Fórmulas covariantes para la matriz S (parte 1).

Habiendo desarrollado todas las herramientas necesarias para formular una teoría física que describa la interacción electromagnética (la electrodinámica cuántica), lo único que nos hace falta es explicar cómo "aterrizar" los conceptos que hemos discutido (campos cuánticos, orden normal/temporal, operador S, serie de Dyson) para poder calcular cantidades físicas que sean relevantes desde el punto de vista fenomenológico / experimental. Entre las cantidades físicas más relevantes se encuentran (i) la sección transversal (o sección "eficaz") y (ii) la "rata de decaimiento". Por razones de tiempo, aquí nos concentraremos en la sección eficaz.

El objetivo de estas notas (parte 1 + parte 2) es justificar, de forma más o menos razonable, la siguiente fórmula, que describe un proceso de scattering de la forma $A + B \longrightarrow 1 + 2 + \cdots + n$:

$$\boxed{d^{3n}\sigma_{fi}\,(A+B \to 1+2+\cdots+n) = \frac{(2\pi)^{10}\,\delta\left(P^{(i)}-P^{(f)}\right)}{2E_A\,2E_B\,\|\vec{v}_{AB}\|}\,|T_{fi}|^2 \prod_{i=1}^{n} \frac{d^3\vec{k}_i}{2E_i}} \qquad (1)$$

Comencemos por describir algunos de los términos que aparecen en esta fórmula.

- Esta fórmula describe la sección eficaz diferencial para un proceso de dispersión (scattering) en el que hay 2 partículas incidentes, que denotamos con "A" y "B". Como resultado de la "colisión" de A y B, se generan n-partículas producto: $1, 2, \ldots, n$.

  Nótese que este tipo de procesos no pueden ser descritos en el marco de la mecánica cuántica no-relativista, en la cual el número de partículas no cambia.

- Las energías de las partículas incidentes de denotan con E_A y E_B, mientras que las energías de las partículas producidas en la colisión están dadas por $E_1, E_2, \dots, E_n$.
- Al tratarse de una sección eficaz <u>diferencial</u>, estamos considerando una situación en la que el momento de la i-ésima partícula será $\vec{k}_i$, con su correspondiente energía $E_i = \sqrt{(m_i)^2 + \|\vec{k}_i\|^2}$. La dirección de movimiento de esta partícula debe corresponder a cierta apertura angular (ángulo sólido diferencial) $d\Omega_i$. Sin embargo, en (1) no aparece explícitamente este diferencial. En su lugar aparece el elemento de "volumen" $\dfrac{d^3\vec{k}_i}{2E_i}$ que, como hemos visto, es invariante de Lorentz. Notemos, en todo caso, que al usar coordenadas esféricas tendremos $\vec{k}_i \longleftrightarrow (k_i \equiv \|\vec{k}_i\|, \theta_i, \phi_i)$, de tal forma que
$$d^3\vec{k}_i = k_i^2 \sin\theta_i \, d\theta_i \, d\phi_i \equiv k_i^2 \, d\Omega_i \qquad (2)$$
- Como cada uno de los términos de la forma (2) es un diferencial de orden 3, y como tenemos n términos de estos, la sección eficaz (1) es un diferencial de orden $3n$. De ahí la notación "$d^{3n}\sigma$" para esta.
- El delta de Dirac $\delta(P^{(i)} - P^{(f)})$ es un término que aparece para asegurar la conservación de energía-momento $\longrightarrow$ $P^{(i)}$: 4-vector de energía-momento inicial, $P^{(f)}$: 4-vector de energía-momento final. Esto es algo impuesto a la fuerza. Todo lo contrario: como veremos, es una consecuencia de la simetría de traslación espacio-temporal característica del espacio de Minkowski.
- EL término "$2E_A 2E_B \|\vec{v}_{AB}\|$" es un término cinemático que incluye las energías de las partículas incidentes, así como sus velocidades relativas.

En este sentido, esta fórmula todavía no ha sido escrita de forma "manifiestamente covariante" (algo que haremos luego). La ventaja que tiene haber escrito este término de esta forma es que hace referencia a un marco donde la colisión es colineal, de tal forma que el "flujo incidente" se deja calcular de forma sencilla en términos de la velocidad relativa de las partículas A y B.

- Todos los términos que hemos descrito hasta ahora son de carácter cinemático. La dinámica (es decir, la naturaleza de la interacción) entra a través del término $|T_{fi}|^2$ que es el cuadrado del elemento matricial $T_{fi} = \langle f|T|i\rangle$ de un operador "T" que está íntimamente relacionado con el operador S. El estado "$|i\rangle$" hace referencia al estado (cuántico) de las partículas A y B <u>antes</u> de la colisión ("estado inicial"), mientras que "$|f\rangle$" corresponde al "estado final", que contiene las n-partículas producto de la interacción.

$\longrightarrow$ Es en este último término, el que involucra al operador T, en el que nos queremos concentrar en estas notas. Comenzaremos por retomar las fórmulas de scattering que trabajamos previamente para el caso no-relativista. Al reescribir las expresiones ya conocidas en un lenguaje de operadores más apropiado para la física de altas energías, habremos: (i) justificado el ansatz de ondas parciales desde el punto de vista de la <u>dinámica</u> y (ii) avanzado un buen "trecho" en el camino para entender adecuadamente la fórmula (1).

Volvamos momentáneamente a lo que fue el punto de partida para nuestro estudio de la teoría de scattering en mec. cuántica no-relativista; es decir, el ansatz de ondas parciales ("condición de radiación de Sommerfeld"):

$$\Psi(\vec{x}) = e^{ikx^3} + f(k,\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r}. \qquad (3)$$

Haciendo uso de las corrientes de probabilidad $\vec{J}_{in}, \vec{J}_{out}$, así como de la definición fenomenológica de la sección eficaz, obtuvimos

$$d\sigma := \frac{\left(\begin{array}{l}\text{número de partículas dispersadas} \\ \text{(por u. de tiempo) en un ángulo sólido } d\Omega\end{array}\right)}{\left(\begin{array}{l}\text{número de partículas incidentes,} \\ \text{por unidad de área y por u. de tiempo}\end{array}\right)} = \frac{\vec{J}_{out}\cdot\hat{e}_r r^2 d\Omega}{\|\vec{J}_{in}\|} = |f(k,\theta)|^2 d\Omega \qquad (4)$$

Una primera aproximación a la relación entre (1) y (4) resulta como consecuencia de las siguientes

<u>Observaciones:</u>

- Tanto en (3) como en (4) está implícita la hipótesis de que durante el proceso de dispersión se conserva la energía (scattering elástico). Estamos también asumiendo que el vector de momento de la partícula incidente va sobre el eje z : $\vec{k}_{in} = (0,0,k)$, de tal forma que para la onda plana (onda incidente) en (3) se tiene $e^{i\vec{k}_{in}\cdot\vec{x}} = e^{ikx^3}$.
  El vector de momento de la onda dispersada es $\vec{k}_{out}$, donde $\|\vec{k}_{out}\| = \|\vec{k}_{in}\| = k$ (scattering elástico) con componentes, en coordenadas polares, (k,θ,ϕ).
- El análisis que llevaremos a cabo nos permitirá expresar la amplitud $f(k,\theta)$ como un elemento matricial (entre el "estado inicial" etiquetado por $\vec{k}_{in}$ y el "estado final" etiquetado por $\vec{k}_{out}$) de un operador T que es justo el que aparece en (1):

$$\begin{array}{l}\|\vec{k}_{in}\| = \|\vec{k}_{out}\| = k; \\ \vec{k}_{in}\cdot\vec{k}_{out} = k^2\cos\theta\end{array} \rightsquigarrow \qquad \boxed{f(k,\theta) \propto \langle \vec{k}_{out} | \mathsf{T} | \vec{k}_{in} \rangle} \qquad (5)$$

Los operadores de onda $\Omega^{\pm}$

Un paso importante en el análisis que estamos presentando consiste en la motivación y definición de los (así llamados) operadores de onda, también conocidos como operadores de Møller.

Como "bono", nos acercaremos también a la respuesta de una pregunta que hasta ahora ha permanecido abierta: ¿Cómo justificar el ansatz de Sommerfeld desde el punto de vista de la dinámica?

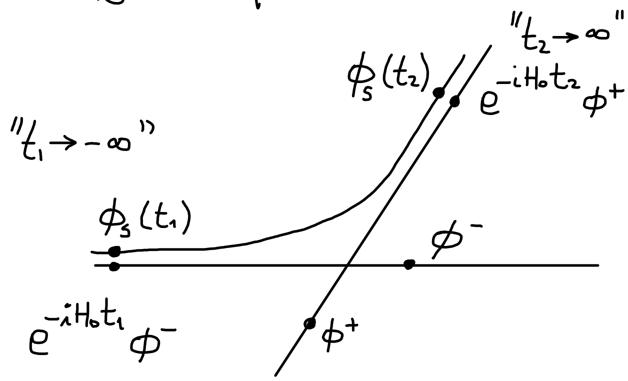
Recordemos el planteamiento que nos llevó a la definición del operador de scattering.

$\longrightarrow$ Tenemos un Hamiltoniano de la forma $H = H_0 + V$.

En el esquema de Schrödinger, la evolución temporal del sistema se da a través de $t \mapsto \phi_s(t)$, donde ϕ_s es solución de la ec. de Schrödinger, $-i\partial_t \phi_s = H\phi_s$.

Asumimos que en el "pasado remoto" $(t_1 \to -\infty)$ el comportamiento asintótico del estado ϕ_s es como el de un estado libre, es decir, asumimos que existe $\phi^- \in \mathcal{H}$ (donde $\mathcal{H}$ = espacio de Hilbert) tal que $\phi_s(t_1) \approx e^{-iH_0 t_1}\phi^-$ para t_1 negativo, con $|t_1|$ suficientemente grande. De igual forma, asumimos que existe $\phi^+ \in \mathcal{H}$ tal que para t_2 positivo, $|t_2|$ suficientemente grande, se tenga $\phi_s(t_2) \approx e^{-iH_0 t_2}\phi^-$.

Si esto es así, decimos que el Hamiltoniano satisface la condición de "completitud asintótica" (asymptotic completeness). Como ya habíamos visto, la siguiente figura captura la esencia del concepto:



$H = H_0 + V$

Queremos:

$$\phi_s(t_1) \approx e^{-iH_0 t_1}\phi^- \qquad \phi_s(t_2) \approx e^{-iH_0 t_2}\phi^+ \tag{6}$$

Intentemos ahora precisar en qué sentido la condición asintótica (6) puede ser entendida, desde un punto de vista matemático.

Asumiendo, por simplicidad, que H no depende de t, tenemos $\phi_s(t) = e^{-itH}\phi_s(0)$.

Por lo tanto, una condición como

$$\phi_s(t) \approx e^{-iH_0 t}\phi^{\pm} \qquad (t \to \pm\infty)$$

se puede formular como la condición de que el siguiente límite exista (y sea igual a cero):

$$\lim_{t\to\pm\infty} \| e^{-iH_0 t}\phi^{\pm} - e^{-iHt}\phi_s(0)\| = 0 \tag{7}$$

Si U es un operador unitario y $x, y \in \mathcal{H}$, entonces

$$\begin{aligned} \|x - Uy\|^2 &= \langle x - Uy, x - Uy\rangle = \langle U^*(x - Uy), U^*(x - Uy)\rangle \\ &= \langle U^* x - y, U^* x - y\rangle \\ &= \|U^* x - y\|^2, \end{aligned}$$

de tal forma que podemos escribir

$$\| e^{-iH_0 t}\phi^{\pm} - e^{-iHt}\phi_s(0)\| = \| e^{iHt} e^{-iH_0 t}\phi^{\pm} - \phi(0)\| .$$

De esta forma, la existencia del límite (7) es equivalente a la existencia(*) de los siguientes <u>operadores de onda</u>:

$$\boxed{\Omega^{\pm} := \lim_{t\to\pm\infty} e^{iHt} e^{-iH_0 t} .} \tag{8}$$

Es fácil verificar que, si los operadores de onda existen, entonces el operador S puede ser escrito de la siguiente forma:

$$\boxed{S = (\Omega^{+})^{*}\Omega^{-}.} \tag{9}$$

(*) Nota técnica: el límite en (8) debe ser entendido en el sentido de la convergencia fuerte de operadores.

Para verificar la validez de (9), basta con recordar la expresión para la amplitud de probabilidad $\mathcal{A}(\phi^+,\phi^-)$:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(\phi^+,\phi^-) &= \lim_{\substack{t_2\to\infty\\ t_1\to-\infty}} \langle \phi^+, e^{iH_0t_2}U_S(t_2,t_1)e^{-iH_0t_1}\phi^-\rangle \\ &= \lim_{\substack{t_2\to\infty\\ t_1\to-\infty}} \langle \phi^+, e^{iH_0t_2}\, e^{-i(t_2-t_1)H}\, e^{-iH_0t_1}\phi^-\rangle \\ &= \lim_{\substack{t_2\to\infty\\ t_1\to-\infty}} \langle \phi^+, \left(e^{iHt_2}e^{-iH_0t_2}\right)^* e^{iHt_2}e^{iHt_1}e^{-iH_0t_1}\phi^-\rangle \\ &= \langle \phi^+, (\Omega^+)^*\Omega^-\phi^-\rangle .\end{aligned}$$

El resultado se sigue de la definición misma del operador $\mathbb{S}$:

$$\mathcal{A}(\phi^+,\phi^-) \equiv \langle \phi^+, \mathbb{S}\phi^-\rangle.$$

<u>Proposición</u> Los operadores de onda satisfacen la siguiente identidad:

$$\boxed{H\Omega^{\pm} = \Omega^{\pm}H_0 .} \qquad (10)$$

La idea de la demostración es la siguiente.

Por definición tenemos $\Omega^{\pm} = \lim_{t\to\pm\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}$, luego podemos calcular

$$\lim_{t\to\pm\infty} e^{itH}e^{-itH_0} = \lim_{t\to\pm\infty} e^{i(t+s)H}e^{-i(t+s)H_0} = e^{isH}\left(\lim_{t\to\pm\infty} e^{itH}e^{-itH_0}\right)e^{-isH_0}$$

$\Rightarrow \quad \Omega^{\pm}e^{isH_0} = e^{isH}\Omega^{\pm}$. Derivando respecto a s y evaluando el resultado en s = 0, se obtiene el resultado deseado.

<u>Observación</u>

La identidad (10) tiene la siguiente consecuencia importante. Las ondas planas $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ son funciones propias (¡así no estén en $\mathcal{H}$!) del Hamiltoniano libre: $H_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = E_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$, con $E_k = \hbar^2k^2/2m$. Denotando los correspondientes "kets" como $|\phi_k^{(0)}\rangle$, de tal forma que en la representación de posición se tenga $\langle\vec{x}|\phi_k^{(0)}\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$, podemos escribir $H_0|\phi_k^{(0)}\rangle = E_k|\phi_k^{(0)}\rangle$. Notemos ahora que la función de onda (3) con la que hemos estudiado scattering no-relativista, debe ser también función propia, pero no de H_0, sino del Hamiltoniano total H. Sin embargo, por tratarse de scattering elástico, requerimos que la energía siga siendo E_k.

Ahora, notemos que la identidad (10) nos permite obtener "vectores propios" de H a partir de "vectores propios" de H_0, con el mismo valor propio. En efecto, si $H_0|\phi_k^{(0)}\rangle = E_k|\phi_k^{(0)}\rangle$, entonces por (10) tenemos

$$H\Omega^{\pm}|\phi_k^{(0)}\rangle = \Omega^{\pm}H_0|\phi_k^{(0)}\rangle = E_k\Omega^{\pm}|\phi_k^{(0)}\rangle$$

$\Rightarrow$ $\Omega^{\pm}|\phi_k^{(0)}\rangle$ es vector propio de H, con valor propio E_k.

Esto nos lleva a pensar que $\Omega^{\pm}|\phi_k^{(0)}\rangle$ debería estar relacionado con la función de onda (3), para alguna de las 2 opciones (Ω^{+}/Ω^{-}).

Mostrar que esto de hecho es cierto y que, por lo tanto, la función de onda dispersada (Sommerfeld) se puede obtener a partir de la acción de un operador de onda sobre $|\phi_k^{(0)}\rangle$ (onda plana). Para mostrar esto, primero debemos introducir la ecuación de Lippmann-Schwinger.

La ecuación de Lippmann-Schwinger.

Manteniendo la notación introducida arriba, según la cual $|\phi_k^{(0)}\rangle$ es una onda plana ($\langle\vec{x}|\phi_k^{(0)}\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$) consideremos, motivados por la observación previa, un estado de la forma

$$|\phi_k\rangle = |\phi_k^{(0)}\rangle + |\eta\rangle, \qquad (11)$$

donde buscamos determinar $|\eta\rangle$ a partir de la condición de que $|\phi_k\rangle$ satisfaga $H|\phi_k\rangle = E_k|\phi_k\rangle$, con $E_k = \hbar^2k^2/2m$, $H = H_0 + V$.

De esa condición se sigue $(H_0 - E_k)|\phi_k\rangle = -V|\phi_k\rangle$.

Teniendo en cuenta que $(H_0 - E_k)|\phi_k^{(0)}\rangle = 0$, obtenemos

$$(H_0 - E_k)|\eta\rangle = -V|\phi_k\rangle.$$

"Formalmente", por lo tanto, debemos tener

$$\text{“}\ |\eta\rangle = -(H_0 - E_k)^{-1} V |\phi_k\rangle\ \text{”} \qquad (*)$$

Recordemos (álgebra lineal!) que una matriz que tenga valores propios iguales a cero no puede ser invertible ($\operatorname{Ker} A \neq \{0\} \Rightarrow A^{-1}$ <u>no</u> está definida).

Ahora, como E_k es valor propio de H_0 con vector propio $|\phi_k^{(0)}\rangle$, tenemos que $0 \neq |\phi_k^{(0)}\rangle \in \operatorname{Ker}(H_0 - E_k)$.

H_0 no es una matriz. Es un operador (en general no-acotado) actuando en un espacio de Hilbert. Pero en virtud de que $\operatorname{Ker}(H_0 - E_k) \neq \{0\}$, sigue siendo cierto que $(H_0 - E_k)$ <u>no</u> es invertible.

Sin embargo, si añadimos a E_k una pequeña parte imaginaria, $E_k \mapsto E_k + i\varepsilon$, lograremos que $H_0 - (E_k + i\varepsilon))$ <u>sea</u> un operador invertible(†). Por esta razón, usaremos los razonamientos anteriores solo a manera de <u>motivación</u> y reemplazaremos la expresión formal(‡) $(*)$ por la siguiente ecuación, que determina a $|\phi_k\rangle$ de forma implícita (aquí hacemos uso de (11)):

<u>Ecuación de Lippmann-Schwinger.</u>

$$\boxed{|\phi_k\rangle = |\phi_k^{(0)}\rangle - \big(H_0 - (E_k + i\varepsilon)\big)^{-1} V |\phi_k\rangle} \qquad (12)$$

en física: función de Green

(†) Nota técnica: el concepto relevante aquí es el de "resolvente" de un operador lineal, concepto fundamental del análisis funcional.

(‡) Aquí con "formal" queremos decir que estamos manipulando objetos cuya validez, desde un pto. de vista matemático, es más que dudosa...

La ec. (12), conocida como ec. de Lippmann-Schwinger, es una ecuación matemáticamente consistente, la existencia de cuyas soluciones está garantizada para potenciales V que satisfacen ciertas propiedades razonables de decaimiento.

Def. (Función de Green "libre" e "interactuante")

$$G_0 := -\left(H_0 - (E_k + i\varepsilon)\right)^{-1}; \qquad G := -\left(H - (E_k + i\varepsilon)\right)^{-1} \qquad (13)$$

De las definiciones de G y G_0 se siguen las siguientes identidades:

$$G = G_0 + G_0 V G, \qquad (14)$$

$$G_0 = G - G V G_0. \qquad (15)$$

Tanto (14) como (15) se siguen fácilmente de la siguiente identidad, válida para operadores A y B invertibles:

$$A^{-1} - B^{-1} = B^{-1}(B-A)A^{-1} \qquad (16).$$

Derivación de (16):

$$\begin{aligned} B - A &= (\mathbb{1} - AB^{-1})B = (A - AB^{-1}A)A^{-1}B \\ &= AB^{-1}(B-A)A^{-1}B \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \mathbb{1} - AB^{-1} = AB^{-1}(B-A)A^{-1}$$

$$\Rightarrow \quad A^{-1} - B^{-1} = B^{-1}(B-A)A^{-1}.$$

Escribiendo la ec. de L-S en términos de G_0, tenemos

$$|\phi_k\rangle = |\phi_k^{(0)}\rangle + G_0 V |\phi_k\rangle. \qquad (17)$$

Reemplazando (15) en (17) podemos obtener

$$\begin{aligned} |\phi_k\rangle &\overset{(17)}{=} |\phi_k^{(0)}\rangle + G_0 V |\phi_k\rangle \\ &\overset{(15)}{=} |\phi_k^{(0)}\rangle + (G - GVG_0)V|\phi_k\rangle \\ &= |\phi_k^{(0)}\rangle + GV|\phi_k\rangle - GV\underbrace{G_0 V|\phi_k\rangle}_{\overset{LS}{=}\ |\phi_k\rangle - |\phi_k^{(0)}\rangle} \\ &= |\phi_k^{(0)}\rangle + GV|\phi_k^{(0)}\rangle \end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{|\phi_k\rangle = (\mathbb{1} + GV)|\phi_k^{(0)}\rangle} \qquad (18)$$

Si ahora definimos un operador $\Omega^{out} := \mathbb{1} + GV$, entonces podemos reescribir (18) de la siguiente forma:

$$|\phi_k\rangle = \Omega^{out}\,|\phi_k^{(0)}\rangle . \qquad (19)$$

En este punto, vale la analizar el resultado, ec. (19), en el contexto de la observación que sigue a la ec. (10).

La escogencia de signo en la definición de la función de Green ($E_k \pm i\varepsilon$) (con $\varepsilon > 0$) en últimas determina el carácter del operador Ω que aparece en (19). La designación "out" corresponde a la escogencia $+i\varepsilon$. Como veremos, el operador Ω^{out} es justamente Ω^-.

Para mostrar que $\Omega^{out} = \Omega^-$, consideremos el siguiente cálculo:

Para $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, calculemos la derivada resp. a t de $e^{itH_0}e^{-itH}|\psi\rangle \longrightarrow$

$$\frac{d}{dt}\left(e^{itH_0}e^{-itH}|\psi\rangle\right) = i\left(e^{itH_0}H_0e^{-itH} + e^{iH_0t}(-H)e^{-itH}\right)|\psi\rangle$$

$$= e^{iH_0t}\,i\underbrace{(H_0 - H)}_{=-V}e^{-itH}|\psi\rangle = -i\,e^{iH_0t}\,V e^{-iHt}|\psi\rangle$$

$$\searrow$$

$$e^{iH_0t}e^{-iHt}|\psi\rangle - |\psi\rangle = \left(e^{it'H_0}e^{-it'H}|\psi\rangle\right)\Big|_{s=0}^{s=t} = \int_0^t \frac{d}{ds}\left(e^{isH_0}e^{-isH}|\psi\rangle\right)ds$$

$$= -i\int_0^t e^{isH_0}\,V e^{-isH}\,|\psi\rangle\,ds \qquad \Longrightarrow$$

$$\boxed{e^{iH_0t}e^{-iHt}|\psi\rangle - |\psi\rangle = -i\int_0^t e^{isH_0}\,V e^{-isH}\,|\psi\rangle\,ds} \qquad (20)$$

Para $|\phi_k^{(0)}\rangle$ el estado que corresponde a una onda plana ($\langle\vec{x}|\phi_k^{(0)}\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$), definamos $|\Psi_k\rangle := \Omega^-|\phi_k^{(0)}\rangle$.

Asumiendo Ω^- unitario, tenemos entonces $|\phi_k^{(0)}\rangle = (\Omega^-)^*|\Psi_k\rangle$.

Haciendo uso de (8) y (20), obtenemos

$$|\phi_k^{(0)}\rangle = (\Omega^-)^* |\Psi_k\rangle \overset{(8)}{=} \lim_{t\to-\infty} e^{iH_0t} e^{-iHt} |\Psi_k\rangle$$

por (10)

$$\overset{(20)}{=} |\Psi_k\rangle - i \lim_{t\to-\infty} \int_0^t e^{isH_0} V e^{-isE_k} |\Psi_k\rangle\, ds$$

$$= |\Psi_k\rangle - i \int_0^{-\infty} e^{is(H_0 - E_k - i\varepsilon)} ds \cdot V|\Psi_k\rangle$$

la adición de este término "$i\varepsilon$" ($\varepsilon \to 0^+$) corresponde a la escogencia de un contorno de integración...

$$= |\Psi_k\rangle + \frac{1}{(H_0 - E_k - i\varepsilon)} V|\Psi_k\rangle$$

$$\longrightarrow \quad |\Psi_k\rangle = |\phi_k^{(0)}\rangle + G_0 V |\Psi_k\rangle$$

Vemos que $|\Psi_k\rangle$ satisface la ecuación de Lippmann-Schwinger (17) y por lo tanto concluimos que $|\Psi_k\rangle \equiv |\phi_k\rangle = \Omega^- |\phi_k^{(0)}\rangle$, es decir, tenemos

$$\Omega^{out} = \mathbb{1} + G_0 V = \Omega^-, \qquad (21)$$

como queríamos mostrar. Este resultado nos permite entonces obtener de forma explícita la acción del operador Ω^-, si logramos calcular la función de Green G_0.

Recordemos el principio básico detrás de la definición de una función de Green:

Sea $P(D)$ un operador diferencial ($D = \frac{d}{dx}$, ∂_x, etc..)

Para solucionar la ec. inhomogénea $P(D)\varphi = f$, donde $f =$ "fuente", solucionamos primero la ec. para $f(x) = \delta(x)$ "fuente puntual" (aquí vamos a suprimir factores "i" o "2π"). A la solución la llamamos $G(x) \longrightarrow$

$$P(D_x) G(x,y) = \delta(x-y) \longrightarrow \text{Fourier} \rightarrow \quad P(k)\tilde{G}(k) = 1 \rightarrow \tilde{G}(k) = \frac{1}{P(k)},$$

así que la función de Green $\tilde{G}(k)$ es, básicamente, el "inverso" del operador $P(D)$, solo que en el espacio de Fourier.

$\longrightarrow$ Podemos obtener G_0 por medio de una transformada inversa de Fourier (ejercicio). El resultado es el siguiente ($k = \|\vec{k}\|$).

$$G_0(\vec{x},\vec{y}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{ik\|\vec{x}-\vec{y}\|}}{\|\vec{x}-\vec{y}\|}\,. \qquad (22)$$

Con este resultado, podemos ahora escribir la ec. de Lippmann-Schwinger en el espacio de posición:

Con $\langle\vec{x}|\phi_k^{(0)}\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ y $\langle\vec{x}|\phi_k\rangle \equiv \phi_k(\vec{x})$, tenemos:

$$|\phi_k\rangle = |\phi_k^{(0)}\rangle + G_0 V|\phi_k\rangle$$

$$\begin{aligned}
\phi_k(\vec{x}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \langle\vec{x}|G_0 V|\phi_k\rangle \\
&= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \int d^3\vec{y}\,\langle\vec{x}|G_0|\vec{y}\rangle\langle\vec{y}|V|\phi_k\rangle \\
&= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3\vec{y}\,\frac{e^{ik\|\vec{x}-\vec{y}\|}}{\|\vec{x}-\vec{y}\|}\,V(\vec{y})\,\phi_k(\vec{y})
\end{aligned}$$

Hemos obtenido la siguiente versión, como ecuación integral, para la ec. de Lippmann-Schwinger:

$$\boxed{\phi_k(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3\vec{y}\,\frac{e^{ik\|\vec{x}-\vec{y}\|}}{\|\vec{x}-\vec{y}\|}\,V(\vec{y})\,\phi_k(\vec{y}).} \qquad (23)$$

Ya hemos mostrado que $|\phi_k\rangle$ es vector propio de H con energía E_k. La forma (23) nos sugiere que $\phi_k(\vec{x})$ es de la forma (3). Si mostramos esto, habremos logrado justificar el ansatz de Sommerfeld desde un punto de vista dinámico, ya que, por definición $|\phi_k\rangle$ se construye a partir del operador de onda Ω^-:

$$|\phi_k\rangle = \Omega^-|\phi_k^{(0)}\rangle.$$

Lo que tenemos que hacer, entonces, es mostrar que el comportamiento asintótico de (23) para "$\|\vec{x}\|$" grande da lugar a una función de la forma (3) (onda esférica "saliente" + onda plana "incidente").

Dentro de las restricciones que se deben imponer sobre el potencial V está una condición de "decaimiento". Sin entrar en mayor detalle al respecto, supongamos que la región de influencia de $V(r)$ está en una esfera de radio R alrededor del origen. De esta forma podemos pensar que el dominio de integración en la integral de (23) se puede restringir a esta esfera $\longrightarrow \|\vec{y}\| \leq R$. Así, la condición asintótica corresponderá a la condición $\|\vec{x}\| \gg R$.

Supongamos entonces que en (23) tenemos $\|\vec{x}\| \gg \|\vec{y}\|$.

$$\rightarrow \quad \frac{1}{\|\vec{x}-\vec{y}\|} \approx \frac{1}{\|\vec{x}\|},$$

$$k\|\vec{x}-\vec{y}\| = \|\vec{k}\|\,\|\vec{x}\| \left\| \hat{x} - \frac{\vec{y}}{\|\vec{x}\|} \right\| = \|\vec{k}\|\,\|\vec{x}\| \cdot \sqrt{\underbrace{\left(\hat{x} - \frac{\vec{y}}{\|\vec{x}\|}\right)\cdot\left(\hat{x} - \frac{\vec{y}}{\|\vec{x}\|}\right)}_{= 1 - 2\frac{\vec{y}\cdot\hat{x}}{\|\vec{x}\|} + \cancel{\frac{\|\vec{y}\|^2}{\|\vec{x}\|^2}}}}$$

$k \equiv \|\vec{k}\|$

lo podemos despreciar

$$\approx \|\vec{k}\|\,\|\vec{x}\| \left(1 - 2\frac{\vec{y}\cdot\hat{x}}{\|\vec{x}\|}\right)^{1/2}$$

$$\approx \|\vec{k}\|\,\|\vec{x}\| \left(1 - \frac{1}{2}(2)\frac{\vec{y}\cdot\hat{x}}{\|\vec{x}\|}\right)$$

$$= \|\vec{k}\|\,\|\vec{x}\| - \vec{y}\cdot(k\hat{x})$$

Si definimos $\vec{k}' := k\hat{x}$ $\quad (\rightsquigarrow \vec{k}' = \text{"}\vec{k}_{out}\text{"})$, entonces podemos escribir:

$$\phi_k(\vec{x}) \approx e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3\vec{y}\,\frac{e^{ik\|\vec{x}\|}\,e^{-i\vec{y}\cdot\vec{k}'}}{\|\vec{x}\|}\,V(\vec{y})\,\phi_k(\vec{y})$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r}\underbrace{\left(\frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{y}\cdot\vec{k}'}\,V(\vec{y})\,\phi_k(\vec{y})\,d^3\vec{y}\right)}_{(*)}. \qquad (24)$$

Comparando (24) con (3) vemos que $f(k,\theta)$ está dado por $(*)$.

→ Hemos obtenido la siguiente fórmula (de gran importancia!) que nos permite expresar la amplitud de scattering $f(k,\theta)$ en términos de la función $\phi_k(x)$, solución de la ecuación de Lippmann-Schwinger:

$$f(k,\theta) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{y}\cdot\vec{k}'}\, V(\vec{y})\,\phi_k(\vec{y})\, d^3\vec{y}\,. \qquad (25)$$

Para poder relacionar (25) con el operador S de forma más explícita, reescribamos la integral de la siguiente forma:

$$\int e^{-i\vec{y}\cdot\vec{k}'}\, V(\vec{y})\,\phi_k(\vec{y})\, d^3\vec{y} = \int \left(\phi_{k'}^{(0)}(\vec{y})\right)^* V(\vec{y})\,\phi_k(\vec{y})\, d^3\vec{y}$$

$$= \langle \phi_{k'}^{(0)} | V | \phi_k \rangle$$

$$\Rightarrow f(k,\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle \phi_{k'}^{(0)} | V | \phi_k \rangle$$

$$\overset{(19),(21)}{=} -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle \phi_{k'}^{(0)} | V\Omega^- | \phi_k^{(0)} \rangle\,.$$

De esta forma, si definimos un operador $T := V\Omega^-$, entonces podemos escribir la relación anterior como

$$f(k,\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\, T_{k',k}\,, \qquad (26)$$

donde $T_{k',k} = \langle \phi_{k'}^{(0)} | T | \phi_k^{(0)} \rangle$ se denomina la "matriz T" (comparar con la ecuación (5)..).

<u>Teorema</u> (Reed-Simon, Scattering Theory, thm. XI.42)

Sean $f,g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ (funciones de Schwartz ≡ funciones suaves de decaimiento rápido) y sea S el operador de scattering, entonces se tiene que

$$\langle f, (S - \mathbb{1}) g\rangle = \text{FACTOR} \int d^3\vec{k}\, d^3\vec{k}' \left(\tilde{f}(\vec{k})\right)^* \delta(k'^2 - k^2)\, T_{k',k}\, \tilde{g}(k)\,. \qquad (27)$$

Observaciones

- Este teorema, al igual que todos los aspectos de la teoría de scattering no-relativista que hemos discutido en este curso, pueden ser establecidos de una forma matemáticamente rigurosa (ver, por ejemplo, la ref. de Simon-Reed mencionada arriba). El nivel de rigor matemático que estamos usando aquí es el mínimo que haga posible presentar los conceptos sin "estafar" al lector!
- Uno de los aspectos en los que claramente hemos renunciado al rigor matemático está en el hecho de que estamos procediendo como si las ondas planas $|\phi_k^{(0)}\rangle$ fueran elementos del espacio de Hilbert. Está completamente claro que, al no ser funciones de cuadrado integrable, se tiene que $|\phi_k^{(0)}\rangle \notin \mathcal{H}$.
- La anterior observación tiene 2 aspectos. El primero es que al manipular las funciones $\phi_k^{(0)}$ como si fueran elementos de $\mathcal{H}$, simplificamos significativamente los cálculos, a la vez que ganamos en intuición física, que es lo que más nos interesa. El segundo aspecto tiene que ver con que para trabajar con vectores en $\mathcal{H}$ deberíamos considerar "paquetes de onda". Es decir, si $\Psi \in \mathcal{H}$, escribimos (transf. Fourier!)

$$\Psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\vec{k}\ \tilde{\Psi}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} .$$

De esta forma, podemos pensar en $\Psi(x)$ como una "superposición lineal" de los "kets" $|\phi_k^{(0)}\rangle$. Resulta que para poder obtener la fórmula (1) para la sección eficaz diferencial, es indispensable trabajar con paquetes de onda.

- Según la observación anterior, así la definición $T := V\Omega^-$ no parezca problemática, la "matriz T", con elementos $\langle\phi_{k'}^{(0)}|T|\phi_k^{(0)}\rangle$ no ha sido obtenida haciendo uso del producto interior en $\mathcal{H}$ ($|\phi_k^{(0)}\rangle \notin \mathcal{H}$!!). Esto en realidad no es un problema, ya que podemos prescindir de hacer uso del operador T y más bien tomar directamente las ecs. (25), (26) como las que definen una función $(\vec{k}', \vec{k}) \longmapsto T_{k',k}$ que, se puede mostrar, está bien definida y es continua y (lo más importante) que en vista de la identidad (27) puede ser considerada un kernel integral para el operador $S - 1$.

De forma compacta, la anterior afirmación se puede expresar a través de la siguiente identidad:

$$S_{k',k} = \delta(k'-k) - (\text{factor})\,\delta(k^2 - k'^2)\, T_{k',k}. \qquad (28)$$

Esta fórmula (o su equivalente en forma integral en (27)) y el teorema que la justifica, es de gran importancia para nosotros, ya que nos permite completar el círculo de ideas con el que podemos conectar el ansatz de Sommerfeld ($f(k,\theta)$, ondas planas, enfoque "estacionario") con el operador de scattering (enfoque dinámico + punto de partida de la serie de Dyson).