



**UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA
METROPOLITANA**
Unidad Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Licenciatura en Física
Proyecto Terminal I: Investigación teórica

El programa bootstrap de la matriz S en sistemas fuertemente acoplados

Realizado por: **Francisco Javier Luján Alarcón**

Matrícula: **2183011843**

Para obtener el grado de: **Licenciatura en Física**

Asesor: **Dr. Luis Alberto Hernández Rosas**

Asesor: **Dr. Miguel Angel Bastarrachea Magnani**

Coordinador: **Dr. Marco Antonio Maceda Santamaría**

2 de octubre de 2024
Iztapalapa, Ciudad de México

Índice general

1. Teoría de dispersión	7
1.1. La ecuación de Lippmann-Schwinger	7
1.1.1. La función de Green	9
2. Matriz S	19
2.1. Dinámica de un sistema interactuante	19
2.2. Matriz S y sus propiedades	21
2.3. Estados ligados	24
2.4. Retrasos espaciales y temporales	24
3. Dispersión de potenciales no relativistas	27
3.1. Potencial ultra-local	27
3.2. Potencial de rango finito	29
3.3. Potencial de suave decaimiento	34
3.4. El átomo de Hidrógeno	37
4. Estados ligados y resonancias	41
4.1. Estados ligados: dos propiedades importantes	41
4.2. Resonancias	45
5. Conclusiones	51

Resumen

En este proyecto se proporcionará las herramientas necesarias para poder llevar a cabo el planteamiento del método *Bootstrap* y aplicarlo a sistemas cuyas interacciones están determinadas por potenciales de tres tipos: ultra local, de rango finito y de suave decaimiento. Estos potenciales, en principio, pueden ser atractivos o repulsivos. En el caso de los potenciales atractivos, estos pueden tener al menos un estado ligado. Un estado ligado es aquel en el cuál una partícula no tiene la energía suficiente para escapar del potencial y moverse libremente. En vez de eso, permanece dentro del rango de acción del potencial y su movimiento queda acotado por su valor de energía. La cantidad de estados ligados estará en función del tipo de potencial que da lugar a la interacción. La manera en la que se va a implementar este método involucra la construcción de la matriz S , un objeto matemático que relaciona estados iniciales con estados finales en un proceso de dispersión. De igual forma, la matriz S es un operador que posee propiedades que mencionaremos más adelante y que, al analizarlas matemáticamente, son de utilidad para determinar si hay estados ligados, cuántos y con qué fuerza de acoplamiento se dan. Analizar la matriz S también nos puede proporcionar la información necesaria para saber si un sistema puede tener estados metaestable, así como su intensidad o duración.

Introducción

Para estudiar el comportamiento de algún sistema a nivel microscópico el punto de partida es la ecuación de Schrödinger. En este caso abordaremos solo el caso no relativista, es decir, nos interesan por ahora los sistemas de bajas energías. Resolver la ecuación de Schrödinger nos da información sobre los estados del sistema y sobre las energías correspondientes a dichos estados, las cuales están asociadas a las interacciones que tienen lugar. También nos permitirá obtener información ciertos parámetros físicos que podemos medir mediante operadores. Las interacciones que vamos a abordar en este trabajo se deben a un potencial que puede ser de alguno de los siguientes tres tipos: los potenciales ultra-locales, también llamados potenciales de contacto, definidos a partir de una función delta de Dirac (es decir, definidos en un solo punto); los potenciales de rango finito, definidos para cierto intervalo $x \in (-a, a)$ y los potenciales con decaimiento suave, definidos en todo el espacio pero que cumplen que $V \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow \infty$. La matriz S es un elemento matemático que podemos expresar en su representación matricial y que nos relaciona los estados inicial y final del sistema. Entendemos por estado final al estado que se obtiene después de someter dos partículas a un proceso de dispersión. Para obtener la expresión de dicha matriz la idea es tomar los estados inicial y final en puntos lejanos, fuera del alcance del potencial en cuestión, de manera que podamos hacer ciertas aproximaciones para simplificar un poco el problema. Al hacer esto, nos conducirá a obtener una cierta expresión para la matriz S, la cual resulta ser una función compleja y su estructura va a depender del potencial que se esté estudiando. Como lo que resulta es una función compleja la tarea es analizar sus propiedades y darle interpretación física a los resultados que se obtengan.

Un estado libre es aquel que se da cuando el sistema no está sometido a interacciones externas, de manera que la dinámica es libre. Sus energías son continuas de modo que pueden asumir cualquier valor. Un estado ligado surge de la presencia de un potencial atractivo, el cual tiene la capacidad de confinar a una partícula o sistema en una región definida. En este caso se tiene un espectro de energía discreto y además esos valores son negativos. Un estado metaestable es aquel que presenta una estabilidad temporal pero que eventualmente puede decaer a un estado de menor energía.

Usaremos el método *Bootstrap* para aprovechar propiedades fundamentales de los sistemas cuánticos que podamos relacionar con operadores asociados a cantidades físicas que queramos medir. De esta manera, el método nos permite delimitar los intervalos para dichas mediciones y entonces obtener información relevante, como el espectro energético, sin tener que resolver explícitamente problemas complicados o en casos en los que no se tiene un fácil acceso al potencial.

En el capítulo 1 se dará un breve resumen de los conceptos e ideas más importantes que intervienen en un proceso de dispersión cuántica y se mostrará la manera para realizar el planteamiento en la forma más general de este problema y podremos notar que surge la función de Green de manera natural. También veremos que surge un elemento que proporciona las amplitudes relativas entre estados iniciales y finales. Este elemento, en su representación matricial es nuestra ya mencionada matriz S . Después se le dará la interpretación física de dichos resultados.

En el capítulo 2 plantaremos la manera de determinar la matriz S para un sistema en general y posteriormente identificaremos las propiedades que satisface dicha matriz, el significado físico que nos dan dichas propiedades y mostraremos también una manera de trabajar con la matriz S considerando un conjunto de eigenestados de paridad.

En el capítulo 3 abordaremos explícitamente los tres tipos de potenciales mencionados anteriormente. Mostraremos las propiedades analíticas de la matriz S en cada caso y su interpretación física. También tomaremos casos especiales para cada potencial con la finalidad de contrastar similitudes y diferencias en cuanto al comportamiento de la matriz S para cada potencial.

En el capítulo 4 detallaremos dos propiedades importantes de los polos asociados a estados ligados. La primera indica que parte imaginaria de dichos polos es positiva y que además la parte real es cero. También introducimos el concepto de resonancia proponiendo un polo arbitrario con parte real e imaginaria distintas de cero, lo que permite relacionarlas con cantidades como el tiempo de decaimiento.

Finalmente en el capítulo 5 se presentan las conclusiones de este trabajo. Se plantea la alternativa de usar este método para potenciales específicos que son relevantes en el estudio de interacciones fuertes.

Capítulo 1

Teoría de dispersión

1.1. La ecuación de Lippmann-Schwinger

El punto de partida de nuestro trabajo será recordar la ecuación de Schrödinger, que rige la dinámica de cualquier sistema cuántico. Expresándola en términos de operadores, la escribimos como:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = (\hat{T} + \hat{V})|\Psi\rangle, \quad (1.1)$$

donde \hat{T} y \hat{V} son los operadores de energía cinética y potencial, respectivamente, y $|\Psi\rangle$ es un eigenestado del operador hamiltoniano \hat{H} .

Escogiendo la representación en la base de posiciones, podemos reescribir 1.1 de la siguiente forma:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{x}, t) \Psi. \quad (1.2)$$

Ahora, para estudiar la teoría de dispersión partiremos del caso en el que el sistema es independiente del tiempo. Podemos proponer que la solución está dada por un producto de funciones, una dependiente solo de la posición y otra dependiente solo del tiempo:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})\phi(t), \quad (1.3)$$

de manera que podemos sustituir 1.3 en 1.2 y hacer la separación de nuestra ecuación en una parte únicamente temporal y otra únicamente espacial. Nuestra constante de separación la llamaremos E y sabemos que esta constante representa la energía del sistema. Para la parte temporal, tendremos la ecuación diferencial:

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t), \quad (1.4)$$

cuya solución general es:

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}. \quad (1.5)$$

Esto nos permite escribir la expresión que determina los eigenestados del sistema como sigue:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\mathbf{x}). \quad (1.6)$$

Ahora que tenemos la expresión 1.6 podemos centrarnos en la parte dependiente de la posición. Después de haber separado variables obtenemos:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}). \quad (1.7)$$

Para continuar nos conviene reescribir 1.7 nuevamente en términos de operadores. Recordando que $\hat{\mathbf{p}} = i\hbar\nabla$, escribimos:

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V} \right) \psi(\mathbf{x}) = (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi(\mathbf{x}) = \hat{H}\psi(\mathbf{x}). \quad (1.8)$$

Donde \hat{H}_0 es la energía cinética de partícula libre, \hat{V} es el potencial que da lugar a la interacción y, en consecuencia, al fenómeno de dispersión. Supongamos ahora un fenómeno de dispersión elástica, el cual es un proceso en el que la energía cinética del sistema es la misma antes y después de la interacción entre la partícula y el potencial.

Pensemos un sistema que consiste en una onda que incide sobre el rango de acción de un potencial V . En este caso, antes de la dispersión, la energía cinética inicial del sistema es la de una partícula libre. Luego se da la interacción de la onda con el potencial, lo cual da lugar a la dispersión y en este estado final la energía del sistema se conserva pero existe la posibilidad de que la onda se haya reflejado o transmitido total o parcialmente. El estado final del sistema lo podemos pensar, por ejemplo, como una combinación lineal de una onda que se transmitió y otra que se reflejó, de manera que el eigenestado inicial en el que se encontraba el sistema es distinto al eigenestado tras la dispersión.

Entonces, inicialmente tenemos que la dinámica de la onda incidente está dada por:

$$\hat{H}_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle. \quad (1.9)$$

Mientras que después de haberse dispersado, la dinámica queda descrita por:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (1.10)$$

Notemos aquí que en ambos casos se tienen los mismos eigenvalores, es decir, la misma energía, pero corresponden a distintos estados, antes y después de la dispersión ($|\phi\rangle \neq |\psi\rangle$). Nuestra intención ahora es buscar alguna solución $|\psi\rangle$ tal que nos regrese al eigenestado $|\phi\rangle$ cuando el potencial dispersivo $V \rightarrow 0$.

Consideremos la siguiente expresión:

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \hat{V}|\psi^\pm\rangle, \quad (1.11)$$

denominada **ecuación de Lippmann - Schwinger**. Esta ecuación es equivalente a la ecuación de Schrödinger. El término $|\phi\rangle$ está asociado con el término

correspondiente a la partícula libre en la ecuación de Schrödinger, mientras que el término que contiene a $|\psi^\pm\rangle$ corresponde a la parte perturbativa, la cual contiene la información sobre cómo actúa el potencial en el sistema.

1.1.1. La función de Green

Veamos que sucede con la ecuación de Lippman-Schwinger (1.11) en la base de posiciones. Para ello recordemos que un ket arbitrario $|\alpha\rangle$ en una base continua lo podemos escribir como:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle. \quad (1.12)$$

Ahora vamos tomar el operador $\hat{\mathbf{x}}$ y aplicarlo en ambos lados de la ecuación 1.11 solo que del lado derecho escribiremos $|\psi^\pm\rangle$ de acuerdo a la expresión 1.12. Queda de la siguiente forma:

$$\langle \mathbf{x}|\psi^\pm\rangle = \langle \mathbf{x}|\phi\rangle + \langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \hat{V} \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\psi^\pm\rangle. \quad (1.13)$$

Como la integración es sobre la variable primada podemos intercambiar el orden de la integral y el potencial para el segundo término del lado derecho:

$$\langle \mathbf{x}|\psi^\pm\rangle = \langle \mathbf{x}|\phi\rangle + \int d^3x' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \hat{V} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}'|\psi^\pm\rangle. \quad (1.14)$$

Vemos también que el potencial \hat{V} actúa sobre las variables no primadas, así que podemos conmutarlo con el operador $|x'\rangle\langle x'|$ y entonces escribir finalmente:

$$\langle \mathbf{x}|\psi^\pm\rangle = \langle \mathbf{x}|\phi\rangle + \int d^3x' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}'|\hat{V}|\psi^\pm\rangle. \quad (1.15)$$

Dado que la ecuación 1.15 contiene al ket $|\psi^\pm\rangle$ en la integral vamos a definir y analizar la siguiente función:

$$G_\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle. \quad (1.16)$$

Esta es la función de Green, también conocida como propagador (este nombre cobrará sentido mas adelante).

Ahora la evaluaremos y para esto vamos a introducir otro cambio de base (a la de momentos) de modo que facilite la evaluación del operador H_0 . En otras palabras, queremos escribir a la función G_\pm en términos de \mathbf{p} y \mathbf{p}' . Recordemos que la relación de completitud para una base continua está dada por:

$$\int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'| = \mathbb{1}, \quad (1.17)$$

donde $|\xi'\rangle$ representa un eigenestado de $\hat{\mathbf{p}}$.

Dado que G depende de \mathbf{x} y \mathbf{x}' debemos introducir la unidad en la ecuación 1.16 dos veces (con \mathbf{p}' y \mathbf{p}'') como se muestra a continuación:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle \left\langle \mathbf{p}' \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{p}'' \right\rangle \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{x}' \rangle. \quad (1.18)$$

Si el ket $|\mathbf{p}\rangle$ (un eigenket arbitrario del operador \mathbf{p}) representa el estado de una onda plana cuyo momento es precisamente \mathbf{p} , podemos evaluar el primer y tercer bracket de la integral de la ecuación 1.18 y resultan de la siguiente forma:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle = \frac{e^{i(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x})/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad (1.19)$$

$$\langle \mathbf{p}'' | \mathbf{x}' \rangle = \frac{e^{-i(\mathbf{p}'' \cdot \mathbf{x}')/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (1.20)$$

El bracket que aparece en medio de la integral no es más que la función de Green escrita en la base de momentos. Para evaluar la función de Green, notamos que lo tenemos entre distintos elementos de la misma base, por lo que queda en términos de una delta de Dirac como sigue:

$$\left\langle \mathbf{p}' \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{p}'' \right\rangle = \frac{\delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')}{E - (\mathbf{p}'^2/2m) \pm i\varepsilon}. \quad (1.21)$$

Sustituimos ahora los resultados de 1.19, 1.20, 1.21 en la ecuación 1.18 y nos queda lo siguiente:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \frac{e^{i(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x})/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot \frac{\delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')}{E - (\mathbf{p}'^2/2m) \pm i\varepsilon} \cdot \frac{e^{-i(\mathbf{p}'' \cdot \mathbf{x}')/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (1.22)$$

Realizamos la integración sobre las variables p'' y dado que tenemos dentro de la integral una delta de Dirac, queda de la siguiente manera:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{e^{i(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x})/\hbar} \cdot e^{-i(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}')/\hbar}}{E - (\mathbf{p}'^2/2m) \pm i\varepsilon}. \quad (1.23)$$

Ahora haremos algunas sustituciones para seguir desarrollando la integral. Primero tomemos que $\mathbf{p}' \equiv \hbar\mathbf{q}$, donde \mathbf{q} es el vector de onda. Como \hbar es una simple cantidad escalar, multiplica a cada componente de \mathbf{q} , por lo que entonces $d^3p' \rightarrow \hbar^3 d^3q$. También vamos a tomar que $E = \hbar^2 k^2/2m$. Haciendo estas sustituciones y agrupando las exponenciales, a la integral nos va a quedar entonces de esta forma:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{\hbar^3 d^3q}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{e^{i\mathbf{p}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')/\hbar}}{\frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - q^2 \pm i\varepsilon)}. \quad (1.24)$$

Notemos que un término $2m/\hbar^2$ queda absorbido dentro de la misma constante ε ya que la única condición para ε es que sea pequeña, por lo que podemos reescribirlo de esa manera sin ningún problema. Ahora terminamos de simplificar un poco y, debido a que en 1.24 tenemos un producto punto en la exponencial, sabemos que está involucrada la distancia entre \mathbf{x} y \mathbf{x}' , así como el ángulo entre los vectores. Por esta razón escribiremos el elemento de volumen en términos de coordenadas esféricas

para aprovechar esta simetría. También tomaremos el vector \mathbf{q} en la dirección del eje Z y obtendremos lo siguiente:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} q^2 dq \sin \theta d\theta d\phi \frac{e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'| \cos \theta}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon}. \quad (1.25)$$

No hay dependencia en ϕ por lo que la integración sobre dicha variable resulta en un 2π . También podemos cambiar un poco la integral sobre θ considerando que $d(\cos \theta) = -\sin \theta d\theta$. Con este cambio, los límites de la integral cambian también y queda de la siguiente forma:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{q^2 dq}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} \left[\frac{e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'| \cos \theta}}{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \right]_{\cos \theta=-1}^{\cos \theta=1}. \quad (1.26)$$

Simplificando un poco y sacando de la integral los términos que no dependen de q , nos queda:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \frac{1}{i|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \int_0^{\infty} q dq \frac{e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - e^{-i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon}. \quad (1.27)$$

En este punto podemos hacer un par de comentarios para simplificar la integral. Primero notemos que aparece la resta de exponenciales conjugadas en el numerador. Dado que es la resta de la misma exponencial menos su conjugada podemos afirmar que se trata de una función impar. Otra manera de darnos cuenta es pensando en la fórmula de Euler ($e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta$) y notando que el numerador podríamos expresarlo como $2i \sin q|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|$, sin embargo no haremos esta sustitución. El único fin de señalar esto es notar que, dado que en la integral tenemos el producto de dos funciones impares nos da como resultado una función par y podemos entonces extender los límites de la integral sobre q de $-\infty$ a ∞ (no olvidemos multiplicar por $1/2$ el resultado de la integral con los nuevos límites). Obtendríamos entonces lo siguiente:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{8\pi^2} \cdot \frac{1}{i|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \int_{-\infty}^{\infty} q dq \frac{e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - e^{-i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon}. \quad (1.28)$$

Reescribimos la ecuación factorizando un -1 y nos queda:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{8\pi^2} \cdot \frac{1}{i|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \int_{-\infty}^{\infty} q dq \frac{e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - e^{-i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon}. \quad (1.29)$$

Es de cierta importancia mencionar que hacer esto no tiene un sentido físico en realidad, ya que los límites como los teníamos para $q \in (0, \infty)$, $\theta \in (0, \pi)$, $\phi \in (0, 2\pi)$ eran tales que la integral ya se estaba definida para todo el espacio así que extender los límites para q es solamente una manipulación matemática que nos ayudará a resolver más fácil esta integral. Una vez hecho esto, vamos a separar en dos términos lo que acabamos de obtener:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{8\pi^2} \cdot \frac{1}{i|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \left[\int_{-\infty}^{\infty} q dq \frac{e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} - \int_{-\infty}^{\infty} q dq \frac{e^{-i|\mathbf{q}||\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} \right] \quad (1.30)$$

Notemos que los integrandos de ambos términos divergen (tienden a $\pm\infty$) cuando $q^2 = k^2 \pm i\varepsilon$, es decir, tienen polos. Podemos sacar raíz a ambos lados y obtener $q = \pm\sqrt{k^2 \pm i\varepsilon}$. Dado que el valor de ε es muy pequeño y arbitrario podemos aproximar la expresión anterior y decir que los polos están en $q = k \pm i\varepsilon$ al tomar la raíz positiva y en $q = -k \mp i\varepsilon$ al tomar la raíz negativa. Aquí es importante no perder de vista que los signos \pm y \mp , según sea el caso, corresponden al signo $+$ o $-$ que decidamos tomar para G_{\pm} , es decir, en realidad la función tiene dos polos, no cuatro. Para aclararlo veamos la figura 1.1:

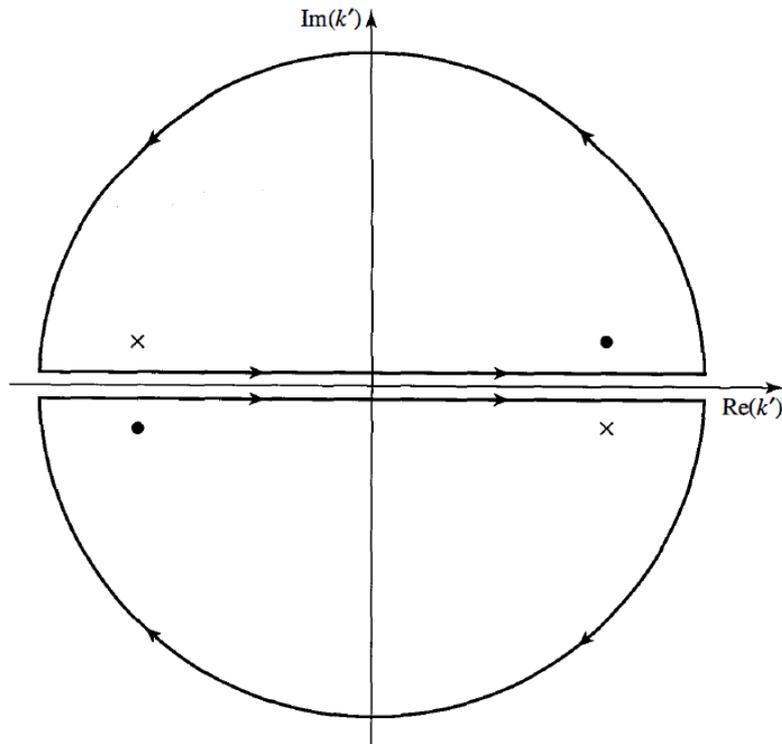


Figura 1.1: Polos de la función G_{\pm} . Los puntos corresponden al signo $-z$ las cruces al signo $+$. [1]

Los semicírculos que se muestran en la figura representan las curvas en el plano complejo con las que vamos a poder evaluar las integrales de la ecuación 1.32 de una manera mas práctica. Para ello recordemos que la integral de una función sobre una curva cerrada en el plano complejo la podemos evaluar con la siguiente expresión:

$$\oint \frac{f(z)}{z - z_0} dz = 2\pi i f(z_0). \quad (1.31)$$

Recordemos que las curvas recorridas en sentido antihorario tiene orientación positiva mientras que las recorridas en sentido horario tiene orientación negativa. Al integrar sobre una curva orientada negativamente nos ocasiona un cambio de signo en el resultado.

La ecuación 1.31 nos sirve para evaluar integrales a lo largo de una curva dentro de la cual esté contenida alguna singularidad de nuestra función compleja. Notemos

que en el denominador aparece $z - z_0$ mientras que en la ecuación 1.30 aparece en el denominador un término que contiene a z^2 así que para poder evaluarla con la integral de Cauchy [2] podemos tratar de escribir el denominador de 1.30 como un producto de dos términos lineales en z y con ello poder reescribirla en la siguiente forma:

$$\oint \frac{f(z)}{(z - z_1)(z - z_0)} = \oint \frac{\frac{f(z)}{(z - z_1)}}{(z - z_0)} dz = 2\pi i g(z_0). \quad (1.32)$$

Donde $g(z) = \frac{f(z)}{z - z_1}$. Usando estos resultados podemos evaluar las integrales de la ecuación 1.30. Para la integral cuya exponencial es negativa tenemos que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} q dq \frac{e^{-i|\mathbf{q}||\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} = -2\pi i (\mp k - i\varepsilon) \frac{e^{-i(\mp k - i\varepsilon)|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{2(\mp k - i\varepsilon)}. \quad (1.33)$$

Tomando el límite cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ y simplificando obtenemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} q dq \frac{e^{-i|\mathbf{q}||\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} = -\pi i e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (1.34)$$

Ahora, para la integral cuya exponencial es positiva:

$$\int_{-\infty}^{\infty} q dq \frac{e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} = 2\pi i (\pm k - i\varepsilon) \frac{e^{i(\pm k - i\varepsilon)|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{2(\pm k - i\varepsilon)}. \quad (1.35)$$

Hacemos $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} q dq \frac{e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} = \pi i e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (1.36)$$

Sustituyendo 1.34 y 1.36 en 1.30 se obtiene finalmente que:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{8\pi} \frac{1}{i|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} (\pi i e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - (-\pi i e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|})) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (1.37)$$

Esta es la ya conocida función de Green que también se puede obtener como la función asociada a alguna función f que satisfaga la ecuación de Helmholtz[3]. Es decir, si se tiene que:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = Q. \quad (1.38)$$

Entonces existe una función de Green asociada a ψ que satisface:

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1.39)$$

y al hacer el desarrollo pertinente se llega a la misma expresión que la indicada por la ecuación 1.37. Este resultado nos permite reescribir la ecuación 1.15 de la siguiente manera:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{\pm} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{\pm} \rangle. \quad (1.40)$$

En el lado izquierdo de la ecuación 1.40 tenemos el eigenestado final bajo la acción del operador de posición, resultando así en la función de onda asociada al estado final del sistema, mientras que el lado derecho de la ecuación nos indica que podemos expresarla como la suma de una onda incidente (el término correspondiente a partícula libre) y un término más, el cual nos da la información sobre la dispersión que sufre dicha onda incidente. En el segundo término, las cantidades involucradas dependen únicamente de la distancia entre \mathbf{x} y \mathbf{x}' , mostrando así una simetría esférica, por lo que la onda representada por dicho término es esférica. La función de Green nos indica la manera en la que se propaga la onda de un punto \mathbf{x} a otro \mathbf{x}' . El término correspondiente a la partícula libre es una onda plana. Se puede visualizar mejor esta idea en la figura 1.2:

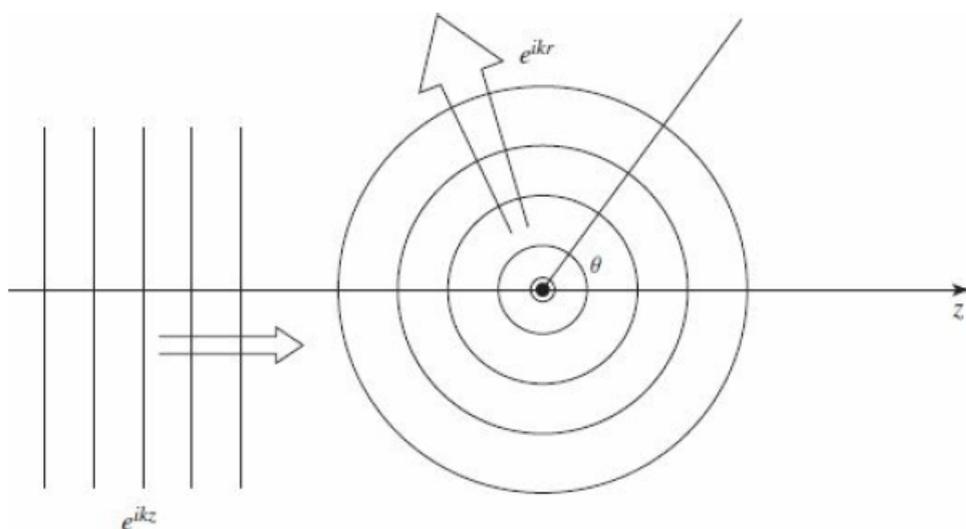


Figura 1.2: Se muestra la parte correspondiente a la onda incidente (e^{ikz}) y a la onda dispersada (e^{ikr}). La solución $\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle$ es la suma de ambas ondas mostradas.[3]

Se ha tomado el eje Z en la misma dirección en la que incide la onda de modo que no introduzcamos dependencia en ϕ , el ángulo azimutal. Los signos $+$ y $-$ en el superíndice de nuestra solución lo que nos indican es la dirección de la onda dispersada. El signo positivo quiere decir que la onda se aleja del potencial dispersivo mientras que el signo negativo quiere decir que se acerca al potencial.

Lo que queremos explorar ahora es el comportamiento de la función de onda a evaluar, es decir, el comportamiento de $\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle$ en puntos lejanos ya que en la práctica los detectores se suelen colocar lejos de donde el potencial actúa. Consideraremos un potencial localizado definido de la siguiente manera:

$$\langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}'' \rangle = V(\mathbf{x}') \delta^{(3)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}''). \quad (1.41)$$

Veamos de nuevo la ecuación 1.40 y notemos que podemos usar 1.41 para reescribir el bracket dentro de la integral. Para hacer eso primero hay que saber cómo se ve el estado $|\phi^\pm\rangle$ en la base de posiciones y luego podemos aplicar el potencial, por lo que obtenemos:

$$\langle \mathbf{x}' | V | \phi^\pm \rangle = \int d^3 x'' \langle \mathbf{x}' | \mathbf{V} | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \phi^\pm \rangle = V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^\pm \rangle. \quad (1.42)$$

Con este resultado podemos escribir:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi_{inc} \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^\pm \rangle. \quad (1.43)$$

De acuerdo a 1.43 nuestra función de onda es la superposición de la onda incidente con la onda dispersada. Lo importante a mencionar aquí es que pese a que el potencial está localizado (es decir, está confinado a una región finita del espacio) sus efectos sobre la onda incidente no desaparecen aún cuando la onda dispersada sale del alcance del potencial. Esto en realidad resulta práctico porque justamente nuestro interés es observar los efectos de dispersión pero fuera del alcance del potencial de modo que en un experimento debemos colocar el detector a una distancia mucho mayor (que el alcance de \hat{V}). Esto nos permite hacer aproximaciones sin perder información sobre el análisis de la onda dispersada. Veamos la figura 1.3:

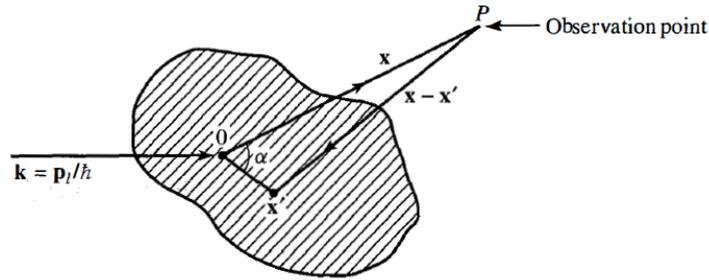


Figura 1.3: Potencial dispersivo. La región sombreada es aquella en donde el potencial aún tiene alcance. El punto P es en donde vamos a evaluar nuestra función de onda. [1]

Considerando lo mencionado anteriormente vamos a interesarnos en el caso en que:

$$|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'| \quad (1.44)$$

También vamos a redefinir estas variables como sigue:

$$r = |\mathbf{x}| \quad , \quad r' = |\mathbf{x}'|. \quad (1.45)$$

Si α es el ángulo que se forma entre los vectores \mathbf{x} y \mathbf{x}' entonces podemos escribir lo siguiente:

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = \sqrt{(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \alpha}. \quad (1.46)$$

Podemos factorizar r^2 y sacarla de la raíz y nos queda lo siguiente:

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = r \left(1 - \frac{2r'}{r} \cos \alpha + \frac{r'^2}{r^2} \right)^{1/2}. \quad (1.47)$$

Como habíamos dicho que $r \gg r'$ entonces el tercer término del paréntesis lo podemos despreciar y para los dos restantes utilizamos la aproximación:

$$(1+x)^n \approx (1+nx). \quad (1.48)$$

Entonces nos queda lo siguiente:

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \approx r \left(1 - \frac{r'}{r} \cos \alpha\right) = r - r' \cos \alpha \quad (1.49)$$

y finalmente:

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \approx r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{x}'. \quad (1.50)$$

Esta aproximación entonces nos permite escribir:

$$e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \approx e^{\pm ik(r-\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{x}')} = e^{\pm ikr} e^{\mp ik'\cdot\mathbf{x}'}, \quad (1.51)$$

donde hemos de notar que se ha usado que $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{r}}'$. Si ahora recordamos que $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, entonces podemos escribir el término asociado a la onda incidente como:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (1.52)$$

También notemos que de acuerdo a la expresión 1.44 podemos escribir:

$$\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = \frac{1}{r} \quad (1.53)$$

y con todo lo anterior podemos reescribir la ecuación 1.43 como:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ikr} e^{\mp ik'\cdot\mathbf{x}'}}{4\pi r} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^\pm \rangle. \quad (1.54)$$

El significado físico de tomar el signo + o el signo - radica en el término $e^{\pm ikr}$, que corresponde a una onda saliente o entrante, es decir que se aleja de la zona donde actúa el potencial o que va hacia él. Nos interesa el caso que se aleja del potencial después de ser dispersada por lo que tenemos que tomar el signo positivo de $|\psi^\pm\rangle$ y los demás signos del lado derecho que ello implique. Nos queda entonces la siguiente expresión:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ikr} e^{-ik'\cdot\mathbf{x}'}}{4\pi r} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle. \quad (1.55)$$

Podemos sacar de la integral todo lo que no dependa de x' y escribirla de la siguiente manera:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' e^{-ik'\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle. \quad (1.56)$$

Sustituyendo el término de la onda incidente con el obtenido en la ecuación 1.52 nos quedaría como:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle. \quad (1.57)$$

Factorizamos de la siguiente forma:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} (2\pi)^{3/2} \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle \right]. \quad (1.58)$$

Vamos a recomodar un poco los términos y reescribir la ecuación 1.58:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right]. \quad (1.59)$$

La función $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ es la amplitud de la onda esférica debida a la dispersión causada por el potencial V y está dada por:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^{3/2} \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle. \quad (1.60)$$

Multiplicamos y dividimos la ecuación anterior por $(2\pi)^{3/2}$ y nos queda:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3x' \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle. \quad (1.61)$$

Usamos la ecuación 1.20 y entonces tenemos:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3x' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle. \quad (1.62)$$

Recordemos que en la base de posiciones, podemos escribir una matriz $\langle \beta | A | \alpha \rangle$ en términos de las funciones de onda asociadas a los estados $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ de la siguiente manera:

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \int d^3x' \int d^3x'' \langle \beta | x' \rangle \langle x' | A | x'' \rangle \langle x'' | \alpha \rangle. \quad (1.63)$$

Con esto, la ecuación 1.62 queda escrita como:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | V | \psi^+ \rangle. \quad (1.64)$$

Es importante mencionar que el elemento descrito por la ecuación 1.64 consta de dos entradas de momento, lo cuál permite expresarlo en términos de una matriz. Se puede obtener más información de a partir de este elemento, por ejemplo el cálculo de la sección eficaz.

La sección eficaz se denota con la letra σ y es una medida que cuantifica la probabilidad de que una partícula se disperse en una dirección en específico tras haber sido afectada por un potencial. Podríamos decir que la sección eficaz es, de cierta manera, una especie de área sobre la que está incidiendo la partícula, provocando así la dispersión.

Se puede hablar de la sección eficaz diferencial o de la sección eficaz total. La sección eficaz total se calcula integrando la sección eficaz diferencial sobre todo el

ángulo sólido. Lo que nos interesa es entonces la sección eficaz diferencial porque de esa manera podemos escoger un pequeño ángulo sólido en específico y entonces estudiar la dispersión en una dirección en particular.

La sección eficaz diferencial se relaciona con las amplitudes de dispersión por medio de la siguiente ecuación:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \quad (1.65)$$

Capítulo 2

Matriz S

2.1. Dinámica de un sistema interactuante

En este capítulo abordaremos el mismo problema planteado en el capítulo anterior pero no lo haremos mediante la ecuación de Lippmann-Schwinger explícitamente. Se hará de una manera alternativa con el fin de mostrar el hecho de que el elemento $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ en la representación matricial corresponde con la que se conoce como Matriz S (en inglés S-matrix, donde la S proviene de *Scattering*).

Consideremos la ecuación de Schrödinger en su caso mas general, es decir, considerando la dependencia en el tiempo del sistema y en presencia de un potencial \hat{V} . Asumiremos que estamos en el régimen de bajas energías, de modo que no aparezcan efectos relativistas . En este caso, la ecuación es:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{x}, t) = (\hat{T} + \hat{V})\Psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.1)$$

que podemos reescribir como:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t)\Psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.2)$$

Las interacciones que vamos a considerar pueden ser debidas a potenciales de tres tipos, que se muestran en la figura 2.1:

- Ultra-locales. También llamados potenciales de contacto. Se definen en términos de la distribución Delta de Dirac.
- De rango finito. Estos potenciales tienen un rango de acción en un intervalo finito, digamos $[-a, a]$, y fuera de ese intervalo vale cero.
- De decaimiento suave. De igual manera tienen un rango efectivo dentro de un intervalo definido pero fuera de este se aproximan a cero asintóticamente.

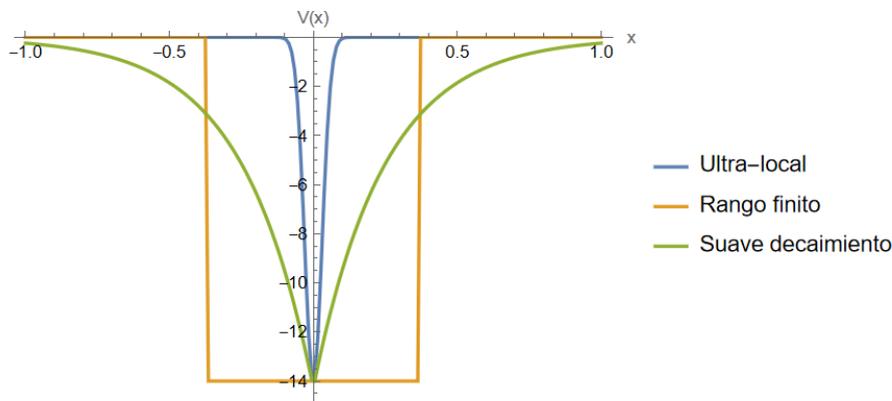


Figura 2.1: Tipos de potenciales, en este caso, atractivos

En cualquiera de los tres casos podemos notar que tienen el mismo comportamiento cuando $|x| \rightarrow \infty$, conduciendo a:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.3)$$

y cuya solución está dada por:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \frac{Et}{\hbar})}. \quad (2.4)$$

Ahora, volviendo a considerar el rango en el que el potencial tiene efecto y además considerando el caso independiente del tiempo, se propone que $\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})\phi(t)$, de modo que la ecuación 2.2, para la parte espacial, nos conduce a:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (2.5)$$

Mientras que para la parte temporal se obtiene:

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t). \quad (2.6)$$

Para conocer la solución a la ecuación 2.5 necesitamos conocer el potencial V pero para la ecuación 2.6 ya conocemos la solución, se trata de una exponencial. Esto permite escribir la solución de 2.2 como:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\mathbf{x}). \quad (2.7)$$

La ecuación 2.7 corresponde a los eigenestados del Hamiltoniano del sistema.

Dependiendo de los valor de la energía que se le dé al sistema podemos tener estados ligados o estados de dispersión. Si $E > 0$ tendremos estados de dispersión. Los estados de dispersión son aquellos donde la partícula tiene suficiente energía para no quedar confinada por el potencial. La función de onda asociada a esta partícula corresponde a una onda viajera. Por otro lado, para $E < 0$ tendremos estados ligados. En este caso la partícula tiene una energía menor que el valor límite que puede tomar el potencial, quedando confinada por él. La función de onda asociada a un estado ligado tiende a cero al alejarnos mucho del potencial, entonces se trata de una onda localizada.

2.2. Matriz S y sus propiedades

Vamos a considerar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, en términos de una coordenada espacial relativa entre las partículas que interactúan:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = V(x)\psi(x), \quad (2.8)$$

en donde se ha utilizado que $k^2 = 2mE/\hbar^2$ y $V(x) = 2m\mathcal{V}(x)/\hbar^2$.

Lejos del rango de acción del potencial V podemos tener soluciones asintóticas que difieren en un signo según la dirección de propagación:

$$\psi(x) \sim \begin{cases} e^{ikx} & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ e^{-ikx} & \text{si } x \rightarrow \infty \end{cases}, \quad (2.9)$$

De modo que la solución general de la ecuación 2.8, lejos del alcance del potencial es:

$$\psi(x) = A(k)e^{ikx} + B(k)e^{-ikx}, \quad (2.10)$$

la cual es una combinación de soluciones independientes provenientes de direcciones opuestas.

Si consideramos en nuestro experimento que la onda que controlamos avanza de izquierda a derecha y llega a una barrera de potencial podemos escribir la solución asintótica como:

$$\psi_R(x) \sim \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx} & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ te^{-ikx} & \text{si } x \rightarrow \infty \end{cases}. \quad (2.11)$$

Análogamente, para una partícula que viaja de derecha a izquierda tenemos:

$$\psi_L(x) \sim \begin{cases} t'e^{-ikx} & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ e^{-ikx} + r'e^{ikx} & \text{si } x \rightarrow \infty \end{cases}. \quad (2.12)$$

En las expresiones 2.11 y 2.12, los coeficientes r, t, r' y t' son los coeficientes de reflexión y transmisión, que en general pueden ser complejos.

Recordemos que en mecánica cuántica, los coeficientes que acompañan a cada solución independiente están relacionados con la probabilidad de hallar a la partícula en ese estado. Debido a esto decimos que la probabilidad de que la partícula se refleje en la barrera de potencial, o bien, que la atraviese están dadas por:

$$R = |r|^2, T = |t|^2 \quad (2.13)$$

Como mostraremos más adelante, la matriz S se puede escribir de la siguiente manera:

$$S(k) = \begin{pmatrix} t & r \\ r' & t' \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Mostraremos como llegar a este resultado, así como algunas propiedades útiles de la matriz S. Consideremos la corriente de probabilidad cuántica en el caso de una dimensión, que está dada por:

$$J(x) = \frac{-i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \quad (2.15)$$

Tomando la expresión para ψ_R dada en la ecuación 2.11 y sus derivadas, sustituimos en 2.15, resultando en:

$$J(x) = \begin{cases} \frac{\hbar k}{m}(1 - |r|^2) & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ \frac{\hbar k}{m}(|t|^2) & \text{si } x \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.16)$$

La ecuación de continuidad establece que:

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \frac{dJ(x)}{dx} = 0. \quad (2.17)$$

Como nos interesan las soluciones estacionarias, buscamos que $\partial |\Psi|^2 / \partial t = 0$ y entonces, 2.17 implica que $dJ(x)/dx = 0$, lo cual quiere decir que la corriente de probabilidad es constante y entonces:

$$1 - |r|^2 = |t|^2, \quad (2.18)$$

y finalmente se tiene:

$$T + R = 1, \quad (2.19)$$

Mostrando así la conservación de la probabilidad, una propiedad muy importante en mecánica cuántica.

Para continuar, consideremos un potencial V real. En este caso, sabemos que ψ_R y ψ_R^* son soluciones independientes a la ecuación de Schrödinger y por lo tanto una combinación lineal construida a partir de ellas también será solución. Tomemos entonces la siguiente combinación lineal:

$$\frac{\psi_R^*(x) - r^* \psi_R(x)}{t^*} \sim \begin{cases} \frac{e^{-ikx} + r^* e^{ikx} - r^* e^{ikx} - |r|^2 e^{ikx}}{t^* e^{-ikx} - r^* t e^{ikx}} & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ \frac{e^{-ikx} + r^* e^{ikx} - r^* e^{ikx} - |r|^2 e^{ikx}}{t^* e^{-ikx} - r^* t e^{ikx}} & \text{si } x \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.20)$$

Simplificando y recordando que $1 - |r|^2 = |t|^2 = tt^*$ se llega a:

$$\frac{\psi_R^*(x) - r^* \psi_R(x)}{t^*} \sim \begin{cases} t e^{-ikx} & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ e^{-ikx} - \frac{r^* t}{t^*} e^{ikx} & \text{si } x \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.21)$$

Comparando 2.21 con ψ_L dada por la ecuación 2.12 obtenemos las siguientes relaciones:

$$t' = t, r' = -\frac{r^* t}{t^*} \quad (2.22)$$

Los cálculos realizados anteriormente nos permiten expresar un fenómeno de dispersión en términos de ondas incidentes y salientes que se pueden mover hacia la izquierda o derecha. Nuestras soluciones asintóticas con las que vamos a trabajar son:

Descomponer las soluciones a la ecuación de Schrödinger según la tabla nos permite expresarlas de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_R \\ I_L \end{pmatrix} + S(k) \begin{pmatrix} O_R \\ O_L \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

Movimiento	Onda incidente	Onda saliente
Derecha	$I_R(x) = e^{ikx}$ si $x \rightarrow -\infty$	$O_R(x) = e^{ikx}$ si $x \rightarrow \infty$
Izquierda	$I_L(x) = e^{-ikx}$ si $x \rightarrow \infty$	$O_L(x) = e^{-ikx}$ si $x \rightarrow -\infty$

Cuadro 2.1: Soluciones asintóticas, incidentes y salientes.

donde S está dada por:

$$S(k) = \begin{pmatrix} t & r \\ r' & t' \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Usaremos las expresiones de la ecuación 2.22 para probar que la matriz S tiene la propiedad de unitariedad.

Tomemos el producto de matrices SS^\dagger y nos quedará lo siguiente:

$$SS^\dagger = \begin{pmatrix} t & r \\ r' & t' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t^* & r'^* \\ r^* & t'^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |t|^2 + |r|^2 & tr'^* + rt'^* \\ r't^* + t'r^* & |r'|^2 + |t'|^2 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

De las ecuaciones 2.15 y 2.19 vemos que en la diagonal tenemos 1's y por las expresiones en 2.22 vemos que fuera de la diagonal tenemos ceros y por lo tanto:

$$SS^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1}. \quad (2.26)$$

Hemos probado la unitariedad de la matriz S. Esto quiere decir que existe la conservación de la probabilidad.

Para continuar, tomemos la ecuación 2.23 y reescribámosla como sigue:

$$\begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_L \end{pmatrix} = S(k) \left[S^{-1}(k) \begin{pmatrix} I_R \\ I_L \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} O_R \\ O_L \end{pmatrix} \right] \quad (2.27)$$

La información relevante se encuentra en el factor entre corchetes ya que la $S(k)$, que aparece por fuera, únicamente modifica las amplitudes de ambos términos pero lo hace en la misma proporción. Si cambiamos el signo del vector de onda $k \rightarrow -k$ entonces tenemos que las ondas incidentes y salientes invierten su dirección, es decir, $I_i \longleftrightarrow O_i$. Considerando lo anterior tenemos:

$$\begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_R \\ I_L \end{pmatrix} + S^{-1}(-k) \begin{pmatrix} O_R \\ O_L \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

Comparando 2.28 con la ecuación 2.23 concluimos que la matriz S presenta la siguiente propiedad:

$$S(k) = S^{-1}(-k), \quad (2.29)$$

la cuál se denomina *simetría de cruce*. Permite relacionar lo que sucede en ambos semiplanos, inferior y superior. Esto puede facilitar el análisis de $S(k)$ y también sirve, por ejemplo, en teoría de muchos cuerpos para relacionar las partículas que forman cuasipartículas con los huecos que se generan debido a su formación.

Otra propiedad se deriva tomando el conjugado de la ecuación 2.23:

$$\begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_L \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} I_R \\ I_L \end{pmatrix}^* + S^*(k) \begin{pmatrix} O_R \\ O_L \end{pmatrix}^*. \quad (2.30)$$

Recordando que nuestras soluciones asintóticas son de la forma $e^{\pm ikx}$ notamos que al invertir el signo del vector de onda en la ecuación 2.30 se obtiene:

$$\begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_R \\ I_L \end{pmatrix} + S^*(-k) \begin{pmatrix} O_R \\ O_L \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Nuevamente comparamos con 2.23 y obtenemos la siguiente propiedad de la matriz S:

$$S(k) = S^*(-k). \quad (2.32)$$

2.3. Estados ligados

Pese a que a simple vista parece que la matriz S relaciona solamente estados de dispersión también nos permite saber si existen estados ligados, cuántos y qué tan fuerte se está acoplando el sistema. Para obtener la información mencionada tenemos que analizar en el dominio complejo a la matriz S, que es función del vector de onda k . Primero que nada tomemos la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\psi(x) = e^{-ik|x|} + S(k)e^{ik|x|}. \quad (2.33)$$

Dado que corresponde a un estado de dispersión, podemos dividir toda la expresión de manera que no afectemos la proporción entre las amplitudes de ambos términos y así reescribir 2.33 como:

$$\psi(x) = \frac{1}{S(k)}e^{-ik|x|} + e^{ik|x|}. \quad (2.34)$$

Ahora, si nos acercamos a un polo de $S(k)$ dado por un k' arbitrario de la forma $k' = a + ib$ tendremos que el primer término del lado derecho de 2.34 tiende a cero y entonces nos queda lo siguiente:

$$\psi(x) = e^{ik'|x|} = e^{ia|x|}e^{-b|x|}. \quad (2.35)$$

De la expresión 2.35 podemos notamos que si $b > 0$ entonces tendremos estados ligados ya que el segundo factor del lado derecho presenta el comportamiento de un estado localizado. Podemos concluir entonces que los estados ligados están determinados por los polos de la matriz S que tienen parte imaginaria positiva y, por lo tanto, se encuentren en el semiplano superior.

2.4. Retrasos espaciales y temporales

La solución asintótica para correspondiente a un vector de onda arbitrario k es:

$$\Psi_k(x, t) = e^{-iE_k t/\hbar} \psi_k(x), \quad (2.36)$$

sin embargo, el comportamiento de una partícula se asemeja mas al de un paquete de onda. Para representar un paquete de onda, tomamos un intervalo de valores

de momento centrado alrededor de algún k_0 y sumamos todas las contribuciones. Podemos escribir entonces:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \Psi_k(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \psi(x) e^{-iE_k t/\hbar}. \quad (2.37)$$

Considerando un espectro gaussiano y recordando que $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ tenemos:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A_0 e^{-\alpha(k-k_0)^2} \psi(x) e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.38)$$

Tomando la solución asintótica dada por 2.33 y desarrollando los términos dentro de la integral se obtiene:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A_0 e^{-\alpha(k-p/\hbar)^2} (e^{-ikx - i(\frac{\hbar k^2}{2m})t} + e^{ikx - i(\frac{\hbar k^2}{2m})t + \log S(k)}). \quad (2.39)$$

Nos interesa que las fases sean estacionarias, es decir, que no cambien significativamente en función del momento. Obtenemos estas condiciones al derivar los argumentos de las exponenciales respecto a k :

$$x = -\frac{p}{m}t, x = \frac{p}{m}t - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} \log S(p). \quad (2.40)$$

Definiremos como *retraso espacial* a la siguiente cantidad:

$$\delta = \frac{1}{i} \frac{d}{dk} \log S(k). \quad (2.41)$$

La figura 2.2 muestra la manera en la que el retraso espacial indica si las partículas interactúan. Cuando no hay retraso espacial, ambas partículas se acercan, y después se alejan sin presentar interacción entre ellas. En el caso en el que las partículas si se perciben debido a una interacción es cuando se genera un retraso espacial.

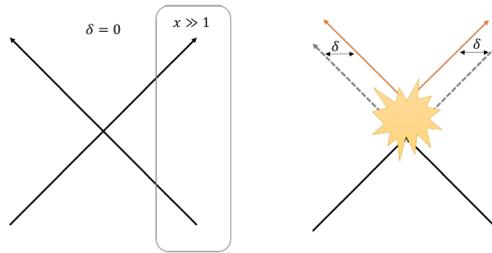


Figura 2.2: Retraso espacial para $\delta = 0$ y para $\delta \neq 0$. [4]

Se puede definir también un retraso temporal considerando la siguiente ecuación:

$$\frac{p}{m}T = \frac{p}{m}(T + \Delta) - \delta. \quad (2.42)$$

Esta igualdad se obtiene considerando las ecuaciones 2.40. Simplificamos la expresión y resulta en:

$$\frac{p}{m} = \frac{\delta}{\Delta}. \quad (2.43)$$

La ecuación 2.43 nos indica la relación que existe entre el retraso espacial y temporal con la velocidad que posee la partícula. La matriz S es quien contiene la información sobre estos retrasos, tal como lo indica la ecuación 2.41. Físicamente estos retrasos nos indican si en una interacción se está produciendo un estado meta-estable. Un estado meta-estable es aquel en el que una partícula tiene la posibilidad de permanecer confinada pero por un tiempo finito y que eventualmente puede decaer a un estado de menor energía.

Capítulo 3

Dispersión de potenciales no relativistas

En este capítulo emplearemos las propiedades de la matriz S que ya se exploraron de manera general para abordar el problema de dispersión para cada tipo de interacción. Haremos el análisis complejo de la matriz S con el fin de conocer la información útil sobre ella que podemos aprovechar al implementar el *Bootstrap*. Primero obtendremos una expresión general para la matriz S y después abordaremos cada caso.

Primero, tomaremos la solución asintótica y su derivada:

$$\psi(x) \sim e^{-ikx} + S(k)e^{ikx}, \quad (3.1)$$

$$\psi'(x) \sim ik(-e^{-ikx} + S(k)e^{ikx}). \quad (3.2)$$

Usando 3.1 y 3.2 construimos:

$$\psi' + ik\psi \sim 2ikS(k)e^{ikx}, \quad (3.3)$$

$$\psi' - ik\psi \sim -2ike^{-ikx}. \quad (3.4)$$

Luego, combinando 3.3 y 3.4 llegamos a:

$$S(k) \sim -e^{-2ikx} \frac{\psi' + ik\psi}{\psi' - ik\psi}. \quad (3.5)$$

3.1. Potencial ultra-local

Consideremos un potencial definido a partir de una delta de Dirac. En la figura 3.1 se ilustra su comportamiento, que está dado por:

$$V(x) = \alpha\delta(x), \quad (3.6)$$

donde α es una constante negativa, de modo que el potencial sea atractivo.

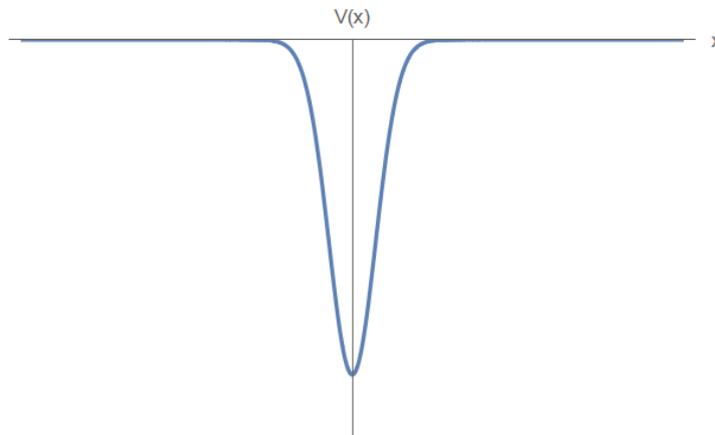


Figura 3.1: Potencial ultra-local

En este caso la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo queda de la siguiente manera:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (\mu\delta(x) - k^2)\psi, \quad (3.7)$$

donde hemos tomado $\mu = 2m\alpha/\hbar^2$ y $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Podemos integrar en una pequeña vecindad de tamaño ε alrededor de $x = 0$, con lo cual obtendremos:

$$\frac{d\psi}{dx}\Big|_{+\varepsilon} - \frac{d\psi}{dx}\Big|_{-\varepsilon} = \mu\psi(0). \quad (3.8)$$

El término $k^2\psi$ no contribuye al integrar la ecuación 3.7 ya que ψ es continua y vamos a integrar en una vecindad de ancho infinitesimal, por lo que el área bajo la curva en ese intervalo es nula.

Las expresiones para ψ y su derivada son:

$$\psi(x) \sim \begin{cases} e^{ikx} + S(k)e^{-ikx} & \text{si } x < 0 \\ e^{-ikx} + S(k)e^{ikx} & \text{si } x > 0 \end{cases}, \quad (3.9)$$

$$\psi'(x) \sim \begin{cases} ik(e^{ikx} - S(k)e^{-ikx}) & \text{si } x < 0 \\ ik(-e^{-ikx} + S(k)e^{ikx}) & \text{si } x > 0 \end{cases}. \quad (3.10)$$

Usando las ecuaciones 3.9 y 3.10 para hacer las evaluaciones correctas, la ecuación 3.8 nos conduce a:

$$S(k) = \frac{k - i\mu/2}{k + i\mu/2}. \quad (3.11)$$

Notemos que cuando $k \rightarrow \infty$, tenemos que $S(k) = 1$, lo que indica que mientras más rápido vaya la partícula, la interacción será menos perceptible y no habrá un fenómeno de dispersión apreciable. Este comportamiento se muestra en la figura 3.2, donde se ha graficado el retraso espacial como función del momento k . La matriz S de la ecuación 3.11 tiene un polo en $k = -i\mu/2$, el cual estará en el semiplano superior solamente si $\mu < 0$. Si $\mu < 0$ entonces también $\alpha < 0$ y esto es lo que se esperaba ya que un valor negativo para α indica un potencial atractivo, según la ecuación 3.6, el cual en este caso tendrá un solo estado ligado.

Se puede calcular la energía de este estado ligado como se muestra a continuación. Sabemos que $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Entonces:

$$E = \frac{(-i\mu/2)^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \mu^2}{8m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (3.12)$$

También se puede calcular el retraso espacial usando la expresión 2.41:

$$\delta = \frac{\mu}{k^2 + \mu^2/4} \quad (3.13)$$

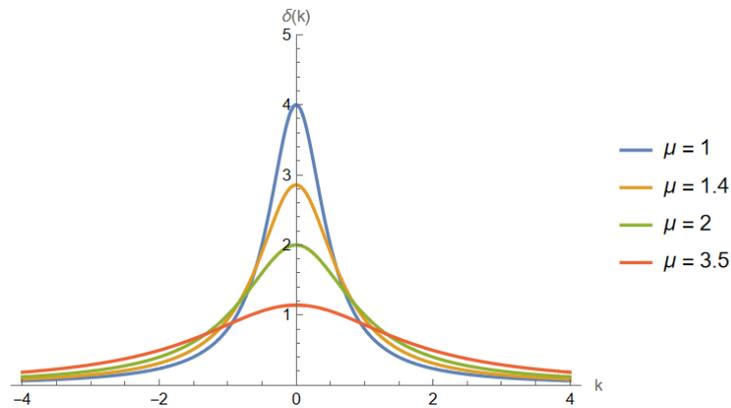


Figura 3.2: Retraso espacial en función del momento.

3.2. Potencial de rango finito

Para el caso del potencial de rango finito vamos a considerar un potencial definido en términos de la función escalón, dado por:

$$V(x) = -V_0 \Theta(a^2 - x^2), \quad (3.14)$$

donde:

$$\Theta(a^2 - x^2) = \begin{cases} 1 & \text{si } |x| < a \\ 0 & \text{si } |x| > a \end{cases} \quad (3.15)$$

El comportamiento de este potencial es muestra en la figura 3.3.

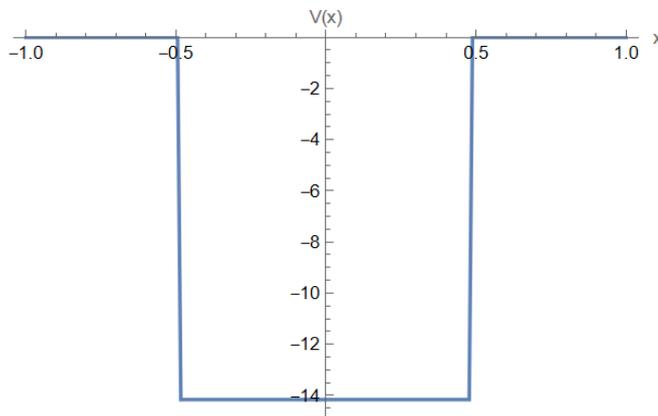


Figura 3.3: Potencial de rango finito.

Como tenemos un potencial simétrico podemos tomar la solución asintótica:

$$\psi(x) \sim e^{-ik|x|} + S(k)e^{ik|x|}, \quad (3.16)$$

la cual es válida para $|x| > a$ y además se están considerando en la expresión dos posibilidades: que la partícula incidente vaya de derecha a izquierda o de izquierda a derecha. Para la región $|x| < a$ tenemos que la ecuación de Schrödinger es de la forma:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 + U_0 \right) \psi(x) = 0, \quad (3.17)$$

donde se ha tomado que $U_0 = 2mV_0/\hbar^2$.

Podemos definir $q^2 = k^2 + U_0$, con la cual, la ecuación 3.17 se convierte en:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + q^2 \right) \psi(x) = 0, \quad (3.18)$$

que podemos identificar como la ecuación de un oscilador armónico. Condensando las consideraciones anteriores podemos decir que la solución completa para este problema está dada por:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + S(k)e^{-ikx} & \text{si } x < -a \\ A(k) \cos qx & \text{si } -a \leq x \leq a \\ e^{-ikx} + S(k)e^{ikx} & \text{si } x > a \end{cases}. \quad (3.19)$$

Notemos que, de acuerdo a 3.14, si $U_0 > 0$, tendremos que se trata de un potencial atractivo y en este caso $q > k$, lo que indica que la partícula tiene un momento mayor cuando está dentro del pozo. En el caso en que $U_0 < 0$ tendremos un potencial repulsivo (es decir una barrera de potencial en vez de un pozo) y la cantidad q toma valores imaginarios, lo cuál indica que las soluciones para este último caso son estados de dispersión.

Lo siguiente es calcular la derivada de $\psi(x)$ para poder obtener la matriz S de forma explícita. A partir de 3.19 tenemos que:

$$\psi'(x) = \begin{cases} ik(e^{ikx} - S(k)e^{-ikx}) & \text{si } x < -a \\ -qA(k) \sin qx & \text{si } -a \leq x \leq a \\ ik(-e^{-ikx} + S(k)e^{ikx}) & \text{si } x > a \end{cases}. \quad (3.20)$$

Usamos la ecuación 3.20 para evaluar en 3.5 y obtener la matriz S de forma explícita para este caso:

$$S(k) = -e^{-2ika} \frac{\psi'(a) + ik\psi(a)}{\psi'(a) - ik\psi(a)}. \quad (3.21)$$

Haciendo las sustituciones de acuerdo a 3.19 llegamos a:

$$S(k) = e^{-2ika} \frac{k + iq \tan(aq)}{k - iq \tan(aq)}. \quad (3.22)$$

En este caso, los polos de la matriz S se encuentran cuando se satisface que:

$$k = iq \tan(aq). \quad (3.23)$$

Haremos los siguientes cambios de variable para trabajar esta ecuación:

$$\nu = a\sqrt{U_0}; x = \frac{k}{i\sqrt{U_0}}. \quad (3.24)$$

Sustituyendo en 3.23 tenemos:

$$\begin{aligned} q^2 &= k^2 + U_0 = U_0 \left(1 + \frac{k^2}{U_0}\right) \\ q^2 &= U_0(1 - x^2) \\ q &= \sqrt{U_0}\sqrt{1 - x^2} \\ aq &= a\sqrt{U_0}\sqrt{1 - x^2} = \nu\sqrt{1 - x^2}. \end{aligned}$$

Finalmente tenemos:

$$\tan(aq) = \tan(\nu\sqrt{1 - x^2}). \quad (3.25)$$

Sustituimos 3.25 en 3.23 y usando el cambio de variable en 3.24 nos queda lo siguiente:

$$\begin{aligned} xi\sqrt{U_0} &= iq \tan(\nu\sqrt{1 - x^2}) \\ x\sqrt{U_0} &= q \tan(\nu\sqrt{1 - x^2}) \\ x\sqrt{U_0} &= \sqrt{U_0}\sqrt{1 - x^2} \tan(\nu\sqrt{1 - x^2}) \end{aligned}$$

Y por lo tanto los polos los encontraremos para los valores de x que satisfacen:

$$x = \sqrt{1 - x^2} \tan(\nu\sqrt{1 - x^2}), \quad (3.26)$$

los cuales estarán en el intervalo $x \in [0, 1]$. Otra manera de encontrar una expresión para hallar los polos es usando el cambio de variable $y = aq$. Lo sustituimos en 3.23 y desarrollamos el álgebra:

$$\begin{aligned} k &= i\frac{y}{a} \tan(y) \\ k^2 &= -\frac{y^2}{a^2} \tan^2(y) \\ -a^2k^2 &= y^2 \tan^2(y) \\ -a^2(q^2 - U_0) &= y^2 \tan^2(y). \end{aligned}$$

y nuevamente usando 3.24:

$$\sqrt{\nu^2 - y^2} = y \tan(y). \quad (3.27)$$

En la figura 2.2 se muestran dos gráficas que se intersectan. Estas gráficas corresponden al lado derecho e izquierdo de la ecuación 3.27. Notemos que la gráfica correspondiente a $\sqrt{\nu^2 - y^2}$ comienza desde un valor máximo positivo de ν para $y = 0$, la cual es justamente una cantidad que involucra el ancho y profundo del potencial, específicamente mediante la expresión $\nu^2 = a^2 U_0$.

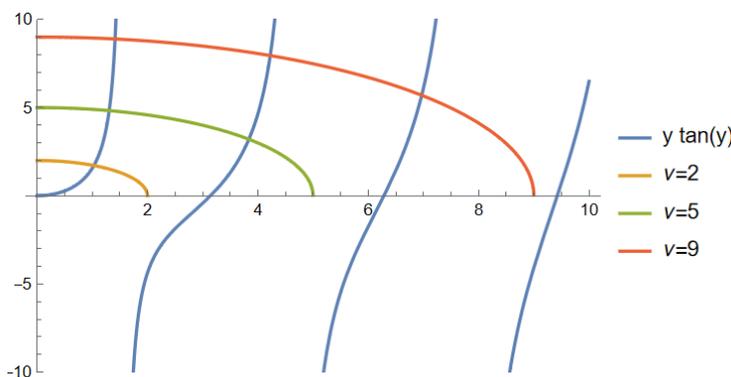


Figura 3.4: Intersecciones de $\sqrt{\nu^2 - y^2} = y \tan(y)$. Estas intersecciones indican dónde se encuentran los estados ligados para un pozo finito de ancho $2a$ y profundidad U_0 .

Podemos concluir que mientras más profundo o ancho sea el potencial tendremos más intersección entre las gráficas dadas por la ecuación 3.27. Estas intersecciones indican dónde encontraremos los estados ligados.

El área entre el potencial y el eje horizontal es $2aU_0$. Si queremos ajustar los parámetros para poder derivar el caso ultra local, entonces se debe cumplir que $\int V(x)dx = \mu = -2aU_0$, con lo cual $U_0 = -\mu/2a$. Tomaremos el límite cuando $a \rightarrow 0$ de la ecuación 3.22. En este límite tenemos $\tan(aq) \approx aq$, con lo cual obtenemos la matriz S para el caso ultra-local.

Notemos también que la función $y \tan(y)$ tiene intersecciones con el eje horizontal para los valores $y = n\pi$. Tomando estos valores de y podemos saber cuántas intersecciones habrá dado que sabemos que $\sqrt{\nu^2 - y^2} \geq 0$. Sustituyendo y tenemos:

$$a^2 U_0 - n^2 \pi^2 \geq 0 \rightarrow n \leq \sqrt{\frac{a^2 U_0}{\pi^2}}.$$

Recordando que $U_0 = 2mV_0/\hbar^2$ podemos obtener una expresión para el número total de estados ligados de un pozo finito. Sea n_{EL} , la variable que representa esta cantidad, entonces:

$$n_{EL} = 1 + \left\lfloor \sqrt{\frac{2ma^2 V_0}{\pi^2 \hbar^2}} \right\rfloor. \quad (3.28)$$

Ahora, para valores muy grandes de ν tenemos que la gráfica $\sqrt{\nu^2 - y^2}$ comienza desde más y más arriba y en consecuencia, las intersecciones con $y \tan(y)$ estarán

cada vez mas cerca de los valores $y_n = n\pi/2$, tomando n impar, con lo cual los polos estarán en:

$$y_n^2 = a^2 q^2 \approx \frac{n^2 \pi^2}{2^2}. \quad (3.29)$$

De la ecuación 3.29 tenemos $q^2 = n^2 \pi^2 / (2a)^2$ y usando también que $q^2 = K^2 + U_0$ llegamos a:

$$k_n^2 + U_0 \approx \frac{n^2 \pi^2}{(2a)^2}. \quad (3.30)$$

Si multiplicamos la ecuación 3.30 por $\hbar^2/2m$ obtendremos los valores de energía para los estados estables dentro del pozo finito, los cuales quedan determinados por:

$$E_n + V_0 \approx \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{(2a)^2}. \quad (3.31)$$

Por último vamos a mostrar que este pozo finito tiene una singularidad esencial cuando nos aproximamos a ∞ a lo largo del eje imaginario. Consideremos la identidad:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \tan(a + it) = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \frac{\sin 2a + i \sinh 2t}{\cos 2a + \cosh 2t} = \pm i. \quad (3.32)$$

Supongamos que nos aproximamos a infinito usando $k = k_R + it$, de manera que $q = \sqrt{k^2 + U_0} = \sqrt{k_R^2 - t^2 + 2ik_R t + U_0} \sim it$. Aplicando el límite y usando la identidad en 3.32 tenemos que la ecuación 3.22 se convierte en:

$$\begin{aligned} S(k) &= e^{-2ika} \frac{k + iq \tan(aq)}{k - iq \tan(aq)} \\ S(k) &\simeq e^{-2ika} \frac{k + i^2 q}{k - i^2 q} \\ S(k) &\simeq e^{-2ika} \frac{k - q}{k + q} \frac{k + q}{k + q} \\ S(k) &\simeq e^{-2ika} \frac{k^2 - q^2}{(k + q)^2} \\ S(k) &\simeq e^{-2ika} \frac{-U_0}{(2k)^2}, \end{aligned}$$

con lo cual encontramos que la matriz S para este tipo de potenciales tiene una singularidad esencial en el límite cuando $k \rightarrow i\infty$, exhibiendo un comportamiento asintótico particular dado por:

$$S(k) \simeq -\frac{U_0}{4k^2} e^{-2ika}. \quad (3.33)$$

Notemos que si $a \rightarrow 0$ la singularidad desaparece. Esto tiene sentido ya que hay que recordar que si $a \rightarrow 0$ recuperamos el caso de potencial ultra-local, el cuál no presenta singularidades esenciales.

3.3. Potencial de suave decaimiento

En esta sección mostraremos la importancia de la precisión al determinar la matriz S, ya que, como veremos mas adelante, puede tener polos sin significado físico, los cuales denominaremos como *polos espurios*. Estos polos surgen cuando el potencial no desaparece a partir de cierto valor de x pero si posee un rango de interacción efectivo. Es importante analizar correctamente todos estos polos con el fin de identificarlos y no concluir incorrectamente la existencia de estados ligados o metaestables en donde en realidad no los hay.

Consideremos el siguiente potencial:

$$V(x) = \mu \frac{e^{-|x|/a}}{2a}. \quad (3.34)$$

Su comportamiento se muestra en la figura 3.5.

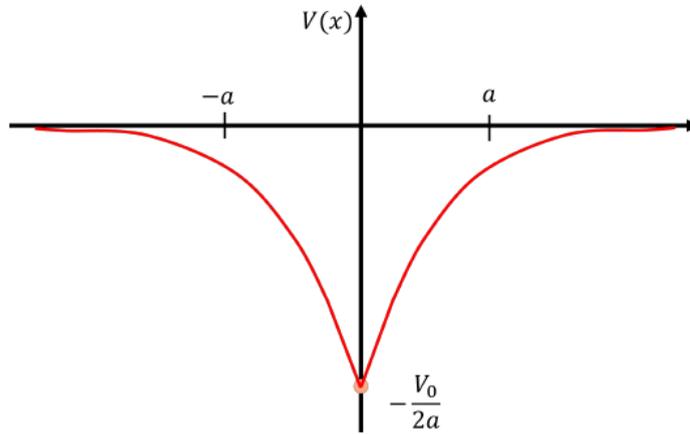


Figura 3.5: Potencial exponencial.

Notemos que si $a \rightarrow 0$ recuperamos nuevamente el caso del potencial ultra-local. Vamos a escribir la ecuación de Schrödinger para valores positivos de x :

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 - \frac{\mu}{2a} e^{-x/a} \right) \psi(x) = 0. \quad (3.35)$$

Para resolverla podemos usar el cambio de variable $z = \sqrt{2a\mu} e^{-x/2a}$, con el cual podemos reescribir la segunda derivada como:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{z^2}{(2a)^2} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{z}{(2a)^2} \frac{d\psi}{dz}. \quad (3.36)$$

De esta manera podemos reescribir la ecuación 3.35 como:

$$\frac{z^2}{(2a)^2} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{z}{(2a)^2} \frac{d\psi}{dz} + \left(k^2 - \frac{z^2}{(2a)^2} \right) \psi = 0. \quad (3.37)$$

Multiplicando por $(2a)^2$ y recordando que $i^2 = -1$ obtenemos:

$$z^2 \frac{d^2 \psi}{dz^2} + z \frac{d\psi}{dz} - (z^2 + (2aki)^2) \psi = 0. \quad (3.38)$$

La ecuación 3.38 tiene la estructura de una ecuación de Bessel modificada de tipo 1 (con $\nu = \pm 2aki$). La solución para esta ecuación está dada por:

$$I_\nu(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m! \Gamma(m + \nu + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2m+\nu}, \quad (3.39)$$

de modo que las dos posibles soluciones serán:

$$f(x) = I_{-2aki}(\sqrt{2a\mu}e^{-x/2a}); g(x) = I_{2aki}(\sqrt{2a\mu}e^{-x/2a}). \quad (3.40)$$

Ahora, de acuerdo a 3.39 y 3.40 podemos escribir nuestras soluciones como:

$$f(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m! \Gamma(m - 2aki + 1)} \left(\frac{\sqrt{2a\mu}e^{-x/2a}}{2}\right)^{2m-2aki}, \quad (3.41)$$

$$g(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m! \Gamma(m + 2aki + 1)} \left(\frac{\sqrt{2a\mu}e^{-x/2a}}{2}\right)^{2m+2aki}. \quad (3.42)$$

Una solución general para la ecuación 3.38 la podemos construir a partir de una ecuación lineal de $f(x)$ y $g(x)$:

$$\psi(x) = Af(x) + Bg(x). \quad (3.43)$$

Tomando en cuenta que $\psi'(0) = 0$ (debido a que ψ es una función par) podemos obtener la siguiente expresión que relaciona a A y B ;

$$Af'(0) = -Bg'(0). \quad (3.44)$$

Escogiendo $A = g'(0)$ y $B = -f'(0)$ garantizamos la igualdad dada en 3.44, de manera que nuestra solución es:

$$\psi(x) = g'(0)f(x) - f'(0)g(x). \quad (3.45)$$

Debido a que se trata de una serie de potencias enteras positivas, al considerar $z \ll 1$, podemos despreciar todos los términos de la serie quedarnos solo con el término correspondiente para $m = 0$. Notemos que $z \ll 1$ quiere decir que $x \gg 1$ debido al cambio de variable $z = \sqrt{2a\mu}e^{-x/2a}$, con lo cual afirmamos que estamos obteniendo la solución asintótica.

Con estas consideraciones, tomamos $f(x)$ y $g(x)$ como:

$$f(x) \sim \frac{1}{\Gamma(1 - 2aki)} \left(\frac{\sqrt{2a\mu}e^{-x/2a}}{2}\right)^{-2aki}, \quad (3.46)$$

$$g(x) \sim \frac{1}{\Gamma(1 + 2aki)} \left(\frac{\sqrt{2a\mu}e^{-x/2a}}{2}\right)^{2aki}. \quad (3.47)$$

Usando 3.46 y 3.47 podemos reescribir 3.45 como:

$$\psi(x) \sim \frac{-f'(0)}{\Gamma(1+2aki)} \left(\frac{\sqrt{2a\mu}}{2}\right)^{2aki} e^{-ikx} + \frac{g'(0)}{\Gamma(1-2aki)} \left(\frac{\sqrt{2a\mu}}{2}\right)^{-2aki} e^{ikx}. \quad (3.48)$$

Dividiendo entre el coeficiente del primer término obtenemos:

$$\psi(x) \sim e^{-ikx} + \frac{g'(0)}{f'(0)} \frac{\Gamma(1+2aki)}{\Gamma(1-2aki)} \left(\frac{a\mu}{2}\right)^{-2aki} e^{ikx}, \quad (3.49)$$

de donde podemos identificar a la matriz S , que acompaña al término e^{ikx} , como:

$$S(k) = \frac{g'(0)}{f'(0)} \frac{\Gamma(1+2aki)}{\Gamma(1-2aki)} e^{-2aki \log(a\mu/2)}. \quad (3.50)$$

En este caso, dado que el denominador es un producto de dos funciones tendremos dos tipos de polos asociados a cada una de las funciones.

El primer tipo de polos proviene del factor $g'(0)/f'(0)$. Para que este factor de lugar a algún polo necesitamos que $f'(0) = 0$ o bien, de otra forma podemos pedir que $g'(0) \gg f'(0)$. Bajo estas condiciones, notemos que en la ecuación 3.45, el segundo término se anula, quedando así solo la parte de la solución correspondiente a $f(x)$, la cual conduce a un estado ligado debido al comportamiento de la exponencial de ese término. Para el segundo tipo de polos recordemos que la función gamma $\Gamma(z)$ presenta singularidades para $z = -n$, siendo n un cualquier entero positivo. Notando que en este caso $z = 1 + 2aki$ vemos que los polos se localizan en:

$$k = \frac{i(1+n)}{2a}. \quad (3.51)$$

Los valores de momento asociados a la expresión 3.51 conducen al siguiente espectro de energía:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = -\frac{(1+n)^2 \hbar^2}{8ma^2}. \quad (3.52)$$

Para este espectro energético, si tomamos el límite cuando $a \rightarrow 0$ su valor tiende a $-\infty$. Este resultado si nos indica que tenemos una partícula fuertemente ligada pero no nos da el valor correcto de la energía de dicho estado ligado. Podemos afirmar entonces que los polos de la función gamma no corresponden a estados ligados. Esta inconsistencia se debe a que hemos tomado solo el primer término ($m = 0$) de 3.41 y 3.42 para escribir la solución de forma aproximada. En el caso en que tomáramos más términos tendremos que nuestra solución sería de la forma:

$$\psi(x) \sim e^{-ikx} (1 + \alpha_1 e^{-x/a} + \alpha_2 e^{-2x/a} + \dots) + S(k) e^{ikx} (1 + \beta_1 e^{-x/a} + \dots). \quad (3.53)$$

Esta expresión contiene términos (α_n y β_n) que no aparecen en la solución para el potencial local, los cuales no deberíamos despreciar si queremos la solución exacta puesto que la exponencial nunca vale cero. Supongamos que estamos cerca de un polo tal que su parte imaginaria es positiva, lo cual nos haría pensar que se trata de un posible estado ligado. En este caso, el término e^{-ikx} comenzaría a crecer rápidamente.

Necesitamos entonces imponer una condición para garantizar que $S(k)$ sea el término dominante. Dicha condición estará dada por:

$$\alpha_1 e^{-ikx-x/a} \ll S(k)e^{ikx}. \quad (3.54)$$

De aquí nos interesa analizar el comportamiento exponencial, de modo que tendremos:

$$x(\text{Im}(k) - 1/a) \ll x\text{Im}(k).$$

Haciendo un poco de álgebra se encuentra que la condición que buscamos será:

$$\text{Im}(k) \ll \frac{1}{2a}. \quad (3.55)$$

Si los polos provenientes del factor $g'(0)/f'(0)$ satisfacen la condición en 3.55 entonces podemos afirmar que corresponden a estados ligados, mientras que los polos debidos a la función gamma están todos por encima del valor dado por esta misma condición.

Ahora consideremos el siguiente potencial (truncado, denotado con el subíndice T):

$$V_T(x) = \mu \frac{e^{-|x|/a}}{2a} \Theta(b^2 - x^2), \quad (3.56)$$

donde Θ nuevamente es la función escalón con valor 1 para $|x| < b$ y 0 fuera de ese intervalo. Este nuevo potencial es uno de rango finito, por lo que esperaríamos que los polos de la matriz S_T correspondan a estados ligados. Si tomamos el límite cuando $b \rightarrow \infty$ entonces la matriz S_T debería ser idéntica a la matriz S , sin embargo, al ser un potencial de rango finito desaparecen los polos espurios, tal como lo muestra la figura 3.6.

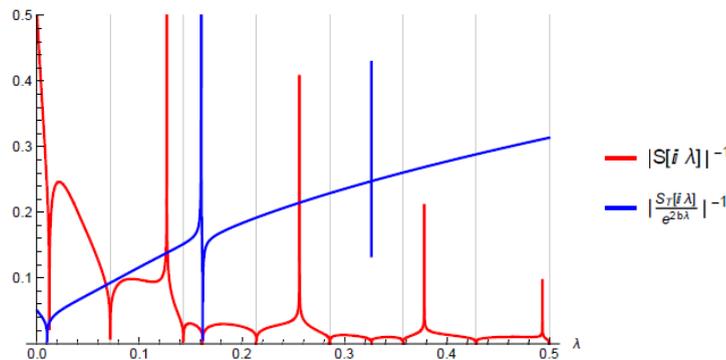


Figura 3.6: Polos de la matriz S para un potencial exponencial (rojo) y un potencial exponencial truncado (azul)

3.4. El átomo de Hidrógeno

En esta sección mostraremos cómo la matriz S es una alternativa para encontrar espectros energéticos sin tener que resolver todo el problema. Vamos a analizar el

caso de una partícula que va a interactuar con un potencial coulombiano producido por otra partícula mucho más masiva. Una representación esquemática de este sistema se muestra en la figura 3.7.

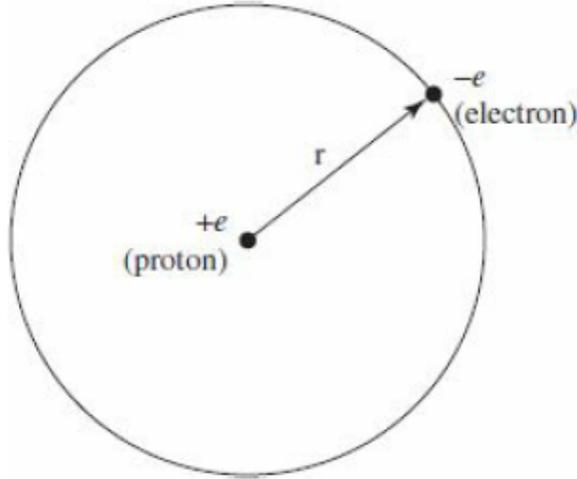


Figura 3.7: Átomo de hidrógeno.

En este caso, la ecuación de Schrödinger (en 3 dimensiones) es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{A}{r} - E\right)\psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (3.57)$$

Haciendo los cambios $k^2 = 2mE/\hbar^2$ y $\gamma = \sqrt{mA^2/2E\hbar^2}$, la ecuación 3.57 se transforma en:

$$\left(\nabla^2 + k^2 - \frac{2\gamma k}{r}\right)\psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (3.58)$$

cuya solución analítica es:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-\pi\gamma/2} \Gamma(1+i\gamma) {}_1F_1(-i\gamma; 1, i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})), \quad (3.59)$$

donde ${}_1F_1$, es una función hipergeométrica confluyente. Si el argumento complejo de dicha función es muy grande, es decir, si $kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \gg 1$, entonces la función hipergeométrica presenta el siguiente comportamiento asintótico:

$${}_1F_1(-i\gamma; 1, i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})) \sim \Gamma(1) \left[\frac{e^{i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} (i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}))^{-i\gamma-1}}{\Gamma(-i\gamma)} + \frac{(-i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}))^{i\gamma}}{\Gamma(1+i\gamma)} \right]. \quad (3.60)$$

Sustituyendo 3.60 en 3.59:

$$\psi(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-\pi\gamma/2} \Gamma(1+i\gamma) \left[\frac{e^{i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} (i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}))^{-i\gamma-1}}{\Gamma(-i\gamma)} + \frac{(-i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}))^{i\gamma}}{\Gamma(1+i\gamma)} \right]. \quad (3.61)$$

Una identidad de la función gamma que nos resultará útil es: $z\Gamma(z) = \Gamma(1+z)$. Además recordemos que $i^{-i\gamma} = e^{\pi\gamma/2}$. Por otro lado, podemos expresar $kr - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ como $kr(1 - \cos\theta)$, donde θ es el ángulo entre \mathbf{k} y \mathbf{r} y $\cos\theta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}/kr$. Con estas consideraciones podemos reescribir la ecuación 3.61 como:

$$\psi(\mathbf{r}) \sim e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\gamma \log(kr - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + S(k) \frac{e^{ikr - i\gamma \log(kr - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}}{r}, \quad (3.62)$$

donde la matriz $S(k)$ es:

$$S(k) = -\frac{\gamma \Gamma(1+i\gamma)}{k \Gamma(1-i\gamma)} \frac{1}{1 - \cos\theta}. \quad (3.63)$$

Queremos encontrar ahora sus estados ligados, por lo que vamos a analizar los polos de $\Gamma(1+i\gamma)$. Para esto usaremos nuevamente que $\Gamma(1+i\gamma) = i\gamma\Gamma(i\gamma)$ y además recordemos que la función gamma tiene polos para todo entero negativo, de modo que la expresión que nos dice dónde están los polos es:

$$i\gamma = -n \rightarrow \gamma = in, n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.64)$$

Para encontrar los valores de momento correspondientes a estos polos, hagamos las sustituciones dadas por $k^2 = 2mE/\hbar^2$ y $\gamma = \sqrt{mA^2/2E\hbar^2}$, en el término $2k\gamma$. Tendremos:

$$\begin{aligned} 2k\gamma &= 2\sqrt{2mE/\hbar^2} \sqrt{mA^2/2E\hbar^2} \\ k\gamma &= \sqrt{(2mE/\hbar^2)(mA^2/2E\hbar^2)} \\ k\gamma &= \frac{Am}{\hbar^2} \\ k &= \frac{Am}{\gamma\hbar^2} \end{aligned}$$

y como $\gamma = in$, entonces los valores de momento son:

$$k = \frac{Am}{\hbar^2} \frac{1}{in} = -\frac{Am}{\hbar^2 n} i. \quad (3.65)$$

Si calculamos ahora la energía:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{Am}{\hbar^2 n} i \right)^2 = -\frac{mA^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (3.66)$$

Los valores de energía de la expresión 3.66 no son ni más ni menos que los correspondientes al átomo de hidrógeno. Analizar la matriz S en busca de sus polos en este caso nos condujo al espectro del átomo de hidrógeno sin necesidad de resolver el problema con eigenvalores.

Capítulo 4

Estados ligados y resonancias

En este capítulo vamos a estudiar a terminar de precisar algunos detalles teóricos sobre los estados ligados. En el capítulo 3 solamente se dieron las ideas base respecto a cómo relacionar los polos de la matriz S con los estados ligados de sistema, por lo que ahora los revisaremos con más cuidado. Después hablaremos sobre las resonancias, las cuales están relacionadas con los polos en el semiplano inferior.

4.1. Estados ligados: dos propiedades importantes

Como se estableció en el capítulo 3, los estados ligados corresponden a polos de la matriz S que se ubican en el semiplano superior. Ahora mostraremos dos propiedades más particulares acerca de los polos que están asociados a estados ligados.

Vamos a tomar la ecuación de Schrödinger para un potencial $U(x) = 2mV(x)/\hbar^2$ y asumiremos que el momento k es complejo:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi - U(x)\psi = 0. \quad (4.1)$$

Debido a que el potencial es real, el conjugado de $\psi(x)$ es también una solución de la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi^*}{dx^2} + k^{*2}\psi^* - U(x)\psi^* = 0. \quad (4.2)$$

Ahora vamos a multiplicar 4.1 y 4.2 por ψ^* y ψ respectivamente:

$$\psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} + \psi^* k^2 \psi - \psi^* U(x) \psi = 0, \quad (4.3)$$

$$\psi \frac{d^2\psi^*}{dx^2} + \psi k^{*2} \psi^* - \psi U(x) \psi^* = 0. \quad (4.4)$$

Restamos 4.4 de 4.3 y además recordando que $\psi^*\psi = |\psi|^2$ tenemos:

$$\psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} - \psi \frac{d^2\psi^*}{dx^2} + (k^2 - k^{*2})|\psi|^2 = 0. \quad (4.5)$$

Si sumamos y restamos un cero, escrito como $\frac{d\psi}{dx} \frac{d\psi^*}{dx} - \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx}$ podemos reescribir la ecuación 4.5 como:

$$\frac{d}{dx} (\psi^* \psi' - \psi \psi^{*'}) + (k^2 - k^{*2}) |\psi|^2 = 0. \quad (4.6)$$

Al integrar la ecuación 4.6, obtenemos:

$$(\psi^* \psi' - \psi \psi^{*'}) \Big|_{-\infty}^x + (k^2 - k^{*2}) \int_{-\infty}^x |\psi(y)|^2 dy = 0, \quad (4.7)$$

donde identificamos que dentro del paréntesis del primer término aparece la corriente de densidad de probabilidad $J(x) = \psi^* \psi' - \psi \psi^{*'}$.

Ahora, debido a que estamos considerando estados ligados, es decir, estados localizados se debe cumplir que $J(x) \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow \infty$, con lo cual, 4.7 se transforma en:

$$\psi^* \psi' - \psi \psi^{*' + (k^2 - k^{*2}) \int_{-\infty}^x |\psi(y)|^2 dy = 0. \quad (4.8)$$

Por otro lado, recordemos que los polos para la matriz S, en su forma general, dada por la ecuación 3.5 se dan cuando $|\psi' - ik\psi| = 0$. Tomando en cuenta que, en general, k es complejo, tendrá una parte real y una parte imaginaria y entonces si calculamos el módulo de $|\psi' - ik\psi|$ y lo igualamos a cero obtenemos:

$$|\psi' - ik\psi|^2 = |\psi' + \text{Im}(k)\psi|^2 + |\text{Re}(k)\psi|^2 + i\text{Re}(k)(\psi^* \psi' - \psi \psi^{*'}). \quad (4.9)$$

Ahora desarrollemos un poco el término $k^2 - k^{*2}$ para poder reescribirlo de otra forma. Sabemos que $k^2 - k^{*2} = (k + k^*)(k - k^*)$. Considerando que $k + k^* = 2\text{Re}(k)$ y $k - k^* = 2i\text{Im}(k)$ tenemos:

$$k^2 - k^{*2} = (2\text{Re}(k))(2i\text{Im}(k)) = 4i\text{Re}(k)\text{Im}(k). \quad (4.10)$$

Sustituyendo 4.13 en 4.8:

$$\psi^* \psi' - \psi \psi^{*' + 4i\text{Re}(k)\text{Im}(k) \int_{-\infty}^x |\psi(y)|^2 dy = 0. \quad (4.11)$$

Reacomodando 4.14 y multiplicando por $i\text{Re}(k)$:

$$i\text{Re}(k)(\psi^* \psi' - \psi \psi^{*'}) = 4i\text{Re}^2(k)\text{Im}(k) \int_{-\infty}^x |\psi(y)|^2 dy. \quad (4.12)$$

Ahora vamos a sustituir 4.15 en la ecuación 4.9:

$$|\psi' - ik\psi|^2 = |\psi' + \text{Im}(k)\psi|^2 + |\text{Re}(k)\psi|^2 + 4i\text{Re}^2(k)\text{Im}(k) \int_{-\infty}^x |\psi(y)|^2 dy. \quad (4.13)$$

Finalmente, de la ecuación 4.13 vemos que la condición para tener un estado ligado queda establecida por:

$$|\psi' + \text{Im}(k)\psi|^2 + |\text{Re}(k)\psi|^2 + 4i\text{Re}^2(k)\text{Im}(k) \int_{-\infty}^x |\psi(y)|^2 dy = 0. \quad (4.14)$$

Supongamos ahora que $k = a + ib$ es un polo. Entonces, como se vió en la sección 3.3, segun la ecuación 2.35, podemos escribir la función de onda, para $|x| \rightarrow \infty$ como:

$$\psi(x) \sim e^{iax} e^{-bx}. \quad (4.15)$$

Su derivada es:

$$\psi'(x) \sim (ia - b)e^{iax} e^{-bx}. \quad (4.16)$$

Sustituimos 4.15 y 4.16 en la ecuación 4.14 y tomamos el límite cuando $x \rightarrow \infty$ para obtener:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \left(2a^2 e^{-2bx} + 4a^2 b \int_{-\infty}^x |\psi(x')|^2 dx' \right) = 0. \quad (4.17)$$

Vemos que para valores positivos de b , tras tomar el límite nos queda solamente la expresión:

$$4a^2 b \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x')|^2 dx' = 0. \quad (4.18)$$

Esta sección se ha desarrollado bajo la suposición de que $k = a + ib$ corresponde a un estado ligado, por lo tanto es normalizable, de manera que la integral en la expresión 4.18 es distinta de cero y como b toma valores positivos, la ecuación solo se satisface si $a = 0$, concluyendo así, que los polos correspondientes a estados ligados se ubican en el semiplano superior y más aún, se ubican exclusivamente sobre el eje imaginario. Esta es la primera propiedad que queríamos probar.

Para valores negativos de b lo que tendremos son resonancias, que serán explicadas en la siguiente sección. Corresponden a polos ubicados en el semiplano inferior, los cuales, según las propiedad de la matriz S dada por 2.29 se manifiestan como ceros en el semiplano superior.

La segunda propiedad consiste en que los residuos de los polos de la matriz S siempre toman valores positivos. Para mostrar dicho resultado partiremos de la ecuación de Schrödinger, dada en 4.1. Tomaremos su derivada respecto al momento complejo k y posteriormente multiplicamos por ψ :

$$\psi \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^2 \partial k} + 2k\psi^2 + k^2 \psi \frac{\partial \psi}{\partial x} - U\psi \frac{\partial \psi}{\partial k} = 0. \quad (4.19)$$

Ahora construiremos otra expresión tomando nuevamente la ecuación 4.1 y multiplicándola por $\partial \psi / \partial k$:

$$\frac{\partial \psi}{\partial k} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi \frac{\partial \psi}{\partial k} - U(x) \psi \frac{\partial \psi}{\partial k} = 0. \quad (4.20)$$

Vamos a restar las ecuaciones 4.19 y 4.20 para obtener:

$$\psi \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^2 \partial k} - \frac{\partial \psi}{\partial k} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2k\psi^2 = 0. \quad (4.21)$$

Vamos a integrar por partes respecto a x y tras hacer algunas simplificaciones obtendremos:

$$\psi \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial x' \partial k} \right|_0^x - \left. \frac{\partial \psi}{\partial k} \frac{\partial \psi}{\partial x'} \right|_0^x + 2k \int_0^x \psi^2(x') dx' = 0. \quad (4.22)$$

Como los problemas que estamos tratando presentan funciones de onda pares, sabemos que $\psi'(0) = 0$, con lo cual 4.22 se convierte en:

$$-\psi \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial k} + \frac{\partial \psi}{\partial k} \frac{\partial \psi}{\partial x} = 2k \int_0^x \psi^2(x') dx'. \quad (4.23)$$

Teniendo en mente que, para los estados ligados, la solución asintótica es de la forma $\psi \simeq e^{-ikx}/S(k) + e^{ikx}$, usaremos esta expresión para calcular las derivadas que aparecen en la ecuación 4.23. De este modo calculamos:

$$-\psi \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial k} = \frac{(i+kx)S(k) - ikS'(k)}{S(k)^3} e^{-2ikx} + \frac{kx-i}{S(k)} + \frac{(i+kx)S(k) - ikS'(k)}{S(k)^2} + (kx-i)e^{2ikx}, \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial k} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{-kxS(k) + ikS'(k)}{S(k)^3} e^{-2ikx} + \frac{kx}{S(k)} + \frac{kxS(k) - ikS'(k)}{S(k)^2} - kxe^{2ikx}. \quad (4.25)$$

Ahora podemos sustituir 4.24 y 4.25 en 4.23 y llegamos a:

$$\frac{ie^{-2ikx}}{S(k)^2} - ie^{2ikx} - 2ik \frac{S'(k)}{S(k)^2} + \frac{4kx}{S(k)} = 2k \int_0^x \psi^2(x') dx'. \quad (4.26)$$

Analicemos término a término la expresión 4.26. Como estamos cerca de un polo, los términos que contienen a $S(k)$ o alguna potencia de $S(k)$ los podemos despreciar, a excepción del tercer término del lado izquierdo, ya que no conocemos el comportamiento de $S'(k)$. Además, como los estados ligados corresponden a polos en el eje imaginario positivo, el segundo término tiende a cero en el caso que estamos estudiando ($x \rightarrow \infty$). Tenemos entonces que la ecuación 4.26 se reduce a:

$$\frac{1}{S(k)^2} \frac{dS}{dk} = i \int_0^x \psi^2(x') dx'. \quad (4.27)$$

La ecuación 4.27 nos permite hallar los valores permitidos del residuo para un estado ligado y esto se debe a que del lado derecho de la expresión tenemos la integral de la densidad de probabilidad para una partícula. Si se trata de un estado ligado entonces la partícula es localizable y esta integral tendrá siempre un valor positivo.

Ahora, de manera un poco más general, escribamos a la matriz S como el cociente de dos funciones, es decir, $S(k) = q(k)/p(k)$, donde los polos de S están dados por las raíces de $p(k)$. El lado izquierdo de la ecuación 4.27 queda entonces como:

$$\frac{1}{S^2} \frac{dS}{dk} = \frac{p^2 pq' - p'q}{q^2 p^2} = \frac{pq' - p'q}{q^2}. \quad (4.28)$$

Como estamos considerando que $p(k) \sim 0$ (estamos cerca de los polos), combinando este hecho con las ecuaciones 4.27 y 4.28 podemos llegar a la expresión:

$$\frac{q}{p'} \sim i \frac{1}{\int_0^\infty \psi^2(x') dx'}. \quad (4.29)$$

Por otro lado, el teorema del residuo nos dice que podemos calcular el residuo como $\text{Res}(S(k), k_*) = q(k)/p'(k)$, con lo cuál obtenemos:

$$\text{Res}(S(k), k_*) \simeq i \frac{1}{\int_0^\infty \psi^2(x') dx'}. \quad (4.30)$$

Cerca de un polo podemos hallar el término dominante mediante el desarrollo en serie de Laurent, que está determinado por:

$$S(k) \simeq i \frac{g^2}{k - k_*}, \quad (4.31)$$

donde g^2 es el residuo dado por la expresión 4.30. Hemos probado entonces la segunda propiedad: el residuo de los polos asociados a estados ligados siempre es positivo.

4.2. Resonancias

Consideremos el siguiente potencial:

$$V(x) = V_b \Theta(b^2 - x^2) - V_0(a^2 - x^2). \quad (4.32)$$

Este potencial no presenta estados ligados dado que solo soporta valores de energía $E > 0$. Sin embargo, intuitivamente uno podría pensar que si $b - a$ es una cantidad demasiado grande, podemos tener una partícula atrapada en la región $|x| < a$ durante algún tiempo finito, antes de escapar del potencial ya que bajo estas suposiciones, el potencial en 4.32 es muy similar a los potenciales de rango finito estudiados en el capítulo 3, por lo cuál pueden aparecer estados ligados.

Si resolvemos este problema, encontraremos que para valores de k cercanos a los valores de k_b de los supuestos estados ligados, veremos que la partícula está mayormente confinada en la región $|x| < a$ mientras que lejos de los valores de k_b la partícula se encuentra fuera del pozo. Esto indica la presencia de un estado metaestable.

Ahora queremos encontrar una relación entre los valores de momento para estos estados metaestables y los polos de la matriz S asociada a este problema. Para tal fin, vamos a considerar un potencial que consiste en dos barreras dadas por funciones delta de Dirac. La razón de esto es que, como se vió en capítulo 3, la matriz S para potenciales ultra-locales tiene una forma mucho más simple que la de un potencial de rango finito. Sea entonces nuestro potencial:

$$V(x) = \alpha [\delta(x + a) + \delta(x - a)]. \quad (4.33)$$

En este caso, la solución general es:

$$\psi(x) = \begin{cases} S(k)e^{-ikx} + e^{ikx} & \text{si } x < -a \\ A_k \cos(kx) & \text{si } |x| < a \\ e^{-ikx} + S(k)e^{ikx} & \text{si } x > a \end{cases} \quad (4.34)$$

La derivada entonces es:

$$\psi'(x) = \begin{cases} ik(-S(k)e^{-ikx} + e^{ikx}) & \text{si } x < -a \\ -kA_k \sin(kx) & \text{si } |x| < a \\ ik(-e^{-ikx} + S(k)e^{ikx}) & \text{si } x > a \end{cases} \quad (4.35)$$

Como tenemos funciones delta de Dirac en $x = \pm a$ necesitamos tomar las condiciones de frontera apropiadas. En particular, para $x = a$ tenemos que:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{a+\varepsilon} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{a-\varepsilon} \right] = \mu \psi(a), \quad (4.36)$$

donde $\mu = 2m\alpha/\hbar^2$ debido a la redefinición de constantes para simplificar la escritura de la ecuación de Schrödinger tal como se hizo en el capítulo 3.

Sustituyendo 4.35 en 4.36 con las condiciones apropiadas y tomando el límite indicado, obtenemos:

$$ik(-e^{-ika} + S(k)e^{ika}) + kA_k \sin(ka) = \mu(e^{-ika} + S(k)e^{ika}). \quad (4.37)$$

Luego, debido a la continuidad de $\psi(x)$ también podemos establecer que:

$$A_k \cos(ka) = e^{-ika} + S(k)e^{ika} \rightarrow A_k = \frac{e^{-ika} + S(k)e^{ika}}{\cos(ka)}. \quad (4.38)$$

Sustituyendo 4.38 en 4.37 obtenemos:

$$ik(-e^{-ika} + S(k)e^{ika}) + k \sin(ka) \frac{e^{-ika} + S(k)e^{ika}}{\cos(ka)} = \mu(e^{-ika} + S(k)e^{ika}). \quad (4.39)$$

Reescribiendo el seno y el coseno en términos de la identidad de Euler podemos reescribir 4.39 como:

$$ik(-e^{-ika} + S(k)e^{ika}) - ik(e^{-ika} + S(k)e^{ika}) \frac{e^{ika} - e^{-ika}}{e^{ika} + e^{-ika}} = \mu(e^{-ika} + S(k)e^{ika}). \quad (4.40)$$

Desarrollamos los productos en 4.40 y del lado izquierdo agrupamos los que contienen a la matriz S y del lado derecho los que no:

$$\begin{aligned} S(k) \left(ik e^{ika} - \mu e^{ika} - ik e^{ika} \frac{e^{ika} - e^{-ika}}{e^{ika} + e^{-ika}} \right) &= ik e^{-ika} + \mu e^{-ika} + ik e^{-ika} \frac{e^{ika} - e^{-ika}}{e^{ika} + e^{-ika}} \\ \frac{S(k)(ik e^{2ika} + ik - \mu e^{2ika} - \mu - ik e^{2ika} + ik)}{e^{ika} + e^{-ika}} &= \frac{(ik + ik e^{2ika} + \mu + \mu e^{-2ika} + ik - ik e^{-2ika})}{e^{ika} + e^{-ika}} \\ S(k)(2ik - \mu - \mu e^{2ika}) &= (2ik + \mu + \mu e^{-2ika}). \end{aligned}$$

Después de simplificar términos llegamos a:

$$S(k) = \frac{2ik + \mu(1 + e^{-2ika})}{2ik - \mu(1 + e^{2ika})}.$$

Multiplicando y dividiendo por $-i/2$ obtenemos finalmente:

$$S(k) = \frac{k - i\frac{\mu}{2}(1 + e^{-2ika})}{k + i\frac{\mu}{2}(1 + e^{2ika})}, \quad (4.41)$$

donde nuevamente podemos notar que si tomamos el caso en el que $a \rightarrow 0$, es decir, el caso en el no hay separación entre ambas barreras, recuperamos el caso ultra local, dado por 3.11.

Si tomamos un polo en el eje imaginario, digamos, de la forma $k = it$ y calculamos el límite cuando $t \rightarrow \infty$ tenemos:

$$\lim_{k \rightarrow i\infty} S(k) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{it - i\frac{\mu}{2}(1 + e^{2ta})}{it + i\frac{\mu}{2}(1 + e^{-2ta})} = -\infty, \quad (4.42)$$

lo cual indica que se tiene una singularidad esencial cuando $k \rightarrow i\infty$.

Para encontrar los polos vamos a igualar a cero el denominador de la matriz S en 4.41. Nos quedaría:

$$\begin{aligned} 2k + i\mu &= -i\mu e^{2ika} \\ e^{2ika} &= -1 + \frac{2ik}{\mu}. \end{aligned}$$

Considerando ahora que las barreras son muy altas, tenemos que tomar el límite cuando $\mu \rightarrow \infty$, con lo cual obtendremos:

$$e^{2ika} = -1. \quad (4.43)$$

Gracias a la identidad de Euler podemos identificar los valores de k_n a partir de la expresión 4.43, los cuales son:

$$\cos(2ka) = -1 \rightarrow 2k_n a = (2n + 1)\pi. \quad (4.44)$$

Las resonancias se localizan en:

$$k_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{a} \quad (4.45)$$

Estos valores de k_n corresponden a los mismos para un pozo infinito de anchura $2a$ y conducen a valores de energía E_n positivos. Esto parece ser una contradicción con la afirmación que indica que valores de energía positivos corresponden a estados de dispersión y no a estados ligados, pero es posible ya que las barreras delta son muy altas, lo que permite que la partícula permanezca encerrada por un tiempo finito en la región que delimitan dichas barreras.

También podemos extraer información sobre el comportamiento si observamos con más detalle la matriz S en 4.41 y tomamos el límite cuando $\mu \rightarrow \infty$:

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} S(k) = \frac{-\frac{i\mu}{2}(1 + e^{-2ika})}{\frac{i\mu}{2}(1 + e^{2ika})} = -\frac{e^{2ika+1}}{e^{2ika} + 1} = -e^{-2ika}. \quad (4.46)$$

El signo negativo de este resultado indica que si la partícula incide en alguna de las barreras ubicadas en $x = \pm a$, entonces se reflejara totalmente. Debido a

esto podemos afirmar que si la partícula incidente viene de una región por fuera de $(-a, a)$, entonces la probabilidad de encontrar a la partícula entre las barreras es cero.

El término e^{2ika} es solamente la fase con la cual la onda se va a reflejar en la barrera.

Tomemos ahora la resonancia más baja, es decir, tomamos k_0 partiendo de la expresión 4.46 y buscamos un polo de la forma $k = k_0 + \alpha - i\gamma$, con lo cual:

$$k = \frac{\pi}{2a} + \alpha - i\gamma \quad (4.47)$$

Para calcular α y γ tenemos que analizar nuevamente el denominador de la matriz S, el cual reescribiremos de la siguiente forma:

$$\mu \left(\frac{2k}{\mu} + i(1 + e^{2ika}) \right) = 0. \quad (4.48)$$

Sustituyendo k de 4.47 y considerando que a y γ son muy pequeños podemos escribir 4.48 como:

$$\frac{\pi}{a\mu} + 2\frac{\alpha}{\mu} - 2i\frac{\gamma}{\mu} - 2i\gamma a + 2i\alpha^2 a^2 + 2\alpha a \sim 0. \quad (4.49)$$

Resolviendo para la parte real y la parte compleja nos lleva a que:

$$\alpha \approx -\frac{\pi}{2a^2\mu} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{a^2\mu}\right); \gamma \approx \frac{\pi^2}{4a^3\mu^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{a^2\mu}\right). \quad (4.50)$$

Analizando los signos de los parámetros que definen a γ notamos que se trata de una cantidad positiva, por lo que, de acuerdo a 4.47 podemos afirmar que el polo se encuentra en el semiplano inferior. Físicamente, este polo describe a la partícula que esta encerrada entre las barreras delta pero que puede escapar al cabo de un tiempo finito τ . Una vez transcurrido este tiempo, la probabilidad de hallar a la partícula entre las barreras será muy baja.

Por otro lado, podemos calcular la energía asociada a una resonancia, cuyo polo está dado por 4.47 y ver que se obtiene:

$$E_R = \frac{\hbar^2 k_R^2}{2m} = E_0 - i\frac{\Gamma}{2}, \quad (4.51)$$

donde:

$$E_0 = \frac{\hbar^2(k_0^2 - \gamma^2)}{2m}; \Gamma = \frac{2\hbar^2\gamma k_0}{m}. \quad (4.52)$$

El tiempo de decaimiento esta dado por:

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}, \quad (4.53)$$

que para el caso tratado en esta sección, usando 4.50 y 4.52 se convierte en:

$$\tau = \frac{4ma^4\mu^2}{\hbar\pi^3}. \quad (4.54)$$

De esta última expresión podemos notar que cuando las barreras están muy cercanas, es decir, cuando a es muy pequeño, la partícula permanece muy tiempo atrapada antes de escapar de las barreras delta, lo cual también se cumple para μ pequeñas. Esto tiene sentido porque esos valores de μ implicarían que la altura de las barreras es pequeña y por lo tanto la partícula escapa más fácilmente.

Capítulo 5

Conclusiones

La matriz S es un elemento fundamental para el estudio de la teoría de la dispersión debido a que ofrece una manera efectiva de obtener información sobre las interacciones fuertes sin la necesidad de conocer explícitamente el potencial que les da lugar y además permite estudiar los efectos de las interacciones asintóticamente, lo cual facilita conocer el comportamiento en puntos lejanos del rango efectivo del potencial en cuestión. Lo poderoso del método radica en aprovechar las propiedades que la matriz S cumple como operador, por ejemplo, la propiedad de unitariedad nos garantiza que no se está perdiendo información durante el proceso de dispersión, lo cual da confiabilidad a las cantidades físicas que podamos medir del sistema. La simetría de esta matriz es útil para simplificar muchos cálculos pero también proporciona información sobre las amplitudes de dispersión. Usando estas propiedades, y mediante el análisis en el plano complejo de la matriz S , se vuelve mucho más fácil la obtención de información sobre un sistema en relación a sus posibles estados ligados, la fuerza o intensidad con la que las partículas se acoplan o bien los tiempos que tarda un sistema en abandonar un estado metaestable. La matriz S también sirve para contrastar la información obtenida para distintos tipos de potenciales tomando aproximaciones o límites para hallar similitudes o generalidades entre los distintos tipos de potencial que se estudiaron así como sobre sus comportamientos asintóticos. Un ejemplo de esto es tomar hacer tender el ancho de un potencial de rango finito a cero para contrastar con el caso ultra-local. La matriz S también es útil para detectar cuáles polos tienen significado físico y por lo tanto son relevantes de estudiar e interpretar.

Se espera que al combinar el estudio de la matriz S y la interpretación de sus propiedades con el método *Bootstrap* en potenciales específicos se pueda obtener información relevante sin la necesidad de resolver el problema analíticamente, lo cual puede resultar bastante útil en fenómenos de interacciones fuertes cuyos experimentos requieran condiciones complicadas, por ejemplo, tiempos de observación muy cortos o decaimientos rápidos. Particularmente se implementará este método con dos potenciales en específico: el potencial de Yukawa y el potencial de Cornell.

Emplear este método para los potenciales mencionados nos permitirá sentar las bases para analizar problemas que impliquen interacciones fuertes a nivel subatómico.

Bibliografía

- [1] J.J. Sakurai. *Modern quantum mechanics*. Cambridge Press University, 2011.
- [2] Ruel Churchill. *Variable compleja y aplicaciones*. McGraw-Hill, 1992.
- [3] David Griffiths. *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge University Press, 2018.
- [4] Marcos Hernández. “The S-Matrix Bootstrap bounds on coupling”. Tesis doct. Universidad de Colima, 2023.