

Algunas observaciones acerca de scattering en mecánica cuántica.

Al estudiar el problema de scattering en mecánica cuántica, es importante tener en cuenta el hecho de que este es un problema dinámico y que, por lo tanto, su estudio debería estar basado en las propiedades de la evolución temporal, que en física cuántica se da a través de operadores unitarios.

El problema que estudiaremos a continuación nos permitirá aclarar este aspecto, de forma que (i) se pueda justificar el ansatz basado en expansiones de ondas esféricas desde un punto de vista dinámico y (ii) sea posible estudiar el problema de scattering en teoría cuántica de campos con un formalismo covariante.

Antes de comenzar el análisis que nos llevará a la definición del operador de scattering, es conveniente recordar las definiciones de los diferentes "esquemas" de evolución temporal que se usan en mecánica cuántica.

• El esquema de Schrödinger

En este esquema, la evolución temporal se asigna a los estados, mientras que los operadores (i.e. observables) no dependen del tiempo.

→ $|\Psi(t)\rangle$: dependencia temporal determinada por la ec. de Schrödinger

$$\begin{aligned} \curvearrowright \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle &= H |\Psi(t)\rangle \quad (1) \\ &\quad \uparrow \text{Hamiltoniano.} \end{aligned}$$

Si A es un operador que representa un observable, entonces su valor esperado en el estado $|\Psi(t)\rangle$ es → $\langle A \rangle = \langle \Psi(t), A \Psi(t) \rangle$.

Supongamos, por simplicidad, que H no lleva ninguna dependencia temporal. En ese caso, la ec. (1) (ec. de Schrödinger) tiene como solución

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-itH/\hbar} |\Psi_0\rangle \quad (2)$$

Definiendo el operador de evolución temporal (en el esquema de Schrödinger)

$$\text{como } U_S(t_2, t_1) := e^{-i(t_2-t_1)H/\hbar}, \quad (3)$$

tenemos entonces que $|\Psi(t_2)\rangle = U_S(t_2, t_1) |\Psi(t_1)\rangle$

En general, el operador de evolución temporal satisface la siguiente ecuación, que es equivalente a la ec. de Schrödinger:

$$i\partial_t U_S(t, t_0) = H_S(t) U_S(t), \quad (4)$$

sujeto a la condición inicial $U_S(t_0, t_0) = \mathbb{1}$.

($H_S \equiv$ Hamiltoniano en el esquema de Schrödinger).

Volvamos al caso en que H_S no depende de t , así que $U_S(t) = e^{-itH_S/\hbar}$ ↙ aquí $t_0=0$, por simplicidad

$$\begin{aligned} \rightarrow \langle A \rangle_\Psi(t) &\equiv \langle \Psi(t), A \Psi(t) \rangle = \langle U_S(t) \Psi_0, A U_S(t) \Psi_0 \rangle \\ &= \langle \Psi_0, U_S(t)^\dagger A U_S(t) \Psi_0 \rangle \end{aligned}$$

→ Esta identidad nos motiva a introducir el esquema de Heisenberg, para el cual la dependencia temporal va en los observables (y ya no en los estados)

• Esquema de Heisenberg.

→ Estados no varían en el tiempo

→ Observables varían en el tiempo según $A(t) = U_S(t)^\dagger A U_S(t)$.

En particular, si H no depende de t , tenemos $A(t) = e^{itH/\hbar} A e^{-itH/\hbar}$.

Derivando la identidad anterior respecto a t , obtenemos:

$$\frac{d}{dt} A(t) = \frac{d}{dt} e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} = \frac{i}{\hbar} [H, A(t)]$$

$$\rightarrow i\hbar \dot{A} = [A, H] \quad (5)$$

La ecuación (5) muestra claramente la similitud que hay con la "regla" de evolución temporal en el formalismo Hamiltoniano de la mecánica clásica ($\rightarrow \dot{f} = \{f, H\}$).

El tercer esquema que nos interesa considerar (y que resultará ser el más relevante para nuestros propósitos) es el esquema de interacción, también conocido como esquema de Dirac \rightarrow

• Esquema de Dirac

Este esquema es particularmente conveniente cuando tenemos un Hamiltoniano que está compuesto aditivamente por dos términos: uno independiente del tiempo ($H_{s,0}$) y uno con una dependencia temporal explícita ($V_s(t)$). Así, sea

$$H_s = H_{s,0} + V_s(t) \quad (6)$$

el Hamiltoniano del sistema, en el esquema de Schrödinger.

Para evitar confusiones, denotemos con $|\phi_s(t)\rangle$ al estado que da la evolución temporal en el esquema de Schrödinger. Es decir, $|\phi_s(t)\rangle$ es solución de la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi_s(t)\rangle = H_s |\phi_s(t)\rangle, \quad (7)$$

que a su vez es equivalente a $|\phi_s(t)\rangle = U_s(t, t_0) |\phi_s(t_0)\rangle$, con $U_s(t, t_0)$ solución a la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_s(t, t_0) = H_s U_s(t) \quad (8)$$

→ Nótese que debido a que H_s tiene una dependencia temporal (a través de $V_s(t)$), ya no es posible afirmar que el operador de evolución temporal (solución de la ec. (8)) es simplemente el exponencial del Hamiltoniano.

En particular, nótese que $V_s(t_1)$ y $V_s(t_2)$ (para $t_1 \neq t_2$) pueden perfectamente ser operadores que no conmutan entre sí!

Como la evolución temporal que genera el término $H_{s,0}$ es "armónica" (i.e. de la forma $e^{-itH_{s,0}/\hbar}$) resulta ser muy buena idea "sustraer" esta parte de la evolución temporal, para concentrarnos así en el efecto que tiene el término $V_s(t)$.

Para esto introducimos las siguientes nociones de "estado" y "observable" (en el esquema de Dirac):

$$(\hbar \equiv 1)$$

$$\text{Estados} \rightarrow |\Psi_D(t)\rangle := e^{iH_{0,s}t} |\phi_s(t)\rangle \quad (9)$$

$$\text{Observables} \rightarrow A_D(t) := e^{iH_{0,s}t} A_s(t) e^{-iH_{0,s}t} \quad (10) \quad (\Rightarrow H_{0,D} = H_{0,s} \equiv H_0)$$

Para ver qué utilidad tienen las definiciones (9), (10), calculemos la derivada temporal de $|\Psi_D(t)\rangle \rightarrow$

$$\begin{aligned} i\partial_t |\Psi_D(t)\rangle &= (i\partial_t e^{iH_0 t}) |\phi_s(t)\rangle + e^{iH_0 t} (i\partial_t |\phi_s(t)\rangle) \\ &= -H_0 e^{iH_0 t} |\phi_s(t)\rangle + e^{iH_0 t} H_s |\phi_s(t)\rangle \\ &= e^{iH_0 t} \underbrace{(-H_0 + H_s)}_{= V_s(t)} |\phi_s(t)\rangle \\ &= e^{iH_0 t} V_s(t) |\phi_s(t)\rangle \\ &= \underbrace{e^{iH_0 t} V_s(t) e^{-iH_0 t}}_{= V_D(t)} |\Psi_D(t)\rangle \Rightarrow \boxed{i\partial_t |\Psi_D(t)\rangle = V_D(t) |\Psi_D(t)\rangle} \quad (11) \\ &= \underbrace{e^{iH_0 t} V_s(t) e^{-iH_0 t}}_{= V_D(t)} |\Psi_D(t)\rangle \end{aligned}$$

→ Vemos así que, en el esquema de Dirac, la evolución temporal se ha definido de tal forma que solo debemos concentrarnos en el efecto que tiene el término de interacción sobre la dinámica.

¿Cuál es el operador de evolución en este contexto?

$$\begin{aligned}
 |\Psi_D(t)\rangle &= e^{iH_0 t} |\phi_S(t)\rangle = e^{iH_0 t} U_S(t, t_0) |\phi_S(t_0)\rangle \\
 &= \underbrace{e^{iH_0 t} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0}}_{\doteq U_D(t, t_0)} \underbrace{e^{iH_0 t_0} |\phi_S(t_0)\rangle}_{|\Psi_D(t_0)\rangle}
 \end{aligned}$$



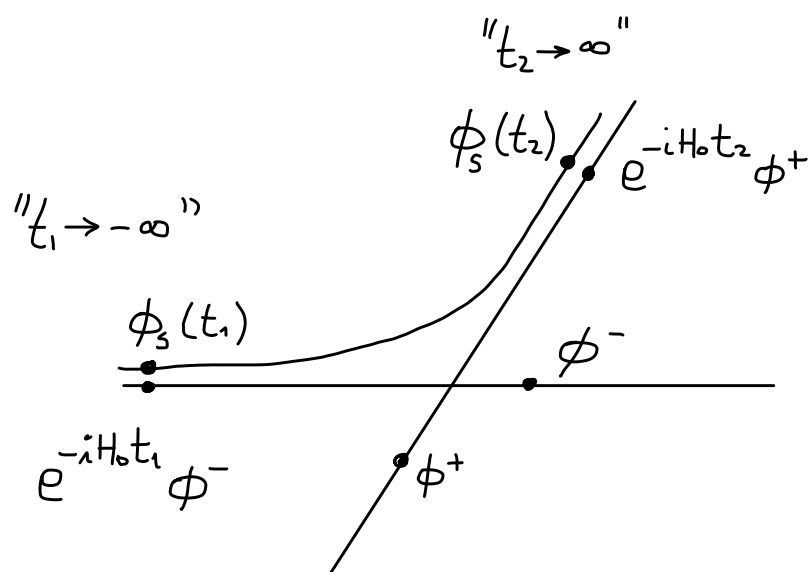
Este cálculo justifica la siguiente definición (operador de evolución temporal, en el esquema de Dirac):

$$\boxed{U_D(t, t_0) = e^{iH_0 t} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0}} \quad (12)$$

Está claro, por la forma como hemos definido los operadores de evolución en los 3 esquemas, que el valor esperado de un observable no depende del esquema en el que sea calculado:

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_D(t), A_D(t) \Psi_D(t) \rangle &= \langle e^{iH_0 t} \phi_S(t), e^{iH_0 t} A_S e^{-iH_0 t} e^{iH_0 t} \phi_S(t) \rangle \\
 \text{Dirac} \swarrow &= \langle \phi_S(t), A_S \phi_S(t) \rangle \leftarrow \text{Schrödinger} \\
 &= \langle \phi_S(0), A_H(t) \phi_S(0) \rangle \\
 &\quad \nwarrow \text{Heisenberg.}
 \end{aligned}$$

Con los anteriores preparativos podemos ya pasar al tema que nos interesa, que es la obtención de una fórmula perturbativa para el operador de scattering.



$$H = H_0 + V$$

Queremos:

$$\phi_s(t_1) \approx e^{-iH_0 t_1} \phi^-$$

$$\phi_s(t_2) \approx e^{-iH_0 t_2} \phi^+$$

¿Cuál es la (amplitud de) probabilidad de que $\phi_s(t)$ sea de la forma " $e^{-iH_0 t} \phi^+$ " en el futuro remoto (i.e., asintóticamente) dado que en el pasado remoto era de la forma " $e^{-iH_0 t} \phi^-$ " ?

$$\mathcal{A}(t_2, t_1) := \langle e^{-iH_0 t_2} \phi^+, \phi_s(t_2) \rangle = \langle e^{-iH_0 t_2} \phi^+, U_S(t_2, t_1) \phi_s(t_1) \rangle$$

$$\begin{aligned} &\approx \langle e^{-iH_0 t_2} \phi^+, U_S(t_2, t_1) e^{-iH_0 t_1} \phi^- \rangle \\ &\stackrel{"t_1 \rightarrow -\infty"}{\approx} \langle \phi^+, \underbrace{e^{iH_0 t_2} U_S(t_2, t_1) e^{-iH_0 t_1}}_{U_D(t_2, t_1)} \phi^- \rangle \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow \mathcal{A} := \lim_{\substack{t_2 \rightarrow \infty \\ t_1 \rightarrow -\infty}} \langle \phi^+, U_D(t_2, t_1) \phi^- \rangle \quad (13)$$

Definición

$$\mathcal{S} := \lim_{\substack{t_2 \rightarrow \infty \\ t_1 \rightarrow -\infty}} U_D(t_2, t_1) \quad (14)$$

"Operador de scattering"

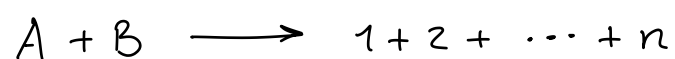
El operador de scattering, tal como lo acabamos de definir, es uno de los objetos fundamentales (desde el punto de vista teórico) de la física de partículas. Esto se debe a que, si conocemos el operador S , podemos calcular las amplitudes de transición entre diferentes estados asintóticos y, por lo tanto, podemos también calcular secciones eficaces.

Para poder calcular secciones eficaces en situaciones realistas, debemos primero dar respuesta a la siguiente pregunta:

¿Cuál es la relación explícita entre el operador de scattering y la sección eficaz?

Para responder a esta pregunta, procederemos por etapas.

Anticipando un poco el hecho de que en física de altas energías las colisiones entre partículas pueden dar a procesos de creación/destrucción de partículas, consideremos un proceso en el cual dos partículas A y B chocan, dando lugar a n partículas producto:



En mecánica cuántica no-relativista esto no puede ocurrir. Sin embargo, en ese caso podemos asumir que $n=2$ y que las partículas "producidas" son las mismas A y B , que han cambiado su energía y momento lineal como consecuencia de la colisión.

Sean E_A y E_B las energías de las partículas incidentes A y B , y denotemos con \vec{v}_{AB} el vector de velocidad relativa entre las mismas antes del choque. Si, como consecuencia de la colisión entre A y B , se producen n partículas con vectores de momento lineal $\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_n$

y energías E_1, E_2, \dots, E_n , entonces es posible mostrar que la sección eficaz diferencial toma la forma

$$d\sigma_{fi}(A+B \rightarrow 1+2+\dots+n) = \frac{(2\pi)^{10} \delta(P^{(i)} - P^{(f)}) |T_{fi}|^2}{2E_A 2E_B |\vec{v}_{AB}|} \prod_{i=1}^n \frac{d^3\vec{k}_i}{2E_i}, \quad (15)$$

donde T_{fi} es el "elemento matricial" (i = estado inicial, f = estado final) de un operador T que, en esencia, podemos considerar como proporcional a $S-1$:

$$T \propto S - 1.$$

En realidad hay bastantes detalles técnicos detrás de la afirmación anterior, pero ya tendremos ocasión de justificarla de forma apropiada.

La fórmula (15) corresponde a la expresión relativista que usaremos, especializada a un marco de referencia en el que la vel. relativa de A y B es \vec{v}_{AB} . En ese contexto (el de la relatividad espacial), debemos hablar acerca de conservación de energía-momento (un 4-vector), así que $P^{(i/f)}$ representa el 4-vector de energía-momento inicial/final. En el caso no-relativista, y para colisiones elásticas, lo que tendremos será conservación (por aparte) del momento lineal total y de energía $\rightarrow \delta(\vec{P}_f - \vec{P}_i) \delta(E_f - E_i)$.

Para $f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ (funciones de Schwartz) con transformadas de Fourier \tilde{f}, \tilde{g} , tenemos (cf. teorema X1.42 en Simon & Reed, vol III):

$$\langle f, (S-1)g \rangle = (-2\pi i) \int \tilde{f}^*(\vec{k}) \tilde{g}(\vec{k}') T(\vec{k}, \vec{k}') \delta(k^2 - k'^2) d^3\vec{k} d^3\vec{k}' \quad (16)$$

Esta identidad puede escribirse también de la siguiente forma:

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \delta(k - k') - 2\pi i T(\vec{k}, \vec{k}') \delta(k^2 - (k')^2), \quad (17)$$

donde $S(\vec{k}, \vec{k}')$ debe ser entendido como un kernel integral para S .

Con esto hemos dado una respuesta parcial a nuestra pregunta:

- La sección eficaz $d\sigma_{fi}$ se puede escribir en términos de $T_{fi} \equiv T(\vec{k}, \vec{k}')$, según la identidad (15).
- Por otro lado, la identidad (16) y (17) nos indican que hay una relación estrecha entre el operador S y el "kernel" $T(\vec{k}, \vec{k}')$

Sin embargo, lo que no hemos dicho es cómo calcular $T(\vec{k}, \vec{k}')$. La respuesta a esta pregunta es relativamente fácil de dar: basta con conocer las soluciones de energía positiva ($E = \hbar^2 k^2 / 2m$; $k = k'$) a la ecuación de Schrödinger

$$(H_0 + V)\Psi = E\Psi, \quad (18)$$

donde Ψ es una función de la forma

$$\Psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (19)$$

Si θ representa el ángulo entre \vec{k} y \vec{k}' , entonces tenemos (Reed & Simon, vol. III, §X1.6):

$$f(k, \theta) = -2\pi^2 T(\vec{k}, \vec{k}') \quad (20)$$

Un análisis de la corriente de probabilidad asociada a $\Psi(\vec{x})$ nos permite mostrar que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \theta)|^2, \quad (21)$$

que no es otra cosa que un caso particular de (15).

Más adelante nos ocuparemos de justificar adecuadamente todas estas afirmaciones.

