* 34 (6 feb. de 1975), págs. 369-372. DOI: [10.1103/PhysRevLett.34.369](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.34.369).
- [10] Mark Thomson. *Modern Particle Physics*. Cambridge University Press, 2013. ISBN: 9781107034266.
- [11] David J Griffiths. *Introduction to Elementary Particles*. 2nd. Wiley-VCH, 2008. ISBN: 9783527406012.
- [12] N. R. Sonia et al. “ $Q\bar{Q}(Q \in b, c)$ spectroscopy using the Cornell potential”. En: *Eur. Phys. J. C* 78.7 (2018), pág. 592. DOI: [10.1140/epjc/s10052-018-6068-6](https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-018-6068-6).
- [13] C.T. Kelley. *Iterative Methods for Optimization*. 2.^a ed. Vol. 18. Frontiers in Applied Mathematics. Philadelphia: SIAM, 1999. DOI: [10.1137/1.9781611970920](https://doi.org/10.1137/1.9781611970920).

-
- [14] S. Alekhin et al. “Determination of the charm-quark mass in the \overline{MS} scheme using charm production data from deep inelastic scattering at HERA”. En: *Physics Letters B* 718.2 (dic. de 2012), págs. 550-557. DOI: [10.1016/j.physletb.2012.11.010](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2012.11.010).
- [15] Alexandre Deur, Stanley J. Brodsky y Guy F. de Téra mond. “The QCD running coupling”. En: *Progress in Particle and Nuclear Physics* 90 (2016), págs. 1-74. ISSN: 0146-6410. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2016.04.003>.
- [16] Vicent Mateu et al. “Calibrating the naïve Cornell model with NRQCD”. En: *Eur. Phys. J. C* 79 (2019). DOI: [10.1140/epjc/s10052-019-6808-2](https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-019-6808-2).
- [17] Olga Lakhina y Eric S. Swanson. “Dynamic properties of charmonium”. En: *Phys. Rev. D* 74 (1 jul. de 2006), pág. 014012. DOI: [10.1103/PhysRevD.74.014012](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.74.014012).