

Representación espectral con autovalores complejos para describir sistemas nucleares abiertos

Duilio Diruscio



Departamento de Física
Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura
Universidad Nacional de Rosario

2024

Trabajo final de grado para optar por el
título de Licenciado en Física

Autor: Duilio Diruscio

Director: Dr. Rodolfo M. Id Betan

Jurados:

Dr. Alejandro Mezio

Dr. Luis O. Manuel

Dr. Rodolfo M. Id Betan

Agradecimientos

En primer lugar y por sobre todos, quiero agradecer a mis padres por su apoyo incondicional y por confiar en mí. Estos logros son tanto de ellos como míos.

A los profesores de la facultad, agradezco la dedicación con la que nos guiaron a lo largo de estos años. En particular, a mi director, Rolo, por su paciencia y compromiso en este proceso final.

Finalmente, quiero agradecer a mis amigos, viejos y nuevos. A los que conocí en la facultad, especialmente a Julieta, Elisa, Josefina, Gero y Leandro. Gracias por el apoyo y por hacer esta experiencia mucho más llevadera.

Resumen

La tesis se centra en el estudio de sistemas nucleares abiertos, utilizando una representación espectral con valores propios complejos. El trabajo está dividido en varios capítulos, que abarcan el modelo nuclear, la teoría cuántica de dispersión, los espacios de Hilbert equipados como extensión de la matemática convencional de la mecánica cuántica y la aplicación de estos conceptos a núcleos específicos como el ^{17}O , ^{13}Be , ^{11}Be y ^5He .

Se emplea el modelo de capas nuclear y se utilizan potenciales fenomenológicos, incluyendo el potencial de Woods-Saxon y el de acoplamiento espín-órbita, para describir los niveles de energía y estados de los núcleos.

El objetivo es desarrollar una comprensión de los núcleos inestables, en tanto sistemas cuánticos abiertos, exponer el papel de la representación espectral en este contexto y analizar las consecuencias de su implementación.

Índice general

1. Modelo nuclear	1
1.1. Introducción	1
1.2. Modelo de capas	2
1.2.1. Potencial medio	3
2. Teoría cuántica de dispersión	8
2.1. Estados de dispersión	9
2.1.1. Operadores de Møller	10
2.1.2. Operador S	12
2.2. Funciones de Green	13
2.2.1. Operadores de Green en función de la energía	14
2.3. Estados de dispersión estacionarios	16
2.3.1. Amplitud de scattering	18
2.4. Ondas parciales	20
2.4.1. Funciones radiales libres	20
2.4.2. Funciones radiales de dispersión	21
2.4.3. Corrimiento de fase	22
2.4.4. Sección eficaz	22
3. Estados resonantes y completitud	23
3.1. Soluciones regulares e irregulares de la ecuación radial	23
3.1.1. Solución regular	23
3.1.2. Solución irregular	24
3.2. Función de Jost	24
3.2.1. Función de Green parcial	26
3.2.2. Raíces de la función de Jost $\mathcal{F}_l(-k)$	26
3.3. Completitud	29
3.4. Resonancias	31
3.4.1. Regularización con factor exponencial	35
3.4.2. Regularización por escalado complejo	35

3.5. Completitud de Berggren	37
3.6. Aplicación de la representación de Berggren	41
3.6.1. Una partícula	41
3.6.2. Dos partículas	43
4. Espacios de Hilbert equipados (RHS)	45
4.1. Espacio Φ^\times	46
4.1.1. Espacio $\Phi^{\times\times}$	47
4.2. Terna de Gel'fand	48
4.2.1. Ternas equivalentes	48
4.2.2. Autovectores generalizados	49
4.2.3. Teorema nuclear espectral	49
4.3. Construcción de Φ	50
4.3.1. Espacios de Hardy	51
4.3.2. Espacio de Schwartz	51
4.3.3. Espacios Δ y \mathcal{D}	52
4.4. Generalización	55
5. Valores medios en estados resonantes	59
5.1. Definición teórica de valor medio en estados resonantes	59
5.1.1. Definición de Berggren	59
5.1.2. Definición de Bohm	61
5.1.3. Definición de Michel	62
5.2. Operador r^2 y R_{rms}	63
5.3. Resultados	64
5.3.1. Núcleos con carozos de capas cerradas	64
5.3.2. Núcleos halo	72
5.4. Discusión	76
6. Conclusiones	79
Bibliografía	83
A. Sobre la teoría de dispersión	84
A.1. Deducción de la ecuación de Lippmann-Schwinger	84
A.2. Sobre las funciones radiales	86
B. Espacios	87
B.1. Espacio de Hilbert \mathcal{H}	87
B.2. Definiciones adicionales	89
B.3. Teoremas adicionales	91

Capítulo 1

Modelo nuclear

1.1 Introducción

La física nuclear es la rama de la física que estudia los núcleos atómicos y sus interacciones y tiene sus raíces a finales del siglo XIX, cuando se comenzó a explorar el mundo subatómico. Su desarrollo se entrelaza con descubrimientos y avances tecnológicos que permitieron manipular la materia a nivel atómico.

Puede decirse que comenzó con el descubrimiento de la radiactividad por Becquerel en 1896. Dos años después, Pierre y Marie Curie sintetizan el primer elemento radiactivo, el Radio. Posteriormente, ya en el siglo XX, Rutherford llevó a cabo su experimento de dispersión alfa, que reveló la existencia de un núcleo atómico denso en el centro del átomo, abriendo la puerta al estudio de la estructura interna del núcleo [1].

Esto marcó el comienzo de la física nuclear de núcleos inestables e inició el estudio de la estabilidad nuclear, los procesos de desintegración y los núcleos exóticos. Estos difieren de los núcleos estables que se encuentran en la naturaleza ya que pueden tener una cantidad inusual de protones o neutrones, en comparación con los núcleos más comunes, radios nucleares muy grandes, una distribución de masa más deslocalizada y una vida corta [2]. El artículo [3] es uno de los primeros en proporcionar evidencia experimental de estas propiedades, específicamente para el radio del núcleo exótico ^{11}Li . Dentro de esta categoría de núcleos exóticos, destacan los núcleos *halo*, caracterizados por tener nucleones que están débilmente ligados y forman una estructura extendida alrededor del núcleo central, formando una especie de “halo” [4].

En este capítulo se desarrollará el modelo que se usará para describir ciertas propiedades de los núcleos. Lo ideal sería resolver la ecuación de Schrödinger para los nucleones que forman el núcleo, sabiendo cuál la interacción entre ellos; básicamente, resolver el problema de muchos cuerpos. Dado que este es, en general, irresoluble exactamente, se debe recurrir a aproximaciones.

Una de ellas es el modelo de capas de campo medio [5]. Inicialmente inspirado en el modelo de capas electrónicas en átomos hidrogenoides, este enfoque considera que los nucleones ocupan los estados de energía o *capas* producidos por un potencial central, o sea, estos no interactúan entre sí formalmente sino que se considera que lo hacen a través de este potencial.

Al final, se describirán los potenciales medios, llamados fenomenológicos, que serán usados en el capítulo 5 de aplicación.

1.2 Modelo de capas

Considerar un núcleo de número másico A , con Z protones y N neutrones, que se consideran puntuales, sin estructura interna y que sus masas son iguales (m). Estos, en lo formal, se rigen por un hamiltoniano:

$$H' = \sum_{i=1}^A \frac{-\hbar}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^A v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$$

Con v siendo el potencial intranucleón. Como se dijo, no es posible diagonalizar ese hamiltoniano por lo que se va a pasar al *hamiltoniano de campo medio*, con un potencial tal que [5]:

$$H = \sum_{i=1}^A \frac{-\hbar}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^A V(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^A H_i \quad (1.1)$$

De forma que:

$$H' - H = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^A v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - \sum_{i=1}^A V(\mathbf{r}_i) = V_{residual} \quad (1.2)$$

Así, el sistema físico asociado a H' puede entenderse como un sistema de partículas no interactuantes, como se puede ver en (1.2), regidas por H más una interacción remanente.

Si se buscan los autoestados de H , basta con resolver el problema de autovalores para la partícula i -ésima. Así, si Ψ es autofunción de H , entonces:

$$\begin{aligned}
H\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) &= E\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) \\
H_i\psi_i(\mathbf{r}_i) &= \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}_i) \\
\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) &= \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)\dots\psi_A(\mathbf{r}_A) = \prod_{i=1}^A \psi_i(\mathbf{r}_i) \\
E &= \sum_{i=1}^A \varepsilon_i
\end{aligned} \tag{1.3}$$

En este sistema simplificado, asociado a H , cada partícula puede interpretarse como un nucleón regido por el potencial generado por los otros $A - 1$ nucleones, llamados carozo o *core*, modelado por el potencial medio. Con esto, calculando la energía ε_i y los estados ψ_i , llamado estado de partícula simple o *Single-particle state*, y la solución para el sistema será el producto de estas funciones. Como se trata de fermiones, la función de onda debe ser antisimétrica, con lo cual, la solución adecuada será el determinante de Slater de las funciones de partícula simple ψ_i .

Así, bastaría con calcular los estados para un nucleón y sus niveles de energía correspondientes e ir ocupándolos con el resto de los nucleones, siempre considerando su degeneración y el principio de exclusión de Pauli. Desde acá se omite el subíndice i para referirse a los *single-particle* pero tener presente que ψ corresponde a un nucleón cualquiera.

La aproximación de campo medio consiste en buscar un hamiltoniano medio óptimo que minimice la interacción residual y evaluar si sus autoestados son una buena descripción del estado físico. Un ejemplo de esto es el método de Hartree-Fock [5].

1.2.1 Potencial medio

Otra opción es sumarle a la aproximación de campo medio la aproximación de partículas independientes. Esto es buscar un campo medio **central** que reproduzca adecuadamente los datos experimentales, despreciando $V_{residual}$ y ponderar si sus autoestados describen la realidad. Esto es lo que se hará en este trabajo.

El potencial fenomenológico que se usará es:

$$V(r) = V_{WS}(r) + V_C(r) + V_{SO}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \tag{1.4}$$

Potencial de Woods-Saxon V_{WS} :

$$V_{WS}(r) = \frac{-V_0}{1 + e^{(r-R)/a}} \tag{1.5}$$

Además de ser atractivo, una interpretación física de este potencial es que representa la distribución radial de la densidad de masa nuclear, por eso tiene la forma matemática de la distribución de Fermi.

Tiene tres parámetros: R es el *radio nuclear efectivo*, definido por $R = r_0 A^{1/3}$, donde r_0 es llamado radio nuclear reducido y tiene un valor típico de $1,25 \text{ fm}$.

V_0 es la intensidad del potencial.

El parámetro a es la *difusividad*. Es una medida de la extensión radial de la influencia del potencial nuclear. Una difusividad pequeña ($\approx 0,01 \text{ fm}$) genera un Woods-Saxon similar a un escalón.

Potencial de Coulomb V_C :

$$V_C = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \begin{cases} \frac{1}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2} \right) & r < R \\ \frac{1}{r} & r > R \end{cases} \quad (1.6)$$

El potencial coulombiano a usar difiere ligeramente del convencional dado que se usa el de una esfera cargada uniformemente.

Potencial de Espín-Órbita o *Spin-orbit* V_{SO} :

$$V_{SO}(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{-V_1}{a} \left(\frac{r_0}{\hbar} \right)^2 \frac{e^{(r-R)/a}}{r(1 + e^{(r-R)/a})^2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (1.7)$$

V_1 será la intensidad para este potencial, $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ es el operador de momento angular orbital y $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ el operador de spin. Notar que $rV_{SO}(r)$ es proporcional a la derivada de Woods-Saxon, por lo que tendrá un pico en la región superficial del núcleo (cerca de R) y, como antes, la interacción en el “interior” del núcleo será prácticamente nula.

La difusividad a que aparece en ambos potenciales no debe ser necesariamente igual. El potencial de Woods-Saxon podría tener una difusividad a_{ws} y el espín-órbita una a_{so} , como será el caso en capítulo 5.

Ahora, el término que acompaña al spin-orbit tiene el producto escalar del momento orbital y el spin. Esto genera que el hamiltoniano H , con ese potencial, no conmute con los operadores L_i y S_i para cualquier i ; en particular, no conmuta con L_z y S_z . Esto por las propias reglas de conmutación que definen a un operador momento. Así, estos últimos, no podrán ser usados en un conjunto completo de observables que conmutan (CCOC) junto con H , \mathbf{L}^2 y \mathbf{S}^2 , que es lo que se estila usar ante potenciales centrales sin este tipo de interacción, para obtener una base del espacio de estados

formada por autovectores comunes o, en $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$, autofunciones comunes, donde \mathbb{C}^2 es el espacio de funciones de spin.

Con espacio de estados nos referimos a $\mathcal{H} \otimes \mathbb{C}^2$, donde \mathcal{H} es el espacio de vectores de estado para una partícula sin spin (ver en apéndice B.1), isomorfo a $L^2(\mathbb{R}^3)$. Se usará la misma notación para los operadores en el espacio de funciones y en el espacio abstracto.

Los autovectores de estos operadores de momento son:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{L}^2 Y_l^{m_l}(\phi, \theta) &= l(l+1) \hbar^2 Y_l^{m_l}(\phi, \theta) \\
 \mathbf{S}^2 \chi_{\frac{1}{2}, m_s} &= \frac{3}{4} \hbar \chi_{\frac{1}{2}, m_s} \\
 L_z Y_l^{m_l}(\phi, \theta) &= m_l \hbar Y_l^{m_l}(\phi, \theta) \\
 S_z \chi_{\frac{1}{2}, m_s} &= m_s \hbar \chi_{\frac{1}{2}, m_s}
 \end{aligned} \tag{1.8}$$

Siendo $Y_l^{m_l}$ los armónicos esféricos y $\chi_{\frac{1}{2}, m_s}$ la función de spin. Dado que tanto protones como neutrones son fermiones.

Al considerar el momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, dado que $\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2, J_z$ y H sí conmutan, habrá una base de autovectores comunes tales que:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{J}^2 |nl \frac{1}{2} jm\rangle &= j(j+1) \hbar^2 |nl \frac{1}{2} jm\rangle \\
 \mathbf{L}^2 |nl \frac{1}{2} jm\rangle &= l(l+1) \hbar^2 |nl \frac{1}{2} jm\rangle \\
 J_z |nl \frac{1}{2} jm\rangle &= m \hbar |nl \frac{1}{2} jm\rangle \\
 H |nl \frac{1}{2} jm\rangle &= \varepsilon_{nlj} |nl \frac{1}{2} jm\rangle \\
 \psi_{nljm}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | nl \frac{1}{2} jm \rangle = \langle r | nlj \rangle \langle \hat{\mathbf{r}} | l \frac{1}{2} jm \rangle = \frac{1}{r} u_{nlj}(r) \mathcal{Y}_{ljm}(\theta, \phi) \\
 \mathcal{Y}_{ljm}(\theta, \phi) &= \sum_{m_s, m_l} \langle lm_l \frac{1}{2} m_s | jm \rangle Y_l^{m_l}(\theta, \phi) \chi_{\frac{1}{2}, m_s}
 \end{aligned} \tag{1.9}$$

Donde $u_{nlj}(r)$ son las funciones radiales, $\langle lm_l \frac{1}{2} m_s | jm \rangle$ son los coeficientes de Clebsch-Gordan, correspondientes al desarrollo de los elementos de la base acoplada (con los momentos totales) en función de la base desacoplada, en este caso.

En definitiva, la base acoplada es la de autovectores comunes de este nuevo CCOC, que surge de reemplazar L_z y S_z por \mathbf{J}^2 y J_z en el CCOC convencional para hamiltonianos centrales.

Como $\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S}^2 \iff \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2}{2}$, que implica:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} |nl\frac{1}{2}jm\rangle = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \hbar^2 |nl\frac{1}{2}jm\rangle \quad (1.10)$$

Dado que j puede tomar dos valores, $j = l + 1/2$ o $l - 1/2$, para condensar notación se define el coeficiente $\lambda_{l,j} = j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}$ con los valores posibles de $\lambda_{l,l-1/2} = -(l+1)$ y $\lambda_{l,l+1/2} = l$. Lo que hará que las $u_{nlj}(r)$ son aquellas que cumplen:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V_{WS}(r) + V_C(r) + \frac{\hbar^2}{2} \lambda_{l,j} V_{SO}(r) \right] u_{nlj}(r) = \varepsilon_{nlj} u_{nlj}(r) \quad (1.11)$$

O sea, que estos autovectores también lo son de $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ con un autovalor que depende de j y l , por eso en (1.9) y (1.11) la energía y la autofunción radial dependen de tres números cuánticos. La barrera centrífuga hace que la energía tenga como parámetro a l y el factor $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ hace que la energía tenga como parámetro también a j , además del número cuántico n . Naturalmente, el potencial seguirá siendo central y el efecto de ese producto escalar de momentos se limita a lo que se explicó arriba.

Algo importante es que el potencial de Coulomb está sólo para protones; en el caso de neutrones es nulo.

Con la incorporación del número cuántico j , hay que modificar la nomenclatura convencional para los niveles. Para potenciales centrales sin interacción espín-órbita se tenía nl ; $0s$, $2p$ o $5d$, por ejemplo. Ahora serán nl_j , por ejemplo $0s_{1/2}$, $0p_{3/2}$, $0p_{1/2}$.

En la figura (1.1), se muestra un esquema de los niveles de energía para el potencial en (1.11), cada nivel tiene una degeneración de $2j+1$. Cada uno de estos niveles discretos se denomina *capa*.

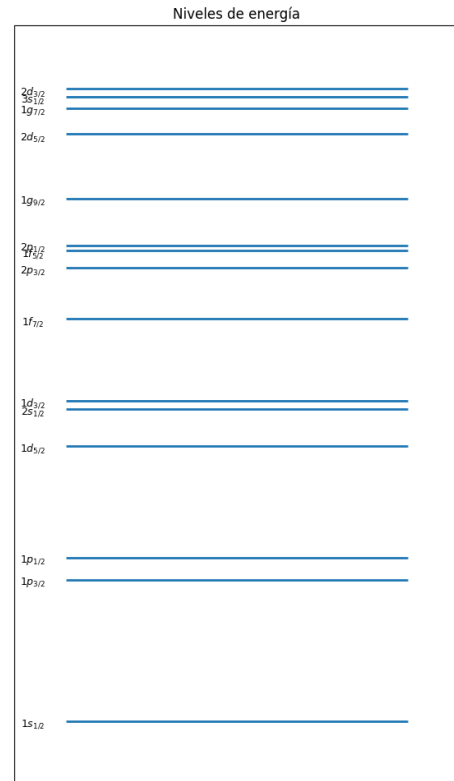


Figura 1.1: Esquema de los niveles de energía generados por el potencial descrito, es decir, Woods-Saxon más Espín-órbita

Se dice que un núcleo está en su estado fundamental cuando sus nucleones están en los niveles de energía más bajos disponibles, siempre siguiendo Pauli. Por ejemplo, el núcleo ${}^4_2\text{He}_2$ estaría en su estado fundamental cuando sus dos neutrones estén ocupando el $1s_{1/2}$ y sus dos protones también (ver figura 1.1). Si uno o más nucleones no están en el nivel mínimo de energía disponible, será un estado excitado del núcleo.

Este trabajo se limitará a considerar los núcleos como un core de $A - 1$ nucleones en su estado fundamental y un neutrón de valencia capturado o dispersado por el potencial generado por este. Por ejemplo, el ${}^{17}\text{O}$ puede ser considerado como ${}^{16}\text{O}$ como core más un neutrón.

Con esto se limita el problema a un neutrón dispersado por (1.4) y el papel del core estará reducido a limitar el nivel de energía mínimo a ocupar. No se tratará la dispersión de protones.

Dado que siempre se tendrá al carozo en su estado fundamental, los estados excitados del núcleo como un todo coinciden con los estados excitados del neutrón de valencia.

Capítulo 2

Teoría cuántica de dispersión

En la versión más sencilla de la teoría de dispersión o *scattering* cuántico se estudia cómo interactúan proyectiles (partículas) cuando colisionan entre sí o con un potencial externo [7]. En lugar de describir las trayectorias precisas de las partículas, como en el caso clásico, se usan sus funciones de onda y todo el formalismo cuántico y se busca la probabilidad de que una partícula sea dispersada en una cierta dirección o estado tras la interacción. Típicamente se trata de determinar cómo se transforman las funciones de onda de entrada en funciones de onda de salida después de la misma.

En este capítulo se expondrá una síntesis de una buena parte de la teoría formal de dispersión cuántica para partículas sin spin, que es extensísima, aunando las diferentes fuentes y buscando la mayor claridad posible. Siempre se tratará de dispersión elástica, es decir, con energía conservada en el proceso, lo que se probará más adelante.

Como ocurría en mecánica clásica, la colisión elástica de dos partículas, de masas m_1 y m_2 , que interactúan con un potencial que depende de la distancia entre ellas, puede reducirse, ubicando el sistema de referencia en el centro de masa, al problema de una cuasipartícula de masa reducida $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ dispersada por un potencial central [8]. Con lo cual, la teoría que sigue, que describe la dispersión por potencial, incluye la descripción de la colisión elástica de dos partículas.

Dado un sistema nuclear devenido en un modelo de campo medio de nucleones no interactuantes, como el descrito en (1.2), el problema nuclear se reduce a resolver los estados de partícula simple de un hamiltoniano central. Por esto, la teoría de scattering cuántica desempeña un papel clave en la caracterización de la estructura y dinámica de los núcleos atómicos en el marco del modelo del capítulo 1.

Siempre se considerarán potenciales que cumplan las siguientes hipótesis [7]:

$$\begin{aligned}
(i) \quad & \int_0^\infty r|V(r)|dr < \infty \\
(ii) \quad & V(r) \equiv 0 \quad \forall r \geq a > 0
\end{aligned} \tag{2.1}$$

La primera implica, entre otras cosas, que, cerca del origen, el potencial se comporte “mejor” que r^{-2} .

La segunda condición regula el comportamiento a grandes distancias y restringe a potenciales con “cut-off” o de rango finito, es decir, que se anulan idénticamente después de un dado $r = a$. Es una condición fuerte. En general, se usan condiciones más débiles, como $\int_0^\infty r^2|V(r)|dr < \infty$ o potenciales que decrecen más rápido que una dada exponencial [8], pero por facilidades matemáticas y dado que serán los usados para la aplicación numérica del capítulo 5, salvo que se diga lo contrario, los potenciales serán de rango finito.

El potencial de Coulomb queda fuera de consideración, dado que no cumple ninguna de las condiciones en (2.1). Es más, en general, ninguno de los resultados de la teoría de dispersión que sigue se mantienen para Coulomb. Este está dentro de la categoría especial de “potenciales singulares” y requiere un desarrollo teórico a parte [7]. De cualquier forma, esto no traerá problemas ya que, como se dijo, se tratará la dispersión de neutrones.

Para simplificar un poco los desarrollos matemáticos, se adoptan unidades tales que:

$$\hbar = 1 \tag{2.2}$$

2.1 Estados de dispersión

Si se considera un sistema cuántico caracterizado por un hamiltoniano $H = H_0 + V$, donde $H_0 = \mathbf{P}^2/2m$ es el hamiltoniano libre, el estado dado por:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-Hit} |\psi\rangle = U(t) |\psi\rangle \tag{2.3}$$

es llamado órbita [7]. Donde $U(t)$ es el operador evolución y $|\psi\rangle$ es cualquier vector del espacio \mathcal{H} , que vendrá a hacer las veces de órbita a $t = 0$. Esta órbita será solución de la ecuación de Schrödinger asociada al sistema completo, con hamiltoniano H :

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \tag{2.4}$$

Otros estados fundamentales son los llamados estados asintóticos $|\psi_{in}\rangle$ y $|\psi_{out}\rangle$, cuya evolución vendrá dada por el operador $U^0(t) = e^{-iH_0t}$ que es el operador evolución

asociado a H_0 , es decir, se comportan como estados libres. De manera que los estados $|\psi_{in/out}(t)\rangle = U^0(t) |\psi_{in/out}\rangle$ son soluciones de la ecuación de Schrödinger asociada al hamiltoniano libre:

$$i \frac{d}{dt} |\psi_{in/out}(t)\rangle = H_0 |\psi_{in/out}(t)\rangle \quad (2.5)$$

Se dice que son la asíntota in(out) de una órbita $U(t) |\psi\rangle$ si cumplen la siguiente condición de convergencia en norma:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow -\infty} \|U(t) |\psi\rangle - U^0(t) |\psi_{in}\rangle\| &= 0 \\ \lim_{t \rightarrow \infty} \|U(t) |\psi\rangle - U^0(t) |\psi_{out}\rangle\| &= 0 \end{aligned} \quad (2.6)$$

Para los potenciales utilizados, puede demostrarse que a toda asíntota in(out) le corresponde un estado $|\psi\rangle$, mientras que la recíproca no es cierta.

2.1.1 Operadores de Møller

A partir las relaciones de convergencia en (2.6), se definen los operadores de Møller [7, 8]:

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \mp} U(t)^{\dagger} U^0(t) \quad (2.7)$$

Tal que asignan a cada estado in(out), libres, su correspondiente estado interactuante:

$$\begin{aligned} |\psi+\rangle &= \Omega_+ |\psi_{in}\rangle \\ |\psi-\rangle &= \Omega_- |\psi_{out}\rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

Por ahora, no es cierto que a todo estado $|\psi\rangle$ le corresponda un estado in y uno out (esto vendrá dado más adelante por la completitud asintótica); es decir, los operadores de Møller vienen definidos de forma tal que:

$$\Omega_{\pm} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{R}_{\pm} \quad (2.9)$$

Con \mathcal{R}_{\pm} siendo los espacios imagen de los operadores Ω_{\pm} y, en general, $\mathcal{R}_+ \neq \mathcal{R}_-$.

Para los potenciales asumidos puede demostrarse que [7]:

- $\nexists |\psi\rangle_{in} \vee |\psi\rangle_{out} / |\psi_{\pm}\rangle$ sea un estado ligado de H , o sea, los estados ligados no tienen estados asintóticos. Esto es garantizado por un teorema de ortogonalidad, tal que $\mathcal{R}_+ \perp \mathcal{B}$ y $\mathcal{R}_- \perp \mathcal{B}$, siendo \mathcal{B} el espacio de estados ligados

- $\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_- = \mathcal{R}$ llamada condición de completitud asintótica que garantiza que a todo estado no ligado le corresponde tanto un estado in como uno out.

En resumen, el espacio de estados de partícula simple sin spin será la suma directa de dos espacios: el espacio de estados ligados \mathcal{B} y el espacio de estados con (ahora sí) asíntotas in y out \mathcal{R} . Así:

$$\mathcal{H} = \mathcal{B} \oplus \mathcal{R} \quad (2.10)$$

De forma que los estados que pertenecen a \mathcal{R} se denominan **estados de dispersión** o *scattering* del hamiltoniano H . Notar que la factorización del espacio \mathcal{H} en estos términos depende del hamiltoniano considerado.

También puede demostrarse [8] que los operadores de Møller son isométricos, o sea conservan la norma, es decir:

$$\|\Omega_{\pm}|\psi\rangle\|^2 = \langle\Omega_{\pm}\psi|\Omega_{\pm}\psi\rangle = \langle\psi|\Omega_{\pm}^{\dagger}\Omega_{\pm}\psi\rangle = \|\psi\|^2 \quad (2.11)$$

De lo que se concluye que:

$$\Omega_{\pm}^{\dagger}\Omega_{\pm} = \mathbf{1} \quad (2.12)$$

Siendo $\mathbf{1}$ el operador identidad en \mathcal{H} . Pero, en general, $\Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^{\dagger} \neq \mathbf{1}$. En que caso de que esta última igualdad también se cumpla, se dice que los operadores son unitarios.

A partir de las definiciones de los estados asintóticos, haciendo uso de la ecuación de Schrödinger y considerando (2.12), se concluye que:

$$H\Omega_{\pm} = \Omega_{\pm}H_0 \iff H_0\Omega_{\pm}^{\dagger} = \Omega_{\pm}^{\dagger}H \quad (2.13)$$

Llamada relación de entrelazamiento. Con ella se deduce que, si $|E\rangle$ es un autovector de H_0 con autovalor $E > 0$, entonces:

$$H\Omega_{\pm}|E\rangle = \Omega_{\pm}H_0|E\rangle = E\Omega_{\pm}|E\rangle$$

Con lo cual, todo autovalor de H_0 será autovalor de H pero no viceversa. Así, el hamiltoniano completo tendrá, de mínima, la recta real positiva en su espectro. Eventualmente también otros autovalores correspondientes a estados ligados. Si $E < 0$ es un autovalor, ahora de H , entonces, usando :

$$H_0\Omega_{\pm}^{\dagger}|E\rangle = \Omega_{\pm}^{\dagger}H|E\rangle = E\Omega_{\pm}^{\dagger}|E\rangle$$

Dado que $E < 0$ no pertenece al espectro de H_0 , entonces:

$$\Omega_{\pm}^{\dagger}|E\rangle = 0 \implies \Omega_{\pm}^{\dagger}\mathcal{B} = \mathbf{0} \quad (2.14)$$

Así, el operador $\Omega_{\pm}^{\dagger} |E\rangle$ aniquila si se aplica sobre un estado ligado y (2.14) es una demostración más de que si hay estados ligados, los operadores de Møller no son unitarios.

En el caso que H no admita estados ligados, H_0 y H comparten espectro y $\mathcal{H} = \mathcal{R}$. En estas condiciones, los operadores de Møller son unitarios cumpliendo $\Omega_{\pm}^{\dagger} \Omega_{\pm} = \Omega_{\pm} \Omega_{\pm}^{\dagger} = \mathbf{1}$.

2.1.2 Operador S

Habiendo hecho estas definiciones, se puede dar una descripción más clara del problema de dispersión. Este se entiende como un sistema que, en el pasado lejano, está en el estado $U^0(t) |\psi_{in}\rangle$, previo a la interacción, y muy posteriormente estará en un cierto estado $U^0(t) |\psi_{out}\rangle$.

Como se dijo antes, todo estado de dispersión tendrá ambos estados asintóticos (in y out) por lo cual, para un dado estado $|\psi\rangle \in \mathcal{R}$, $\exists |\psi_{in}\rangle \wedge |\psi_{out}\rangle$ tal que:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \Omega_+ |\psi_{in}\rangle \\ |\psi\rangle &= \Omega_- |\psi_{out}\rangle \end{aligned}$$

Y, usando (2.12), puede definirse un nuevo operador, el operador de dispersión o *scattering* S de forma que [7]:

$$\begin{aligned} S &= \Omega_-^{\dagger} \Omega_+ \\ |\psi_{out}\rangle &= S |\psi_{in}\rangle \end{aligned} \tag{2.15}$$

O sea que la aplicación del operador S a un estado asintótico in da el estado asintótico out que resultará de la interacción, sin que aparezca el estado intermedio $|\psi\rangle$.

También, los elementos de matriz de este operador darán la probabilidad de que la interacción inicialmente en un estado asintótico $|\psi_{in}\rangle$ resulte en un estado asintótico $|\psi'_{out}\rangle$ arbitrario. Esa probabilidad vendrá dada por, a $t = 0$, aunque este tiempo es arbitrario y vale para cualquier tiempo, la siguiente amplitud:

$$|\langle \psi'_{out} | \psi_{out} \rangle|^2 = |\langle \psi'_{out} | S | \psi_{in} \rangle|^2 \tag{2.16}$$

Ya que $\Omega_+ : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{R}$ y $\Omega_-^{\dagger} : \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{H}$, la composición de estos, dada en (2.15), implica que $S : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, al mismo tiempo, que los operadores de Møller sean isométricos, produce que S sea isométrico por su propia definición. Estas dos condiciones

juntas hacen que S sea unitario. Y, en consecuencia, para cada estado $|\psi_{in}\rangle, \exists! |\psi_{out}\rangle$ dado por (2.15) y viceversa.

También, para un proceso que inicia en un estado $|\psi_{in}\rangle$, la energía media inicial será:

$$\langle \psi_{in} | H_0 | \psi_{in} \rangle$$

Si sale del proceso de dispersión con un estado out dado por (2.15), la energía media final será:

$$\langle \psi_{out} | H_0 | \psi_{out} \rangle = \langle \psi_{in} | S^\dagger H_0 S | \psi_{in} \rangle = \langle \psi_{in} | H_0 | \psi_{in} \rangle$$

La última igualdad resulta de (2.13) y la definición de S . Resultando en que la energía de entrada y salida son iguales, por lo que se tiene conservación de la energía en el proceso de dispersión, de ahí dispersión elástica.

2.2 Funciones de Green

Otro aspecto clave para describir un sistema de scattering son los operadores de Green para los operadores H_0 y H , definidos por las siguientes ecuaciones [8]:

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) G^\pm(t) &= \mathbf{1} \delta(t) \\ \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \mathcal{G}^\pm(t) &= \mathbf{1} \delta(t) \end{aligned} \tag{2.17}$$

Con las condiciones iniciales:

$$\begin{aligned} G^+(t) = \mathcal{G}^+(t) &= 0 \quad t < 0 \\ G^-(t) = \mathcal{G}^-(t) &= 0 \quad t > 0 \end{aligned}$$

Donde $\delta(t)$ es la delta de Dirac, G^\pm serán los operadores de Green retardados y avanzados, respectivamente, del sistema libre, caracterizado por H_0 y lo propio con \mathcal{G}^\pm pero para el sistema completo, caracterizado por H . A saber:

$$\begin{aligned} G^+(t) &= \begin{cases} -ie^{-iH_0 t} & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases} \\ G^-(t) &= \begin{cases} 0 & t > 0 \\ ie^{-iH_0 t} & t < 0 \end{cases} \end{aligned} \tag{2.18}$$

$$\mathcal{G}^+(t) = \begin{cases} -ie^{-iHt} & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases} \quad (2.19)$$

$$\mathcal{G}^-(t) = \begin{cases} 0 & t > 0 \\ ie^{-iHt} & t < 0 \end{cases}$$

De manera que los estados asintota también pueden definirse como:

$$|\psi_{in}(t)\rangle = \lim_{t' \rightarrow -\infty} iG^+(t-t') |\psi(t')\rangle$$

$$|\psi_{out}(t)\rangle = \lim_{t' \rightarrow \infty} -iG^-(t-t') |\psi(t')\rangle \quad (2.20)$$

Y los operadores de Møller en términos de operadores de Green serán:

$$\Omega_+ = \lim_{t \rightarrow -\infty} \mathcal{G}^+(-t)G^-(t)$$

$$\Omega_- = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{G}^-(-t)G^+(t) \quad (2.21)$$

De modo que [8]:

$$|\psi(t)\rangle = \Omega_+ |\psi_{in}(t)\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \Omega_- |\psi_{out}(t)\rangle \quad (2.22)$$

O, lo que es equivalente:

$$|\psi_{out}(t)\rangle = S |\psi_{in}(t)\rangle \quad (2.23)$$

$$|\psi_{in}(t)\rangle = S^\dagger |\psi_{out}(t)\rangle \quad (2.24)$$

Las ecuaciones en (2.22) permiten obtener el estado de dispersión, ahora para cualquier tiempo, en función de sus estados asintóticos, en principio, conocidos.

2.2.1 Operadores de Green en función de la energía

Al considerar la transformada de Fourier de los operadores de Green se obtiene un operador dependiente de la energía:

$$G^\pm(E) = \int_{-\infty}^{\infty} G^\pm(t) e^{iEt} dt$$

$$\mathcal{G}^\pm(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{G}^\pm(t) e^{iEt} dt \quad (2.25)$$

Esto nos permitirá pasar de magnitudes dependientes del tiempo a un formalismo estacionario matemáticamente “más sencillo”.

En principio, por la naturaleza oscilatoria de los propagadores, esas integrales no están definidas. Por esto, se introduce un factor de convergencia $e^{-\epsilon t}$, para las integrales de los propagadores retardados y $e^{\epsilon t}$ para las integrales de los avanzados, con $\epsilon > 0$ [8]. Luego de obtener las soluciones, se hace tender el factor de convergencia a uno, esto ocurre cuando $\epsilon \rightarrow 0$.

Así, las soluciones de (2.25) serán:

$$\begin{aligned} G^+(E) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E + \epsilon i - H_0} \\ \mathcal{G}^+(E) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E + \epsilon i - H} \end{aligned} \quad (2.26)$$

y

$$\begin{aligned} G^-(E) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E - \epsilon i - H_0} \\ \mathcal{G}^-(E) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E - \epsilon i - H} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Es conveniente considerar la variable E como compleja, incorporando en ella el término ϵi , y definir los siguientes operadores:

$$\begin{aligned} G(E) &= \frac{1}{E - H_0} \quad E \in \mathbf{C} \\ \mathcal{G}(E) &= \frac{1}{E - H} \end{aligned} \quad (2.28)$$

De manera que tomar los límites cuando $\epsilon \rightarrow 0$ de (2.26) y (2.27) es equivalente a tomar los límites de los operadores en (2.28) cuando la parte imaginaria de E , $\text{Im}(E)$, tiende a cero por encima o por debajo de la recta real. O sea:

$$\begin{aligned} \lim_{\text{Im}(E) \rightarrow 0^+} G(E) &= G^+(E) \\ \lim_{\text{Im}(E) \rightarrow 0^-} G(E) &= G^-(E) \\ \lim_{\text{Im}(E) \rightarrow 0^+} \mathcal{G}(E) &= \mathcal{G}^+(E) \\ \lim_{\text{Im}(E) \rightarrow 0^-} \mathcal{G}(E) &= \mathcal{G}^-(E) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Los operadores definidos en (2.28) son llamados los *resolventes* de los hamiltonianos H_0 y H , respectivamente. Se puede ver, a partir de su forma funcional, que las singularidades de los mismos determinan el espectro de los hamiltonianos.

Dado que el espectro de H_0 son los reales positivos y no tiene otros autovalores, $G(E)$ será analítico en todo el plano menos en la recta real positiva, donde tendrá un corte de rama.

En cuanto a $\mathcal{G}(E)$, ya se dijo que, además del continuo positivo, podría tener otras singularidades correspondientes a estados ligados y, además, podría tener otras tantas singularidades relacionadas con estados que se verán más adelante.

2.3 Estados de dispersión estacionarios

Hasta acá no se trató el caso de los autovectores del hamiltoniano. En cuanto a los estados de scattering, siempre se habló de estados $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, es decir, normalizables y cuya evolución temporal estaba regida por el hamiltoniano H o H_0 , pero sin ser autovectores de los mismos.

Se verán en esta sección los **estados de dispersión estacionarios**, que autovectores impropios de los hamiltonianos y cómo entran en juego en la base del espacio de Hilbert, sin pertenecer a él [7].

Partiendo de la transformada de Fourier de los estados de dispersión [8]:

$$\begin{aligned} |\psi(E)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt} |\psi(t)\rangle dt \\ |\psi_{in,out}(E)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt} |\psi_{in,out}(t)\rangle dt \end{aligned} \quad (2.30)$$

Si uno introduce estas transformadas en las ecuaciones de Schrödinger (2.4) y (2.5), se deduce que (ver apéndice A.1):

$$\begin{aligned} H |\psi(E)\rangle &= E |\psi(E)\rangle \\ H_0 |\psi_{in,out}(E)\rangle &= E |\psi_{in,out}(E)\rangle \end{aligned} \quad (2.31)$$

Obteniendo así autovectores del hamiltoniano completo y libre, respectivamente, con mismo autovalor. Aunque estos estados no cumplen la condición (2.6) (ver apéndice en A.1), son denominados estados de dispersión estacionarios.

Ahora sí, con todo esto, se definen los estados de mayor interés:

$$\begin{aligned} |\psi^+(E)\rangle &= \Omega_+ |\psi_{in}(E)\rangle \\ |\psi^-(E)\rangle &= \Omega_- |\psi_{out}(E)\rangle \end{aligned} \quad (2.32)$$

Con estos estados definidos, puede demostrarse (ver apéndice A.1):

$$|\psi^+(E)\rangle = |\psi_{in}(E)\rangle + G^+(E)V|\psi^+(E)\rangle = |\psi_{in}(E)\rangle + \mathcal{G}^+(E)V|\psi_{in}(E)\rangle \quad (2.33)$$

$$|\psi^-(E)\rangle = |\psi_{out}(E)\rangle + G^-(E)V|\psi^-(E)\rangle = |\psi_{out}(E)\rangle + \mathcal{G}^-(E)V|\psi_{out}(E)\rangle \quad (2.34)$$

Estas últimas ecuaciones son llamadas **ecuaciones de Lippmann-Schwinger**. El estado en (2.33) representa un autoestado de energía del hamiltoniano H con un estado asintótico in $|\psi_{in}(E)\rangle$, conocido a priori, en el cual el sistema fue inicialmente preparado, evolucionando según el hamiltoniano completo. También tendrá un estado asintótico out, ya que se tiene completitud asintótica, dado por $S|\psi_{in}(E)\rangle$, pero este no es conocido a priori y será producto del proceso de dispersión.

Inverso es el caso de (2.34), que sería un autoestado de energía con estado asintótico in no preparado, dado por $S^\dagger|\psi_{out}(E)\rangle$, pero con un estado asintótico out $|\psi_{out}(E)\rangle$ conocido a priori.

Sólo se considerarán de interés los estados dados en (2.33), dado que, experimentalmente, son los realizables. A fines teóricos son equivalentes.

Estos estados no son normalizables y cumplen la condición de ortonormalidad correspondiente a estados del continuo (ver apéndice B.1).

También están degenerados, por lo que no basta el número cuántico E para determinarlos inequívocamente. Para etiquetarlos correctamente vamos a considerar el conjunto completo de observables que conmutan $\{K_x, K_y, K_z\}$ siendo $\mathbf{K} = \mathbf{P}/\hbar$ el operador número de onda (con las unidades elegidas al principio $\mathbf{K} = \mathbf{P}$), este conjunto resulta en la conocida base de ondas planas $\{|\mathbf{k}\rangle\}$ para el espacio \mathcal{H} tal que [7]:

$$\mathbf{1} = \int |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| d^3k \quad (2.35)$$

Como $H_0 = \frac{\mathbf{K}^2}{2m}$ conmuta con \mathbf{K} , todo vector $|\mathbf{k}\rangle$ es también autovector de H_0 con energía $E = \frac{|\mathbf{k}|^2}{2m}$ por lo cual se puede elegir $\{|\psi_{in}(E)\rangle\} = \{|\mathbf{k}\rangle\}$. Entonces, la primera ecuación de (2.32) para este caso será:

$$|\mathbf{k}+\rangle = \Omega_+ |\mathbf{k}\rangle \quad (2.36)$$

que será autovector del hamiltoniano **completo** con energía E correspondiente a la onda plana $|\mathbf{k}\rangle$ y el conjunto de estos estados de dispersión estacionarios $\{|\mathbf{k}+\rangle\}$ es “base” de \mathcal{R} dado que también cumplen la condición de normalización para estados del continuo (ver en apéndice B.1). Como se había dicho antes, \mathcal{B} es el generado por

los estados ligados $|n\rangle$ de H , de manera que una nueva base del espacio $\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}$ en términos estados de dispersión y estados ligados de H será:

$$\mathbf{1} = \int |\mathbf{k}+\rangle\langle\mathbf{k}+| d^3k + \sum_n |n\rangle\langle n| \quad (2.37)$$

Notar que los estados $|\mathbf{k}+\rangle$ “heredan” la etiqueta \mathbf{k} de la onda plana de la cual proceden a través de la relación (2.36) pero no son autovectores de \mathbf{K} dado que, en general, $[\mathbf{K}, H] \neq 0$

Otras bases de interés son las llamadas representaciones de momento angular. Dado que tanto el conjunto de observables $\{H_0, \mathbf{L}^2, L_z\}$ como $\{H, \mathbf{L}^2, L_z\}$ son conjuntos completos de observables que conmutan, sus respectivos autovectores comunes constituirán una base para \mathcal{H} . A saber:

$$\begin{aligned} \{H_0, \mathbf{L}^2, L_z\} &\longleftrightarrow \{|E, l, m\rangle\} \\ \{H, \mathbf{L}^2, L_z\} &\longleftrightarrow \{|E_n, l, m\rangle, |E, l, m+\rangle = \Omega_+ |E, l, m\rangle\} \end{aligned} \quad (2.38)$$

De forma que:

$$\mathbf{1} = \int_0^\infty dE \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l |E, l, m\rangle\langle E, l, m| \quad (2.39)$$

$$\mathbf{1} = \int_0^\infty dE \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l |E, l, m+\rangle\langle E, l, m+| + \sum_{n,l,m} |E_n, l, m\rangle\langle E_n, l, m| \quad (2.40)$$

La integral en (2.40) inetgral sobre estados de dispersión estacionarios (con energía positiva) que a su vez son autovectores de los momentos angulares y la suma del segundo término de (2.40) corresponde a estados ligados que también son autovectores de los momentos angulares. Estas bases serán cruciales en la sección 2.4 de ondas parciales.

2.3.1 Amplitud de scattering

Por (2.26), aplicando el operador de Green libre a la identidad en (2.35):

$$G^+(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \frac{|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|}{E - E_k + \epsilon i} d^3k \quad (2.41)$$

Donde E_0 es la energía “física” real, k es el módulo del momento, E_k es la energía correspondiente al momento con módulo k , es decir, $E_k = \frac{k^2}{2m}$ (esta aparece por ser $|\mathbf{k}\rangle$ autoestado de H_0).

Con esto, se puede obtener la función de Green, es decir, los elementos de matrix del operador en representación coordenada [8]:

$$\langle \mathbf{r} | G^+(E) | \mathbf{r}' \rangle = G^+(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (2.42)$$

De manera que cuando $r \rightarrow \infty$, el comportamiento asintótico de la función de Green es:

$$G^+(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \longrightarrow -\frac{e^{ikr}}{r} \left(\frac{2\pi m}{k} \right)^{\frac{1}{2}} \langle k\hat{\mathbf{r}} | \mathbf{r}' \rangle \quad (2.43)$$

De forma que, a grandes distancias, sólo contiene ondas esféricas salientes.

Dado que los estados estacionarios satisfacen la ecuación de Lippmann-Schwinger (2.33), también la satisfacen los $|\mathbf{k}+\rangle$, ya que son un caso particular de estos y en este caso quedaría:

$$|\mathbf{k}+\rangle = |\mathbf{k}\rangle + G^+(E)V|\mathbf{k}+\rangle \quad (2.44)$$

Así, pasando a representación coordenada y teniendo en cuenta (2.42), se puede obtener:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k}+\rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}\rangle + \int G^+(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}'') \langle \mathbf{r}'' | V | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \mathbf{k}+\rangle d^3r' d^3r'' \quad (2.45)$$

Entonces (2.43) y (2.45) implican que, cuando $r \rightarrow \infty$, esa función tenderá a:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k}+\rangle \longrightarrow \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr} A(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{r} \right) \quad (2.46)$$

Siendo $\mathbf{k}' = \frac{k}{r}\mathbf{r}$ y donde A es llamada **amplitud de dispersión** o *amplitud de scattering* y vale:

$$A(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} \int \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r}' \rangle \mathcal{V}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}+\rangle d^3r d^3r' \quad (2.47)$$

Con $\mathcal{V}(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 2m \langle \mathbf{r} | V | \mathbf{r}' \rangle$

De (2.46), se puede ver que la función de onda del estado de dispersión, $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k}+\rangle$, a grandes distancias, difiere de la onda plana libre inicial $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k}\rangle$ en una onda esférica modulada por la amplitud de dispersión.

2.4 Ondas parciales

El uso de potenciales centrales permite la expansión de la mayoría de las magnitudes en la base (2.39), lo que será la esencia de lo que se llamará desarrollo en ondas parciales.

En representación coordenada, la función de onda para cualquier estado autovector común de (2.38) puede factorizarse en la forma [9]:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{u_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (2.48)$$

Con los armónicos satisfaciendo (1.8) y siendo $u(r)$ la función solución de la ecuación radial:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + 2mV(r) \right] u_l(r) = k^2 u_l(r) \quad (2.49)$$

Con la relación de dispersión:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.50)$$

2.4.1 Funciones radiales libres

Para el caso de los elementos de la base en (2.35) expandidos en la base (2.39) se tiene [7]:

$$|\mathbf{k}\rangle = \int_0^\infty dE \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \langle E, l, m | \mathbf{k} \rangle |E, l, m\rangle \quad (2.51)$$

Este desarrollo en representación coordenada es (para ver el valor de los coeficientes ver en apéndice (B.9) y (B.10)):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle &= \left(\frac{2mk}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} (kr)^{-1} \sum_{lm} Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) i^l \hat{j}_l(kr) \\ &= \left(\frac{2mk}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} (4\pi kr)^{-1} \sum_{l=0}^\infty (2l+1) i^l P_l(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \hat{j}_l(kr) \end{aligned} \quad (2.52)$$

Donde \hat{j}_l son las funciones esféricas de Riccati-Bessel que cumplen la ecuación de Schrödinger radial libre, o sea, sin potencial:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \hat{j}_l(kr) = k^2 \hat{j}_l(kr) \quad (2.53)$$

y, P_l los polinomios de Legendre. La ecuación (2.52) es la expansión de una onda plana en ondas parciales.

2.4.2 Funciones radiales de dispersión

Ahora, si se aplicase el operador de Møller Ω_+ a ambos lados de (2.52) [7]:

$$|\mathbf{k}+\rangle = \Omega_+ |\mathbf{k}\rangle = \int_0^\infty dE \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \langle E, l, m | \mathbf{k} \rangle |E, l, m+\rangle \quad (2.54)$$

De forma que en representación coordenada (ver en apéndice (B.11))[8]:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}+\rangle &= \left(\frac{2mk}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} (kr)^{-1} \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) i^l \psi_l^+(k, r) \\ &= \left(\frac{2mk}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} (4\pi kr)^{-1} \sum_{l=0}^\infty (2l+1) i^l P_l(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \psi_l^+(k, r) \end{aligned} \quad (2.55)$$

Estos coeficientes que dan la dependencia radial (además del coeficiente con r^{-1} inicial), son las **funciones de onda radiales de scattering estacionarias** ψ_l^+ y son los que contienen la información del potencial; son también llamadas *funciones de onda radiales físicas* y cumplen con la ecuación de Schrödinger radial:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + 2mV(r) \right] \psi_l^+(k, r) = k^2 \psi_l^+(k, r) \quad (2.56)$$

Con condiciones de contorno:

$$\psi_l^+(k, 0) = 0 \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \psi_l^+(k, r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2} e^{\frac{1}{2}\pi(l+1)i} (e^{-ikr} - e^{-i\pi l} S_l(k) e^{ikr}) \\ &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2} i^{l+1} (e^{-ikr} - (-1)^l S_l(k) e^{ikr}) \end{aligned} \quad (2.58)$$

El límite en (2.58) tiene una interpretación similar a la que se le dio a (2.46). En la región asintótica, o sea cuando $r \rightarrow \infty$, la función de onda física radial parcial de momento angular l tiene una contribución entrante, e^{-ikr} caracterizada solo por k y una contribución saliente e^{ikr} modulada por este nuevo coeficiente $S_l(k)$. Este, puede demostrarse que viene dado por [7]:

$$\langle E', l', m' | S | E, l, m \rangle = \delta(E - E') \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} S_l(k) \quad (2.59)$$

De (2.59), se deduce que el operador S es diagonal en la base de momento angular y que $S_l(k)$, formalmente $S(k(E))$ con $k = \sqrt{2mE}$, es el autovalor de S correspondiente al estado $|E, l, m\rangle$.

2.4.3 Corrimiento de fase

Siendo que S es unitario, sus autovalores cumplen $|S_l(k)| = 1$. A partir de esto se define una nueva magnitud, relevante más adelante para caracterizar resonancias en la sección 3.4, el corrimiento de fase o *phase shift* $\delta_l(k)$. Dado por [7] :

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad (2.60)$$

Si se comparan los comportamientos asintóticos de la función esférica de Bessel (radial de la libre) y de la radial de dispersión [8]:

$$\begin{aligned} \psi_l^+(k, r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\delta_l(k)} \sin(kr - \frac{1}{2}\pi l + \delta_l(k)) \\ \hat{j}_l(kr) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin(kr - \frac{1}{2}\pi l) \end{aligned} \quad (2.61)$$

Se puede ver que la única diferencia relevante (dado que el primer factor en el primer límite es simplemente una fase) en el comportamiento a grandes distancias entre la onda radial completa dispersada y la libre radial es una fase, dada por δ_l .

2.4.4 Sección eficaz

La sección eficaz cuántica en un proceso nuclear es una medida que describe la probabilidad de que ocurra una dada interacción [10], siendo la sección eficaz diferencial lo mismo pero, además, para una dada dirección de momento resultante. Vendrán definidas por [8]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \quad (2.62)$$

Usando el desarrollo en ondas parciales de A:

$$\sigma_T = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega_{\mathbf{k}'} = \sum_l \sigma_l = \sum_l 4\pi \frac{(2l+1)\sin^2(\delta_l(k))}{k^2} \quad (2.63)$$

Donde σ_l es la sección eficaz parcial.

Capítulo 3

Estados resonantes y completitud

En este capítulo se introduce el concepto de resonancia. Como paso previo, se necesitan definir las soluciones regulares e irregulares de la ecuación radial y la función de Jost. También, se analizará la relación entre los ceros de esta y la aparición de estados ligados y resonantes.

Al mismo tiempo, se desarrollan dos relaciones de completitud; la de Newton, compuesta por estados ligados y de dispersión convencionales, y se coteja con la de Berggren, que incluye estados resonantes. Al final, se estudia su uso como representación.

3.1 Soluciones regulares e irregulares de la ecuación radial

En esta sección se tratarán unas soluciones particulares de (2.49), caracterizadas por sus condiciones de borde [11].

3.1.1 Solución regular

La solución regular φ será la definida por la condición [11]:

$$\lim_{r \rightarrow 0} (2l + 1)!! r^{-l-1} \varphi_l(k, r) = 1 \quad (3.1)$$

Cerca del origen, φ se comportará como $\hat{j}_l(kr)$ (ver apéndice en A.2). También, será real para k^2 real y puede demostrarse que será una función entera ¹ de k , en su continuación al plano complejo [11].

¹Una función de variable compleja es entera cuando es analítica en todo el plano complejo.

Dado que la ecuación (2.56) tiene una dependencia en k sólo en forma cuadrática, φ tendrá simetrías del tipo [8]:

$$\begin{aligned}\varphi_l(-k, r) &= \varphi_l(k, r) \\ \varphi_l(k, r) &= \varphi_l^*(k^*, r)\end{aligned}\tag{3.2}$$

Simetría que quedará más clara en las próximas formas de expresar esta solución regular.

3.1.2 Solución irregular

Las soluciones irregulares vendrán definidas por la condición de contorno [11]:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} e^{\pm ikr} f_{l\pm}(k, r) = i^l \tag{3.3}$$

De forma que:

$$f_{l\pm}(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} i^l e^{\mp ikr} \tag{3.4}$$

De (3.4), se ve que la función f_{l+} a grandes distancias se comportará como una onda plana en r entrante y f_{l-} como una saliente.

Estas dos soluciones, f_{\pm} , forman un conjunto linealmente independiente [8], por lo cual su wronskiano es una constante independiente de r , y su valor para un dado r vale para todo r . Si se calcula cuando $r \rightarrow \infty$, entonces [11] :

$$W(f_{l+}(k, r), f_{l-}(k, r)) = 2ik \tag{3.5}$$

Ergo, cualquier solución de la ecuación radial (2.56) puede ponerse en términos de estas (para dado $k \neq 0$).

3.2 Función de Jost

Por lo anterior, se tendrá, en particular, a la solución regular como combinación lineal de las irregulares. Los coeficientes de su desarrollo dependerán de k y l como parámetro.

Para este fin, se definen [11]:

$$\mathcal{F}_{l\pm}(k) = k^l W(f_{l\pm}(k, r), \varphi_l(k, r)) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{(kr)^l f_{l\pm}(k, r)}{(2l-1)!!} \tag{3.6}$$

Estas son las **funciones de Jost**, que ocuparán la parte más importante de los coeficientes del desarrollo de φ expandida en las soluciones irregulares. De forma que:

$$\varphi_l(k, r) = \frac{i}{2k^{l+1}} (\mathcal{F}_{l-}(k) f_{l+}(k, r) - (-1)^l \mathcal{F}_{l+}(k) f_{l-}(k, r)) \quad (3.7)$$

Por las simetrías de las funciones irregulares y regulares la funciones de Jost también cumplirán:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{l-}(k) &= \mathcal{F}_{l+}(-k) \\ \mathcal{F}_{l-}(k) &= \mathcal{F}_{l+}^*(k^*) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Así, esta simetría da la libertad de definir la que será **la** función de Jost como:

$$\mathcal{F}_l(k) = \mathcal{F}_{l+}(k) \quad (3.9)$$

Y obtener $\mathcal{F}_{l-}(k)$ simplemente evaluando la anterior en $-k$ y así condensar notación.

Usando (3.4), se puede obtener el comportamiento de la solución regular a grandes distancias :

$$\varphi_l(k, r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} \frac{1}{2} i^{l+1} k^{-l-1} (\mathcal{F}_l(-k) e^{-ikr} - (-1)^l \mathcal{F}_l(k) e^{ikr}) \quad (3.10)$$

Si se multiplica $\varphi_l(k, r)$ por el factor $\frac{k^{l+1}}{\mathcal{F}_l(-k)}$, por (3.10), se obtiene una función que cumple (2.58) y, por (3.1), cumple (2.57). Esta función, entonces, cumplirá con las dos condiciones de borde que definen a la $\psi_l^+(k, r)$ y será solución de (2.56). Dado que las soluciones son únicas, no puede ser otra cosa que la propia $\psi_l^+(k, r)$. Así:

$$\psi_l^+(k, r) = \frac{k^{l+1} \varphi_l(k, r)}{\mathcal{F}_l(-k)} \quad (3.11)$$

Siendo:

$$S_l(k) = \frac{\mathcal{F}_l(k)}{\mathcal{F}_l(-k)} \quad (3.12)$$

Las regiones de analiticidad de la función de Jost varían con la forma del potencial. Para potenciales con cut-off (o sea, que se anulan más haya de cierta distancia), es *entera* para $k \in \mathbb{C}$ en su extensión analítica [7]. También:

$$\mathcal{F}_l(k) = \mathcal{F}_l^*(-k^*) \iff \mathcal{F}_l(-k) = \mathcal{F}_l^*(k^*) \quad (3.13)$$

3.2.1 Función de Green parcial

Otra función que será importante en las secciones 3.3 y 3.5 es la función de Green $\mathcal{G}_l^+(k, r, r')$ asociada a la ecuación de Schrödinger radial (2.56). Esta está definida por la ecuación [8]:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + 2mV(r) - k^2 \right] \mathcal{G}_l(k, r, r') = -\delta(r - r') \quad (3.14)$$

Con condiciones de contorno tales que sea regular en $r = 0$ y que contenga sólo contribuciones de ondas salientes a grandes distancias. La solución serán [8]:

$$\mathcal{G}_l(k, r, r') = \begin{cases} (-1)^{l+1} k^l \frac{\varphi_l(k, r) f_l(-k, r')}{\mathcal{F}_l(-k)} & r < r' \\ (-1)^{l+1} k^l \frac{\varphi_l(k, r') f_l(-k, r)}{\mathcal{F}_l(-k)} & r > r' \end{cases} \quad (3.15)$$

Esta se relaciona con el operador definido en (2.29) de siguiente manera:

$$\langle \mathbf{r} | \mathcal{G}^+(E) | \mathbf{r}' \rangle = \mathcal{G}^+(E, r, r') = 2m \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{r}}') r^{-1} r'^{-1} \mathcal{G}_l(k, r, r') \quad (3.16)$$

Básicamente, (3.15) son los coeficientes radiales de la expansión de los elementos de matriz del operador en representación coordenada.

3.2.2 Raíces de la función de Jost $\mathcal{F}_l(-k)$

Dado que esta función aparece en los denominadores de las expresiones que definen la función de Green parcial en (3.15) y los elementos S_l en (3.12), es necesario analizar los ceros de la misma para identificar posibles divergencias. A partir de acá consideraremos $k \in \mathbb{C}$ y la correspondiente extensión analítica de las magnitudes asociadas.

Consideremos k_n con $\text{Im}(k_n) > 0$, o sea, un k en el semiplano complejo superior, excluyendo la recta real, y que al mismo tiempo sea un cero de la función de Jost, de forma que $\mathcal{F}_l(-k_n) = 0$.

La función de Jost no puede anularse simultáneamente en k y $-k$, salvo eventualmente para $k = 0$, ya que produciría una $\varphi_l \equiv 0$, lo que violaría la condición (3.1) que las define. Y, aún más, particularmente si $k \in \mathbb{R}^+$, $\mathcal{F}_l(-k)$ no puede anularse, ya que implicaría, por (3.8), que $\mathcal{F}_l(k)$ también lo haga.

Por (3.7), entonces:

$$\varphi_l(k_n, r) = \frac{i}{2k_n^{l+1}} (-1)^{l+1} \mathcal{F}_l(k_n) f_{l-}(-k_n, r)$$

De forma que las soluciones regulares e irregulares ahora son proporcionales. Esto lleva a que la solución irregular ahora sea regular en el origen, dado que son proporcionales.

También, por ser φ_l proporcional a la irregular saliente:

$$\varphi_l(k_n, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{i}{2k_n^{l+1}} (-1)^{l+1} \mathcal{F}_l(k_n) e^{ik_n r} = \frac{i}{2k_n^{l+1}} (-1)^{l+1} \mathcal{F}_l(k_n) e^{i\text{Re}(k_n)r} e^{-\text{Im}(k_n)r} = 0 \quad (3.17)$$

Como se dijo, $\text{Im}(k_n) > 0$, por lo que la última exponencial de arriba cancela al otro factor llevando el límite a cero.

Con esto se tiene una función regular en el origen y que se va a cero exponencialmente a medida que aumenta r , con lo cual, será normalizable. Esto no es otra cosa que una función de onda radial de estado ligado [7, 8].

Dado que la energía, proporcional a k^2 , debe ser real para este caso, k_n no estará en cualquier parte del semiplano complejo sino en el eje imaginario positivo, tal que $k_n = |k_n|i$ y $E_n = \frac{-|k_n|^2}{2m} < 0$.

En resumen, los k que sean ceros de \mathcal{F}_{l-} en el semiplano complejo superior serán los correspondientes a estados ligados y estarán en el eje imaginario. Y no habrá más raíces que estas en el semiplano superior.

Puede demostrarse que, para los potenciales definidos en (2.1), la cantidad de estados ligados es finita y que existe un l máximo a partir del cual el potencial ya no admite estados ligados [8].

También, que estos ceros son simples, por lo que producirán polos simples en S_l y \mathcal{G}_l . Como se dijo antes, \mathcal{F}_l es entera en k si se extiende analíticamente por lo que las correspondientes extensiones de S_l y \mathcal{G}_l serán meromórficas ². A partir de esto, se tratarán indistintamente ceros de la función de Jost

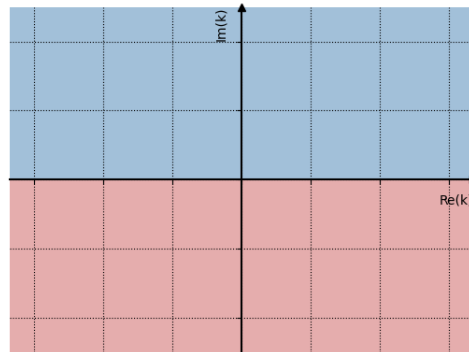


Figura 3.1: Plano complejo k

²Una función f es meromórfica si es analítica en un dominio D del plano complejo excepto, eventualmente, por polos en D .

o polos de S_l y \mathcal{G}_l^+ .

Algo muy distinto pasa con las raíces en el plano complejo inferior. Para un k ahí, implica que $\text{Im}(k) < 0$. Con la misma lógica se puede llegar otra vez a (3.17), pero ahora la última exponencial real que antes cancelaba el límite, ahora, por el signo de la parte imaginaria de k , es la que hace que ese límite diverja asintóticamente. Esta ya es la primera complicación que surge en cuánto al sentido físico de las funciones de onda resultantes de raíces en esta zona, ver figura 3.1.

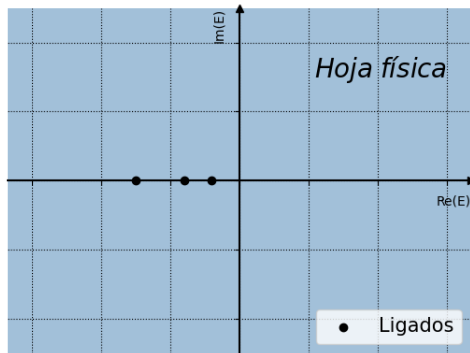


Figura 3.2: Esquema del plano físico de energías

Los ceros con k_m imaginario puro en el semiplano inferior, de la forma $k_m = -|k_m|i$, son los *estados virtuales* o *antiligados*. Estos generan una $E_m < 0$, como los estados ligados pero con una función de onda divergente.

Dada la relación cuadrática entre la energía y k , el semiplano superior en k se mapea en un plano completo en E y lo propio para el semiplano inferior. Estas hojas en E se denominan hoja física y no física, respectivamente, ver figuras (3.2),(3.3).

Un potencial siempre repulsivo, que no genera estados ligados, tampoco genera estados antiligados. Para un potencial que admite estados ligados, entre dos energías correspondientes a estados ligados habrá un número impar de energías correspondientes a estados antiligados y, entre el primer estado ligado y el límite $k = 0$, habrá una cantidad par de energías antiligadas para $l = 0$ e impar $l \geq 0$. Además, una energía ligada y una antiligada nunca coincidirán. o sea, $|k_n| \neq |k_m|$ [8].

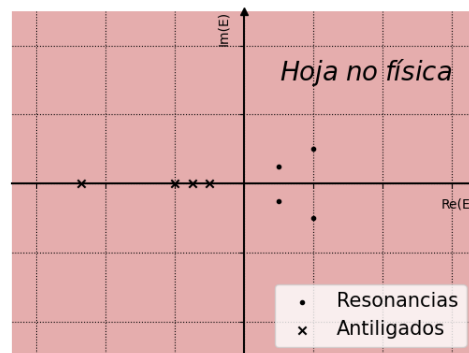


Figura 3.3: Esquema del plano no físico de energías

En el semiplano no físico sí habrá otras raíces además de las imaginarias puras. Si

hay una raíz en $k = \eta - \gamma i$ con $\eta, \gamma > 0$, es decir, cuarto cuadrante en el plano k , por (3.8), también hay una en $\tilde{k} = -k^* = -\eta - \gamma i$, tercer cuadrante. Los estados que corresponden a estas raíces son llamados *resonancias* y vienen de a pares. Estos estados serán estudiados en profundidad en la sección 3.4.

Desde ya, por su divergencia radial, las funciones de onda de resonancias y antiligados no pertenecen a L_2 y los kets asociados no pertenecen al espacio \mathcal{H} .

Para resumir, las distribución de ceros será, esquemáticamente, como se muestra en la Figura 3.4.

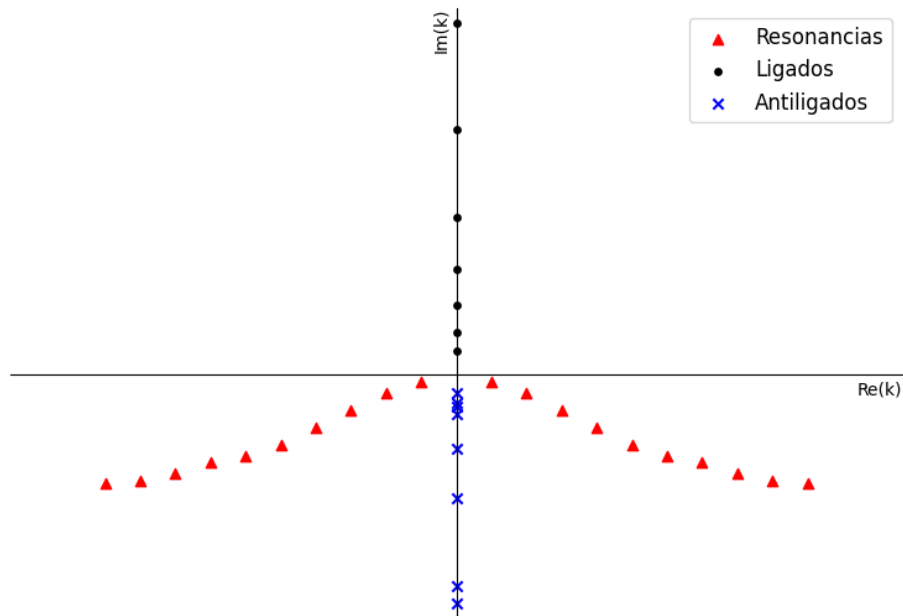


Figura 3.4: Esquema de la posición de los polos de $S_l(k)$ o ceros de Jost

Un punto especial es $k = 0$, el origen del plano, que resulta en energía cero. La función de Jost puede o no tener raíces ahí. En caso de $\mathcal{F}_{l-}(0) = 0$, si $l = 0$, el estado de energía cero asociado no será ligado y la raíz será simple; si $l \geq 1$, será ligado (con $E=0$) y el cero será doble [8].

3.3 Completitud

Toda esta información sobre los ceros de Jost es necesaria para llegar a la relación de completitud de esta sección que determina una base para el espacio de funciones radiales. Como se conocen las raíces de Jost, se conocen los polos de $\mathcal{G}_l(k, r, r')$.

Newton parte de considerar la integral [8]:

$$I(r) = \oint_{\Gamma} \int_0^{\infty} h(r') \mathcal{G}_l(k, r, r') dr' k dk \quad (3.18)$$

Donde h es una función cualquiera de $L_2(\mathbb{R}_0^+)$, o sea, cuadrado integrable y definida en los reales y el cero ya que es una función radial.

Para esclarecer, (3.18) es equivalente a integrar en el contorno Γ , del plano k , la función $\int_0^{\infty} h(r') \mathcal{G}_l(k, r, r') dr' k$.

Γ será un segmento de la recta real, interrumpido por un pequeño semicírculo de radio ε y cerrado por otro semicírculo de radio R en el semiplano superior, como puede verse en la Figura 3.5.

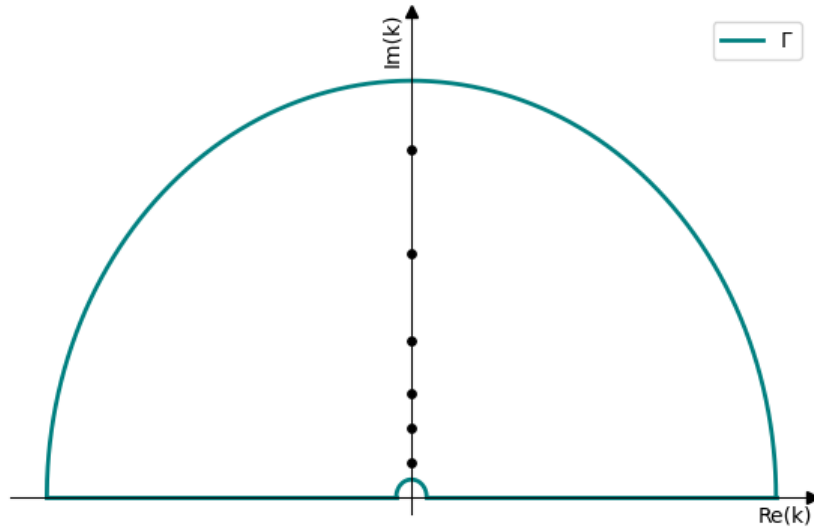


Figura 3.5: Gráfico esquemático del contorno de integración Γ en el plano complejo k , siendo los puntos negros estados ligados. La semicircunferencia mayor tenderá a infinito y la menor a cero.

Proponer esta integral es bastante ad hoc para obtener el resultado que sigue y es más una cuestión auxiliar. La evaluación de la misma está basada en hacer tender $\varepsilon \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$ (para incluir en su interior a todos los k ligados), calculando los aportes a la integral de cada tramo diferenciado de Γ y en el uso del teorema del residuo, dado que se tiene toda la información sobre los polos de \mathcal{G}_l . Evaluarla da como resultado [8]:

$$h(r) = \int_0^{\infty} dr' h(r') \left[\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k^2 \varphi_l(k, r) \varphi_l(k, r')}{|\mathcal{F}_l(-k)|^2} dk + \sum_n \frac{\varphi_{l,n}(r) \varphi_{l,n}(r')}{N_n^2} \right] \quad (3.19)$$

Siendo φ_n la solución regular de estado ligado correspondiente a $k_n = |k_n|i$ y $N_n = \int_0^\infty (\varphi_{l,n}(r))^2 dr$.

Lo que está entre corchetes en (3.19), por definición, tiene que ser una delta de Dirac. Tal que:

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{k^{2l+2} \varphi_l(k, r) \varphi_l(k, r')}{|\mathcal{F}_l(-k)|^2} dk + \sum_n \frac{\varphi_{l,n}(r) \varphi_{l,n}(r')}{N_n^2} = \delta(r - r') \quad (3.20)$$

Usando (3.11) y definiendo la función de onda física ligada como $\psi_{l,n}(r) = \frac{\varphi_{l,n}(r)}{N_n}$ queda:

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \psi_l^+(k, r) \psi_l^{+*}(k, r') dk + \sum_n \psi_{l,n}(r) \psi_{l,n}^*(r') = \delta(r - r') \quad (3.21)$$

Las funciones de dispersión aparecen por tener a la recta real (continuo) en el contorno y los estados ligados aparecen como residuo de los polos.

Las funciones en (3.21) están normalizados de forma que:

$$\int_0^\infty \psi_{ln'}^*(r) \psi_{ln}(r) = \delta_{n'n} \quad (3.22)$$

$$\int_0^\infty \psi_l^{+*}(k', r) \psi_l^+(k, r) = \frac{\pi}{2} \delta(k' - k) \quad (3.23)$$

Con las ligadas siguiendo la normalización para autovectores discretos y las de dispersión siguen la correspondiente a autovectores generalizados (ver apéndice B).

La relación en (3.21) es muy importante, ya que prueba que las funciones radiales correspondientes a estados ligados y de scattering son base para $L_2(\mathbb{R}^+)$.

3.4 Resonancias

En física nuclear, las resonancias nucleares juegan un papel crucial en la interacción entre partículas y núcleos atómicos. Estas resonancias aparecen cuando la partícula incidente, como un neutrón, tiene un k en el semiplano inferior pero no imaginario puro que es cero de Jost [14]. Esto resulta en una energía compleja.

El primero en dar significado físico a estos estados fue Gamow [15], al necesitar introducir energías complejas en su modelo del decaimiento alfa. Por eso, también, estos estados son llamados *vectores de Gamow*.

Matemáticamente, las resonancias se dividen en dos grupos. Las *resonancias de decaimiento*, con $k = \eta - \gamma i$ con $\eta, \gamma > 0$, o sea, cuarto cuadrante. Y las *resonancias de captura* con k en el tercer cuadrante $\tilde{k} = -k^* = -\eta - \gamma i$. Sus distribuciones son simétricas respecto del eje imaginario y, para potenciales de rango finito, **hay infinitas resonancias** [8].

Con energías conjugadas:

$$\begin{aligned} E &= E_0 - \frac{1}{2}\Gamma i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}((\eta^2 - \gamma^2) - 2\eta\gamma i) \\ \tilde{E} &= E_0 + \frac{1}{2}\Gamma i = \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}((\eta^2 - \gamma^2) + 2\eta\gamma i) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Así, la dependencia temporal de la función de onda, que viene dada por:

$$e^{-\frac{Et}{\hbar}} = e^{-\frac{E_0}{\hbar}it} e^{\pm \frac{\Gamma}{2\hbar}t} \quad (3.25)$$

Ya que son autovectores del hamiltoniano, con el + para captura y el - para decaimiento. De forma que **el módulo de resonancias de decaimiento caerá exponencialmente con el tiempo** (con una vida promedio de $\tau = \frac{2\hbar}{\Gamma}$) y para las de captura crecerá con el tiempo.

De esto se deriva la utilidad de las resonancias de decaimiento para modelizar estados radiactivos, por eso también son llamados estados metaestables o cuasiligados y son observables. Un núcleo resonante, por su capacidad de decaer, está enmarcado dentro de los denominados *sistemas cuánticos abiertos* [16], estos son sistemas en los cuales las correlaciones con el espectro continuo de energía son relevantes.

Al desarrollar el phase shift alrededor de una energía resonante, de la forma (3.24), para valores reales de E_R [7]:

$$\delta_l(E_R) \approx \delta_{\text{fondo}} - \arctan\left(\frac{\Gamma/2}{E_R - E_0}\right) = \delta_{\text{fondo}} + \delta_{\text{res}}$$

Donde δ_{fondo} depende de los demás polos de S pero no de la resonancia considerada, no es necesariamente una constante y su dependencia funcional es desconocida. El término con el arcotangente, δ_{res} , es la parte resonante del phase shift. De forma que el phase shift tendrá un salto de magnitud π , alrededor de $\pi/2$, cuando E_R pasa por E_0 .

Si este polo está lo suficientemente aislado de otros como para considerar que δ_{fondo} varía poco en la vecindad de este, entonces:

$$\left. \frac{d\delta_l}{dE} \right|_{E_R=E_0} \approx \frac{d\delta_{\text{res}}}{dE} \propto \frac{1}{\Gamma} \quad (3.26)$$

Así, mientras más chico Γ , más rápido y abrupto el salto. Las resonancias que cumplen $\Gamma \ll E_0$ son llamadas *resonancias angostas*.

Si en ese salto δ_l toma el valor $\frac{\pi}{2}$, la sección eficaz parcial σ_l , dada en (2.63), tendrá un pico, que es una de las magnitudes medibles. Es también demostrable matemáticamente [8] que a partir de un cierto k resonante, ese pico deja de ocurrir.

Con lo cual, a pesar de haber infinitas resonancias, no todas son experimentalmente observables. Si bien lo anterior da una idea de cuáles serían resonancias físicas y cuáles no, hay gran variedad de otros criterios sobre la interpretación de datos experimentales para identificarlas y caracterizarlas [14].

Otra definición de resonancia, equivalente a la de polo de S para potenciales con cut-off, la dio Siegert [17] en términos de condiciones de contorno para la ecuación radial (2.56). Una función de onda corresponderá a una resonancia cuando su parte radial cumpla (para $\psi_l^+(k, r) = \Phi(r)$, un dado l y $k = \eta - \gamma i$):

$$\begin{cases} \Phi(0) = 0 \\ \tilde{\Phi}(0) = 0 \\ \Phi(a)h_l^{+'}(ka) - \Phi'(a)h_l^+(ka) = 0 & r = a \\ \tilde{\Phi}(a)h_l^{-'}(\tilde{k}a) - \tilde{\Phi}'(a)h_l^-(\tilde{k}a) = 0 & r = a \end{cases} \quad (3.27)$$

Donde $\Phi(r)$ es la radial para una resonancia con $k = \eta - \gamma i$, $\tilde{\Phi}(r)$ para la de captura con $\tilde{k} = -k^* = -\eta - \gamma i$ y $h_l^\pm(kr)$ son las funciones de Riccati-Hankel. Notar que $h_l^{\pm'}$, las derivadas respecto de r de Riccati-Hankel y a es el valor de r a partir el cual el potencial se anula idénticamente. Esas condiciones también se cumplen para $r > a$ [18].

Que se cumplan las condiciones en (3.27) para ese dado k , implica que sea un polo de S , por eso se habla de definición equivalente.

Por la dependencia de la ecuación radial con k :

$$\tilde{\Phi}(r) = \Phi^*(r) \quad (3.28)$$

Dado que, para un dado k en el semiplano inferior:

$$h_l^\pm(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{\pm(kr - l\pi/2)i}$$

Esto último, junto con (3.28), indica que:

$$\begin{aligned}\Phi(r) &\longrightarrow e^{i\eta r} e^{\gamma r} \\ \tilde{\Phi}(r) &\longrightarrow e^{-i\eta r} e^{\gamma r}\end{aligned}\tag{3.29}$$

Tanto Φ como $\tilde{\Phi}$ oscilan moduladas por una exponencial creciente con r , cosa que ya se había dicho antes en la subsección 3.2.2 pero desde la óptica de la definición en términos de ceros de Jost. Por lo que si uno quisiera normalizar un vector de Gamow con la norma convencional para funciones radiales:

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = \int_0^\infty \Phi^*(r) \Phi(r) dr = \int_0^\infty \tilde{\Phi}(r) \Phi(r) dr$$

El integrando, por (3.29), diverge a infinito como $e^{2\gamma r}$, por lo que la integral también lo hará.

Por esto mismo, la interpretación del módulo de la función de onda como densidad de probabilidad queda descartada.

Se requiere, entonces, una técnica para normalizar estas funciones, lo que resultará en la redefinición del producto interno para estos estados. En realidad, el término adecuado sería la ampliación o generalización del producto, ya que estos estados no forman parte del espacio de Hilbert.

Estos pares conjugados de decaimiento y captura invitan a explorar el producto propuesto por Berggren [19]:

$$\langle \tilde{\Phi}_2 | \Phi_1 \rangle = \int_0^\infty \tilde{\Phi}_2^*(r) \Phi_1(r) dr\tag{3.30}$$

Y se verá que una resonancia de decaimiento es “ortogonal” (en el sentido de (3.30)) a una de captura, siempre que no pertenezcan al mismo par conjugado. Para esto último se tendrá:

$$\langle \tilde{\Phi} | \Phi \rangle = \int_0^\infty \tilde{\Phi}_2^*(r) \Phi(r) dr = \int_0^\infty \Phi^2(r) dr\tag{3.31}$$

El integrando en (3.31) tiende a $e^{2ikr} = e^{2ir(\eta - \gamma i)}$ en el infinito, que todavía aumenta exponencialmente con r pero también oscila. Por lo cual, para poder evaluar esta integral, habría que encontrar la forma de regularizar integrales de la forma:

$$\int_0^\infty e^{zr} dr \quad \wedge \quad \int_0^\infty r e^{zr} dr \quad z \in \mathbb{C}$$

A continuación se proveen dos métodos para este fin.

3.4.1 Regularización con factor exponencial

Este método de regularización, propuesto por Zel'dovich [20] para regularizar esas integrales impropias, consiste en agregar un factor de convergencia $e^{-\epsilon r^2}$, con $\epsilon > 0$, en el integrando y tomar el límite $\epsilon \rightarrow 0$. Lo que resulta en considerar las dos integrales:

$$I_n(z) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} I_n(z, \epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\epsilon r^2} r^n e^{zr} dr \quad n = 0, 1$$

Estas integrales convergen para $|\operatorname{Re}(z)| < |\operatorname{Im}(z)|$ a los valores finitos de $I_0(z) = -\frac{1}{z}$ y $I_1(z) = \frac{1}{z^2}$. Ahora, si $z = 2ik$, que es lo que se dijo antes, o sea, a lo que tendería un integrando de resonancias conjugadas [19]:

$$I_0(z) = -\frac{1}{2ik} \quad I_1(z) = -\frac{1}{4k^2}$$

Y el requisito para la convergencia anterior pasa a $\gamma < \eta$, las que cumplan esto serán *resonancias propias*.

En resumen, si ese factor hace converger una integral de una exponencial compleja, también hace converger una función que tiende a ella, por lo que hará converger (3.31)(propias).

Esto posteriormente es tomado y generalizado por Gyarmati [21] para factores de convergencia $e^{-\epsilon r^n}$ para $0 < n < \frac{\pi}{2\arctan(\frac{\gamma}{\eta})}$ con el que, para $n = 2$, se recupera $\gamma < \eta$.

3.4.2 Regularización por escalado complejo

Otra forma de regularización propuesta en [21] es el escalado complejo o *Complex scaling*. Consiste en extender r al plano complejo y usar el teorema de Cauchy (las exponenciales son enteras) en un contorno en este plano complejo r . Tal que:

$$\oint_C e^{2ikz} dz = 0 \quad , \quad \oint_C z e^{2ikz} dz = 0$$

Si el contorno C son dos segmentos del primer cuadrante unidos por un arco, se lo puede separar en tres partes: C_1 un segmento de la recta real, que va desde el origen hasta un valor R , C_3 otro segmento que parte del origen pero hasta el valor $Re^{i\theta}$, como se muestra en la figura 3.6.

Así, $\oint_C = \int_{C_1} + \int_{C_2} + \int_{C_3} = 0$ y al hacer tender $R \rightarrow \infty$ las integrales sobre C_2 se anulan, quedando $\int_{C_1} = -\int_{C_3}$ con C_1 y C_3 ahora devenidos en rayos del plano complejo. Con esto:

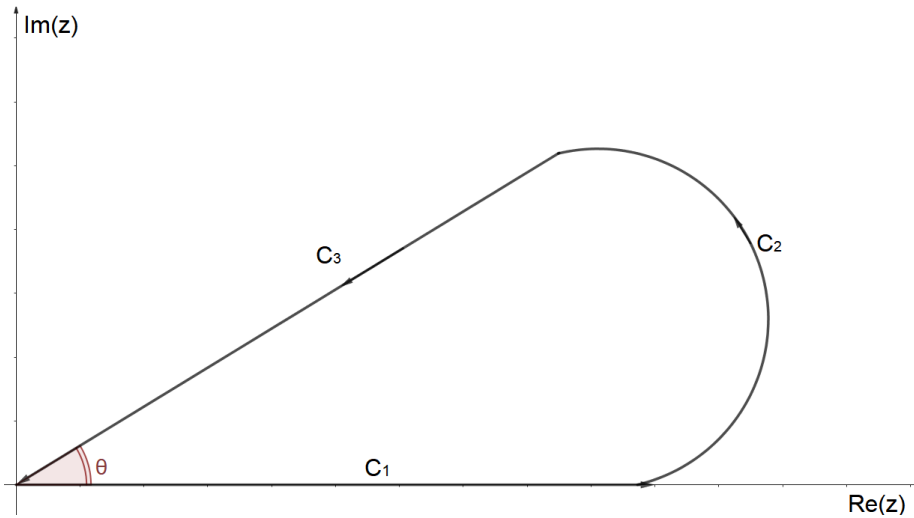


Figura 3.6: Esquema del contorno de integración para la rotación compleja

$$\hat{I}_0(k) = \int_0^\infty e^{2kir} dr = e^{\theta i} \int_0^\infty e^{2kire^{\theta i}} dr = -\frac{1}{2ik}$$

$$\hat{I}_1(k) = \int_0^\infty r e^{2kir} dr = e^{\theta i} \int_0^\infty r e^{2kire^{\theta i}} dr = -\frac{1}{4k^2}$$

Con esto se ve que convergen a los mismos valores que con el método anterior. Ahora, el requisito para la convergencia será $\arctan\left(\frac{\gamma}{\eta}\right) < \theta$ por lo que con este método también se podrían regularizar las resonancias impropias.

Considerado las condiciones de contorno para resonancias y que son soluciones a sus respectivas ecuaciones de Schrödinger, está demostrado que [19]:

$$(k_1^2 - k_2^2) \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\epsilon r^2} \tilde{\Phi}_2^*(r) \Phi_1(r) dr = 0 \quad (3.32)$$

Definiendo el producto interno para estados resonantes como el límite de esa integral:

$$\langle \tilde{\Phi}_2 | \Phi_1 \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\epsilon r^2} \tilde{\Phi}_2^*(r) \Phi_1(r) dr \quad (3.33)$$

Ya que, por (3.32), el producto se anula para resonancias con diferente k y dado que para un mismo k , por el uso del factor de convergencia, la integral ahora converge, se puede lograr $\langle \tilde{\Phi} | \Phi \rangle = 1$ y obtener un conjunto *biortogonal* tal que:

$$\langle \tilde{\Phi}_2 | \Phi_1 \rangle = \langle \Phi_2^* | \Phi_1 \rangle = \delta_{1,2} \quad (3.34)$$

3.5 Completitud de Berggren

En [19], Berggren generaliza el concepto de completitud de Newton, incluyendo estados resonantes en la base al deformar el contorno de integración usado por Newton en su derivación de (3.21).

Otra vez, se considera la integral en (3.18), solo que ahora el contorno Γ será reemplazado por un nuevo Γ' . Este también consistirá en una semicircunferencia en el semiplano superior, pero ahora cerrada, no por la recta real (o no solamente), sino por una curva L que encierre resonancias.

L será como se muestra en la figura 3.7. Simétrica respecto del origen, es decir, $k \in L \iff -k \in L$. Siendo L_+ su restricción a $\text{Re}(k) > 0$ y viceversa para L_- . También, si $k \in L \implies \arg(\pm k) < -\frac{\pi}{4}$, ya que por el método de normalización elegido, se deben evitar las resonancias impropias.

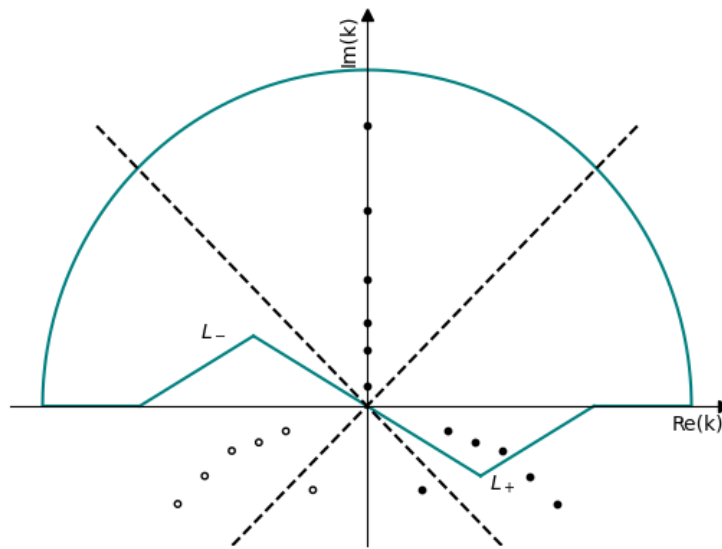


Figura 3.7: Esquema del contorno usado por Berggren

El aporte de la integral sobre la semicircunferencia será el mismo que en Newton, pero ahora los residuos, además de los estados ligados, harán aparecer las resonancias confinadas dentro de Γ' . Por la simetría de inversión de L , la integral sobre esa parte puede simplificarse como el doble de una integral sobre L_+ (se elige este por convención pero también podría ser L_- , matemáticamente es igual, pero dado que el número de onda es una magnitud positiva se usa L_+).

Así, se llega a [19]:

$$\sum_n \psi_{l,n}(r) \psi_{l,n}^*(r) + \sum_n \Phi_{l,n}(r) \tilde{\Phi}_{l,n}^*(r') + \frac{2}{\pi} \int_{L_+} \psi_l^+(k, r) \tilde{\psi}_l^{+*}(k, r') dk = \delta(r - r') \quad (3.35)$$

Donde k_n denotan polos, $\psi_{l,n}$ corresponden a estados ligados, $\Phi_{l,n}$ a las resonancias incluidas, siendo:

$$\begin{aligned} \Phi_{l,n}(r) &\equiv \tilde{\Phi}_{l,n}^*(r) \equiv \frac{\varphi_l(k_n, r)}{N_n} \\ N_n^2 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\epsilon r^2} (\varphi_l(k_n, r))^2 dr \end{aligned} \quad (3.36)$$

Y ψ_l^+ son las de (3.11) pero ahora con k complejo y perteneciente a L_+ , aunque, eventualmente, podrían ser reales dependiendo de como sea L . Usando (3.11):

$$\tilde{\psi}_l^+(k, r) = \psi_l^+(k^*, r) = \frac{(k^*)^{l+1} \varphi_l(k^*, r)}{\mathcal{F}_l(-k^*)} = \left(\frac{k^{l+1} \varphi_l(k, r)}{\mathcal{F}_l(k)} \right)^* \quad (3.37)$$

Para condensar notación, se pueden definir:

$$u_l(k, r) \equiv \sqrt{\frac{2}{\pi}} \psi_l^+(k, r) \quad , \quad \tilde{u}_l(k, r) \equiv \sqrt{\frac{2}{\pi}} \tilde{\psi}_l^+(k, r) \quad (3.38)$$

De forma que (3.35) puede expresarse como:

$$\sum_n \psi_{l,n}(r) \psi_{l,n}^*(r') + \sum_n \Phi_{l,n}(r) \tilde{\Phi}_{l,n}^*(r') + \int_{L_+} u_l(k, r) \tilde{u}_l^*(k, r') dk = \delta(r - r') \quad (3.39)$$

Esta nueva completitud modificada pone en pie de igualdad resonancias con estados ligados en tanto elementos de la base e introduce nuevos estados del continuo. Estos son estados de dispersión, con parte entrante y saliente, pero con energía compleja y, desde ya, siempre se habla de autovectores del hamiltoniano H .

Algo importante a remarcar es que las funciones expandidas por (3.40) deben decaer más rápido que cualquier exponencial o, a lo sumo, con comportamientos asintóticos del tipo e^{ikr} con k dentro del contorno de integración [22]. Con lo cuál, formalmente, no son una base para todo $L_2(\mathbb{R}^+)$, que sí lo es el conjunto de la funciones que componen (3.21).

En cuanto al espacio abstracto, si $|\Theta_{l,m,n}\rangle$ y $|\tilde{\Theta}_{l,m,n}\rangle$ son los kets correspondientes a las resonancias:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \Theta_{l,m,n} \rangle &= \frac{1}{r} \Phi_{l,n}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \\ \langle \mathbf{r} | \tilde{\Theta}_{l,m,n} \rangle &= \frac{1}{r} \tilde{\Phi}_{l,n}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)\end{aligned}\quad (3.40)$$

Claramente, las resonancias (como los estados ligados) también serán autovectores de \mathbf{L}^2 y L_z .

Para los estados del continuo, con kets $|\Theta_{\mathbf{k}}\rangle$ y $|\tilde{\Theta}_{\mathbf{k}}\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \Theta_{\mathbf{k}} \rangle &= (kr)^{-1} \sum_l \sum_m i^l u_l(k, r) Y_{l,m}(\theta, \phi) Y_{l,m}^*(\beta, \alpha) \\ \langle \mathbf{r} | \tilde{\Theta}_{\mathbf{k}} \rangle &= (k^*r)^{-1} \sum_l \sum_m i^l \tilde{u}_l(k, r) Y_{l,m}(\theta, \phi) Y_{l,m}^*(\beta, \alpha)\end{aligned}\quad (3.41)$$

Con β y α son los ángulos polar y acimutal, respectivamente, de \mathbf{k} . Igual que antes, estos nuevos estados de dispersión no son autovectores de L^2 y L_z sino del operador número de onda.

Con el producto interno definido antes, cumplen:

$$\begin{aligned}\langle \tilde{\Theta}_{l,m,n} | \Theta_{l',m',n'} \rangle &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{nn'} \\ \langle \tilde{\Theta}_{\mathbf{k}} | \Theta_{\mathbf{k}'} \rangle &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ H | \Theta_{l,m,n} \rangle &= E_{l,n} | \Theta_{l,m,n} \rangle \\ H | \tilde{\Theta}_{l,m,n} \rangle &= E_{l,n}^* | \tilde{\Theta}_{l,m,n} \rangle \\ H | \Theta_{\mathbf{k}} \rangle &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} | \Theta_{\mathbf{k}} \rangle \\ H | \tilde{\Theta}_{\mathbf{k}} \rangle &= \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m} | \tilde{\Theta}_{\mathbf{k}} \rangle\end{aligned}\quad (3.42)$$

Con $E_{l,n}$ definidas en (3.24). Todo esto deriva en la completitud pero ahora ya para el espacio de vectores de estado abstracto:

$$\sum_{nlm} |n, l, m\rangle \langle n, l, m| + \sum_{nlm} | \Theta_{l,m,n} \rangle \langle \tilde{\Theta}_{l,m,n} | + \int_{L_+} | \Theta_{\mathbf{k}} \rangle \langle \tilde{\Theta}_{\mathbf{k}} | dk = \mathbf{1} \quad (3.43)$$

Estos kets (salvo los ligados) no pertenecen formalmente al espacio \mathcal{H} , pero expanden estados que si lo hacen; similar a lo que ocurre con las ondas planas, por lo que serían kets generalizados. El marco matemático formal para ellos estará en el capítulo 4.

Con esta nueva relación, Berggren viene a ampliar una desarrollada años antes por Humblet y Rosenfeld [18] que fue la completitud de Mittag-Leffler, que en realidad

tampoco es tal dado que es sobre-completa (por esto el factor $\frac{1}{2}$ inicial). Esta “base” consiste también de funciones correspondientes a polos (a cualquiera, ligados, anti-ligados y resonancias de ambos tipos) pero sin la contribución del continuo, tal que [19]:

$$\frac{1}{2} \left(\sum_n \psi_{l,n}(r) \psi_{l,n}^*(r') + \sum_n \Phi_{l,n}(r) \tilde{\Phi}_{l,n}^*(r') \right) = \delta(r - r') \quad \text{si } r, r' < R \quad (3.44)$$

Sólo las funciones polo no forman un conjunto completo para todo r , por lo que su aplicación está limitada a representar funciones en un intervalo finito de r . Esto la hace poco útil para expandir funciones de largo rango, como, por ejemplo, una función de resonancia de otro sistema físico [23, 24].

Posteriormente generalizaron aún más estas “completeness relations” a partir de evaluar la integral en (3.18) en otros contornos [25, 26]. Por ejemplo, evaluarla en recorridos como en los de la figura 3.8, resulta en completitudes:

$$\frac{1}{2} \sum_{nlm} |n, l, m\rangle \langle n, l, m| + \frac{1}{2} \sum_{lm} \sum_{n=d,c} |\Theta_{l,m,n}\rangle \langle \tilde{\Theta}_{l,m,n}| + \frac{1}{2} \int_W |\Theta_{\mathbf{k}}\rangle \langle \Theta_{\mathbf{k}^*}| dk = \mathbf{1} \quad (3.45)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{nlm} |n, l, m\rangle \langle n, l, m| + \frac{1}{2} \sum_{lm} \sum_{n=d,c,a} |\Theta_{l,m,n}\rangle \langle \tilde{\Theta}_{l,m,n}| + \frac{1}{2} \int_U |\Theta_{\mathbf{k}}\rangle \langle \Theta_{\mathbf{k}^*}| dk = \mathbf{1} \quad (3.46)$$

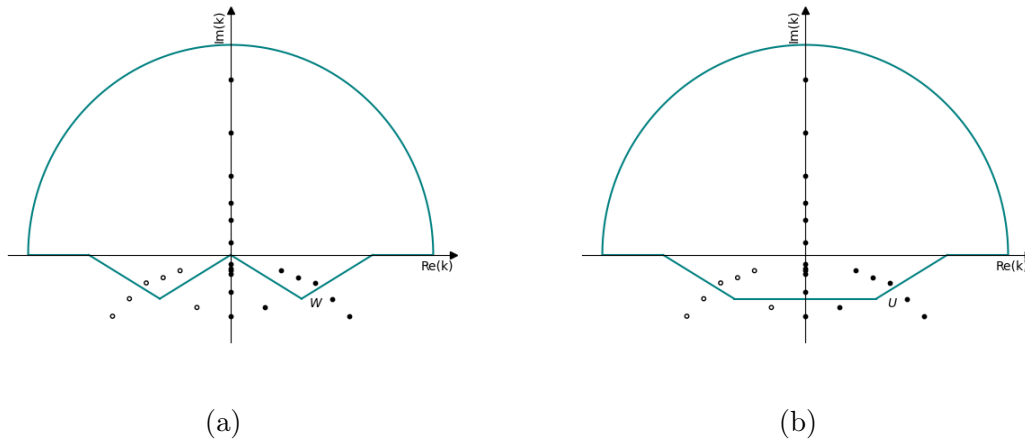


Figura 3.8: En (a), el contorno W que incluye resonancias de captura, de decaimiento y ligados, y en (b), el contorno U que incluye resonancias de captura, de decaimiento, ligados y antiligados

Donde d , c y a representan resonancias de decaimiento, de captura y antiligados, respectivamente. Básicamente se agregan más estados al conjunto generador y cambia el continuo.

Base	Expansión de $\mathcal{G}_l(k, r, r')$
Newton	$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\psi_l^+(k', r) \psi_l^{+*}(k', r') dk'}{k^2 - k'^2} + \sum_n \frac{\psi_{l,n}(r) \psi_{l,n}(r')}{k^2 + k_n^2}$
Mittag-Leffler	$\sum_n \frac{\psi_{l,n}(r) \psi_{l,n}(r')}{2k_n(k - k_n)} + \sum_n \frac{\Phi_{l,n}(r) \tilde{\Phi}_{l,n}^*(r')}{2k_n(k - k_n)}$
Berggren	$\frac{2}{\pi} \int_{L^+} \frac{\psi_l^+(k', r) \psi_l^{+*}(k', r') dk'}{k'(k - k')} + \sum_n \frac{\psi_{l,n}(r) \psi_{l,n}(r')}{k_n(k - k_n)} + \sum_n \frac{\Phi_{l,n}(r) \tilde{\Phi}_{l,n}^*(r')}{k_n(k - k_n)}$
W	$\frac{1}{\pi} \int_W \frac{\psi_l^+(k', r) \psi_l^{+*}(k', r') dk'}{k'(k - k')} + \sum_n \frac{\psi_{l,n}(r) \psi_{l,n}(r')}{2k_n(k - k_n)} + \sum_{n=d,c} \frac{\Phi_{l,n}(r) \tilde{\Phi}_{l,n}^*(r')}{2k_n(k - k_n)}$
U	$\frac{1}{\pi} \int_U \frac{\psi_l^+(k', r) \psi_l^{+*}(k', r') dk'}{k'(k - k')} + \sum_n \frac{\psi_{l,n}(r) \psi_{l,n}(r')}{2k_n(k - k_n)} + \sum_{n=d,c,a} \frac{\Phi_{l,n}(r) \tilde{\Phi}_{l,n}^*(r')}{2k_n(k - k_n)}$

Tabla 3.1

Como ejemplo de función expandida en las diferentes bases, en la tabla 3.1 se muestra el desarrollo de la función de Green parcial de (3.15) en ellas [25].

Todas estas son “bases” compuestas por estados de partícula simple y cuál elegir dependerá del sistema a describir y del estado que uno busque expandir.

3.6 Aplicación de la representación de Berggren

En general, se busca que la expansión sea lo más eficiente posible, en el sentido de buscar la base que con unos pocos estados discretos (resonancias o ligados) reproduzcan bien el estado del sistema físico estudiado, intentando que el aporte del continuo sea despreciable, aunque en general esto no es posible.

3.6.1 Una partícula

En [27] se usan estos estados de partícula simple correspondientes a un potencial del tipo (1.4), para diagonalizar otros hamiltonianos del mismo tipo pero con distintos parámetros para el potencial de Woods-Saxon. En este paper se analiza el caso del ^{209}Pb y se usan como representación estados de partícula simple correspondientes a un hamiltoniano H con un potencial con parámetros $V_{0ws} = 44,4 \text{ MeV}$ y $a = 0,7 \text{ fm}$. La base estará compuesta por un estado ligado ($1h_{11/2}$), una resonancia ($2h_{11/2}$) y estados del continuo [28], de forma que la base tendrá $3n + 2$ elementos; $3n$ estados de

dispersión, la resonancia y el ligado. Un esquema del contorno continuo y la ubicación de los estados se muestra en la figura (3.9). La integral en (3.39) se discretiza usando un número n de estados del continuo pertenecientes al contorno.

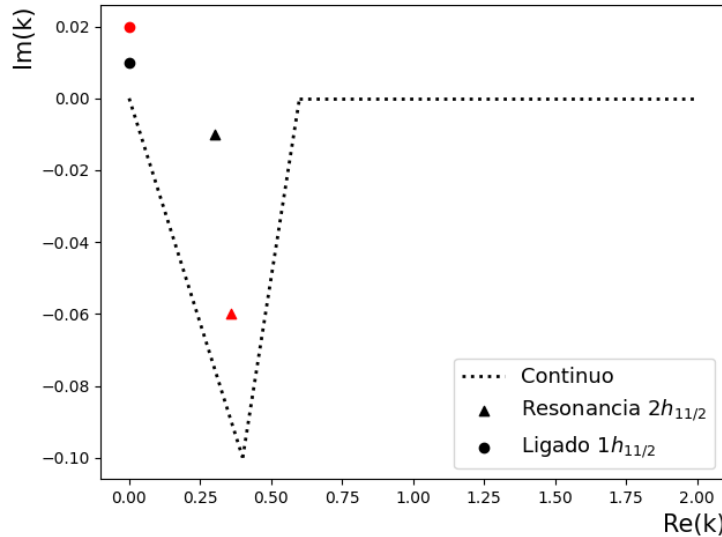


Figura 3.9: Esquema de la ubicación de los estados tratados en [27]. En rojo, los estados a expandir. En negro, los estados que conforman la base; ligado, resonancia y continuo

Con esa base se expanden los mismos estados discretos de la base, ahora $1h'_{11/2}$ y $2h'_{11/2}$, pero correspondientes a un hamiltoniano H' con parámetros $V_{0ws} = 40,4 \text{ MeV}$ y $a = 0,6 \text{ fm}$.

Usando el programa ANTI obtienen $1h'_{11/2} = -12,526 \text{ MeV}$ y $2h'_{11/2} = (4,321 - 0,321 i) \text{ MeV}$. A medida que aumentan los elementos de la base, la energía del estado expandido en la base converge a la obtenida numéricamente con ANTI (ver figura 3.10).

Con $n = 16$, ya se obtiene una base que expande adecuadamente los estados con bastante precisión. Notar que la convergencia para el estado ligado se da con menos elementos del continuo.

Otro caso interesante analizado en [27] es el uso de una base compuesta únicamente por estados del continuo de H , sin resonancias ni ligados. En este caso, se busca expandir el estado $4d_{5/2}$, que es una resonancia de los hamiltonianos H y H'' , este último con parámetros $V_{0ws} = 50,4 \text{ MeV}$ y $a = 0,7 \text{ fm}$. Para H , $4d_{5/2} = (7,336 - i 13,234) \text{ MeV}$ y, para H'' , $4d''_{5/2} = (2,496 - i 9,660) \text{ MeV}$. Se elige un contorno que incluya $4d''_{5/2}$ pero excluya $4d_{5/2}$ (resonancia de H). De esta forma, el estado $4d''_{5/2}$ es expandido solo con elementos del contorno continuo, ver figura 3.11. Se obtiene que con $n = 32$ es suficiente para un desarrollo muy preciso.

n	Bound state	Resonance
	(-14.960, 0.000)	(2.251, -0.026)
0	(-12.517, 0.001)	(4.405, -0.133)
2	(-12.527, 0.000)	(4.081, -0.275)
4	(-12.527, 0.000)	(4.237, -0.283)
8	(-12.525, 0.000)	(4.305, -0.314)
16	(-12.526, 0.000)	(4.319, -0.320)
32	(-12.526, 0.000)	(4.321, -0.321)
128	(-12.526, 0.000)	(4.321, -0.321)
ANTI	(-12.526, 0.000)	(4.321, -0.321)

Figura 3.10: Energías de los estados $1h'_{11/2}$ y $2h'_{11/2}$ en función del número de estados considerados más el resultado numérico obtenido con el programa ANTI. Tomado de [27]

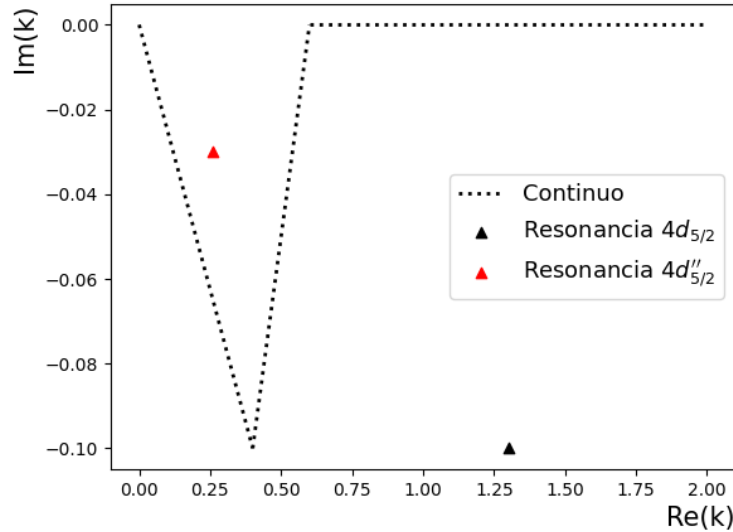


Figura 3.11: Esquema de la ubicación de los estados para el caso de expansión de resonancia con elementos del continuo. En rojo, los estados a expandir. En negro, los estados que conforman la base

3.6.2 Dos partículas

También, en [29, 30], se usa la base de Berggren pero ahora para expandir un estado de dos partículas. En particular, se usan los estados de partícula simple generados por el potencial del núcleo ^{78}Ni para expandir los estados de dos partículas del ^{80}Ni . Para este potencial se usan los parámetros $V_{0ws} = 40\text{MeV}$, $V_{0so} = 21,43\text{MeV}$, $r_0 = 1,27\text{fm}$ y $a_{ws} = a_{so} = 0,67\text{fm}$ y en la base se incluyen los estados correspondientes a las energías $\epsilon_{1d_{5/2}} = -0,8$, $\epsilon_{2s_{1/2}} = -0,284$, $\epsilon_{1d_{3/2}} = 1,325 - 0,479 i$, $\epsilon_{0h_{11/2}} = 3,296 - 0,013 i$, $\epsilon_{1f_{7/2}} = 3,937 - 1,796 i$ y $\epsilon_{0g_{7/2}} = 4,2 - 0,167 i$ (en MeV) más un

contorno continuo (discretizado), ver la figura 3.12).

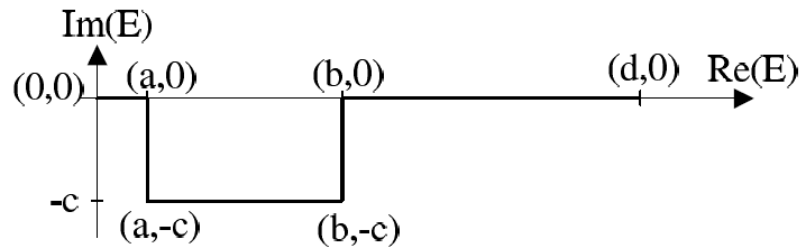


Figura 3.12: Esquema del contorno continuo usado en la base. Tomado de [29]

Los primeros cuatro estados correspondientes al ^{80}Ni tienen energías $E_0 = -3$ (fundamental), $E_1 = -0,653$, $E_2 = 1,972 - 0,399 i$, $E_3 = 3,923 - 1,051 i$ y $E_4 = 7,956 - 0,252 i$.

Como en la subsección anterior, en la tabla 3.13, se muestra la convergencia de la energía del desarrollo en función de la cantidad de estados del continuo utilizados, en este caso N_g . Con $N_g = 70$ ya se tiene una buena aproximación.

Puede verse que al usar sólo los estados discretos de la base ($N_g = 0$), la energía ligada del estado E_1 a desarrollar mantiene una parte imaginaria grande que se anula al incluir los elementos del continuo. La aparición espuria de una parte imaginaria en el desarrollo de estados ligados depende fuertemente de la cantidad de estados del continuo en el contorno, de forma que la “aproximación de polos” (usar sólo ligados y resonancias) no es buena para describir estados ligados o resonancias angostas, aunque podría serlo para resonancias anchas [30].

N_g	E_1	E_2	E_3	E_4
0	(-0.642, 0.012)	(2.158, 0.719)	(3.268, -0.883)	(7.931, -0.198)
35	(-0.654 17, 0)	(1.968 74, -0.392 35)	(3.924 20, -1.052 08)	(7.956 93, -0.252 36)
70	(-0.652 74, 0)	(1.969 88, -0.393 21)	(3.924 29, -1.051 59)	(7.956 91, -0.252 51)
110	(-0.652 74, 0)	(1.972 61, -0.398 38)	(3.924 16, -1.051 68)	(7.956 87, -0.252 50)
225	(-0.653 08, 0)	(1.972 41, -0.399 35)	(3.923 90, -1.051 89)	(7.956 85, -0.252 49)
550	(-0.653 08, 0)	(1.972 41, -0.399 35)	(3.923 90, -1.051 89)	(7.956 85, -0.252 49)

Figura 3.13: Energías de los primeros cuatro estados excitados del ^{80}Ni , según la cantidad de estados de dispersión incluidos en la representación

Concluyendo, la representación de Berggren aparece como una muy buena herramienta para el estudio de núcleos exóticos y su importancia radica en su capacidad para describir adecuadamente la complejidad de los mismos.

Capítulo 4

Espacios de Hilbert equipados (RHS)

Von Neumann fue quien comenzó con el uso de espacios de Hilbert como marco para el formalismo de Dirac, a pesar de ciertas incompatibilidades. Como se dijo, los vectores de Gamow no están incluidos en la matemática de la mecánica cuántica ordinaria. Para esto, se requiere extenderla, junto con el espacio de Hilbert [35].

La teoría de espacios de Hilbert equipados (*Rigged Hilbert Space* o Terna de Gel'fand) proporciona un marco matemático riguroso para analizar estos sistemas. Estos permiten incluir los aspectos no estacionarios y temporales asociados con los estados de Gamow, dada la naturaleza transitoria y resonante de los sistemas físicos estudiados, al mismo tiempo que amplía el umbral matemático de la teoría cuántica.

El objetivo principal de este capítulo es presentar de manera sistemática la teoría de estos espacios y aplicarla a estados de Gamow, usando como base los trabajos [35, 36, 37, 38]. Se necesitarán dos nuevos espacios y una clase especial de funciones para lograrlo.

Espacio Φ

A los fines de este trabajo, con topología se referirá a un criterio de convergencia en un dado espacio. Por ejemplo, la topología del espacio de Hilbert \mathcal{H} (τ_H) viene dada por:

$$\varphi_\gamma \xrightarrow{\tau_H} \varphi \text{ para } \gamma \rightarrow \infty \iff \|\varphi_\gamma - \varphi\|_H \rightarrow 0 \text{ para } \gamma \rightarrow \infty$$

Es decir, por la convergencia en norma de L_2 (ver apéndice B).

Φ será un espacio topológico lineal si cumple [35]:

1. Φ es un espacio lineal

2. Hay definido un criterio de convergencia (τ_Φ) para una sucesión de elementos del espacio
3. Las operaciones algebraicas en el espacio (suma, multiplicación por escalar, etc) son continuas con el criterio de convergencia τ_Φ , o sea, cumplen:

$$a) \text{ Si } \varphi_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \varphi \text{ con } \varphi_n, \varphi \in \Phi \quad \forall n \in \mathbb{N} \implies \alpha\varphi_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \alpha\varphi \quad \forall \alpha \in \mathbb{C}$$

$$b) \text{ Si } \alpha_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \alpha \text{ con } \alpha_n, \alpha \in \mathbb{C} \quad \forall n \in \mathbb{N} \implies \alpha_n\varphi \xrightarrow{\tau_\Phi} \alpha\varphi \quad \forall \varphi \in \Phi$$

$$c) \text{ Si } \varphi_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \varphi \text{ y } \Psi_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \Psi \implies \varphi_n + \Psi_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \varphi + \Psi \text{ con } \varphi_n, \Psi_n, \varphi, \Psi \in \Phi \\ \forall n \in \mathbb{N}$$

Lo fundamental acá es que la topología τ_Φ será más “fuerte” (finer) que τ_H , de forma que τ_Φ convergencia $\implies \tau_H$ convergencia. Así, se tendrá [35]:

$$\Phi \subset \mathcal{H} \tag{4.1}$$

Estas son las características generales de Φ ; el contenido específico de este espacio, en cuánto a qué estados contiene, dependerá del problema físico a estudiar. En este trabajo será definido apropiadamente en la sección 4.3. Por ahora tener presente que será un subespacio de \mathcal{H} con una topología más restrictiva.

Asumimos que Φ es un espacio nuclear (para su definición, ver en apéndice B).

Esto es necesario porque permite trasladar muchas de las propiedades de Φ a lo que será su espacio antidual y también para un análisis riguroso de los operadores no acotados.

A partir de ahora habrá un cambio de notación, los brackets serán usados para denotar la actuación de un funcional sobre un elemento, es decir, $F(\varphi) = \langle \varphi | F \rangle$ y el producto escalar entre elementos de un mismo espacio será con paréntesis, por ejemplo, (φ, ψ) .

4.1 Espacio Φ^\times

El espacio Φ^\times , antidual o conjugado de Φ , es el conjunto de todos los funcionales antilineales τ_Φ -continuos, con dominio Φ [35]. La operación suma y multiplicación por escalar en este nuevo espacio vendrán definidas por:

$$\langle \varphi | \alpha F_1 + \beta F_2 \rangle = \alpha \langle \varphi | F_1 \rangle + \beta \langle \varphi | F_2 \rangle$$

Para evitar confusión, notar que la suma de funcionales es lineal, porque el espacio Φ^\times es lineal. Los que son antilineales son los funcionales en sí.

Análogamente, \mathcal{H}^\times es el de los τ_H -continuos con dominio \mathcal{H} .

Notar que si $f \in \mathcal{H}$ y $\varphi_\gamma \xrightarrow{\tau_\Phi} \varphi \implies \varphi_\gamma \xrightarrow{\tau_H} \varphi \implies (\varphi_\gamma, f) \rightarrow (\varphi, f)$ por ser el producto escalar un funcional continuo en un espacio de Hilbert \implies el funcional antilineal definido por $\langle \varphi | F \rangle = (\varphi, f)$ es τ_Φ continuo y $(, f) \in \Phi^\times \implies$

$$\mathcal{H}^\times \subset \Phi^\times \quad (4.2)$$

Por el Teorema de representación de Riesz, \mathcal{H}^\times es isométricamente anti-isomorfo a \mathcal{H} , es decir que hay una correspondencia biunívoca entre sus elementos, por lo cual se dice que es autodual:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^\times \quad (4.3)$$

Esta última igualdad no es una igualdad estricta entre espacios, ya que su contenido es diferente, sino que denota que nos es indistinto saber a cuál de los dos pertenece formalmente un dado elemento y que dos elementos que se corresponden “son la misma cosa”. Será el caso de todas las igualdades o relaciones de ese estilo.

De lo anterior, se concluye que:

$$\Phi \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}^\times \subset \Phi^\times \quad (4.4)$$

Definido el espacio Φ^\times , una definición relevante será:

Extensión de un operador A con dominio en Φ :

Sea A τ_Φ -continuo en Φ . Se define la extensión $A^X : \Phi^\times \rightarrow \Phi^\times /$

$$\langle A^\dagger \varphi | F \rangle = \langle \varphi | A^X F \rangle \quad (4.5)$$

Así definido, se obtiene un operador continuo (ver apéndice B.2) A^X sobre Φ^\times a partir de un operador continuo A sobre Φ .

4.1.1 Espacio $\Phi^{\times\times}$

El espacio $\Phi^{\times\times}$ será el de los funcionales antilineales continuos con dominio en Φ^\times [35]. O sea, los funcionales de funcionales tal que:

$$\tilde{\varphi} \in \Phi^{\times\times} \text{ si } \tilde{\varphi} : \Phi^\times \rightarrow \mathbb{C} / \tilde{\varphi}(\alpha F_1 + \beta F_2) = \alpha^* \tilde{\varphi}(F_1) + \beta^* \tilde{\varphi}(F_2) \text{ y continuo}$$

Con suma de funcionales y multiplicación por escalar dadas por:

$$\langle F|\alpha\tilde{\varphi}_1 + \beta\tilde{\varphi}_2\rangle = \alpha \langle F|\tilde{\varphi}_1\rangle + \beta \langle F|\tilde{\varphi}_2\rangle$$

Que junto con el criterio de convergencia débil (B.2), lo constituyen en un espacio topológico.

Además, puede demostrarse que dado $\varphi \in \Phi$, $\exists! \tilde{\varphi} \in \Phi^{\times\times} / \tilde{\varphi}(F) = F(\varphi)^* \quad \forall F \in \Phi^\times$, equivalente a $\langle F|\tilde{\varphi}\rangle = \langle \varphi|F\rangle^*$. Lo inverso también es cierto. Así, la correspondencia $\varphi \longleftrightarrow \tilde{\varphi}$ es uno a, en consecuencia:

$$\Phi = \Phi^{\times\times} \quad (4.6)$$

Esta es una igualdad en el mismo sentido que en (4.3). A los espacios que cumplen (4.6) se los llama reflexivos.

4.2 Terna de Gel'fand

Con lo anterior, se define un espacio de Hilbert equipado o terna de Gel'fand, introducidas por Izrail Gel'fand, como [35]:

$$\Phi \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}^\times \subset \Phi^\times \quad (4.7)$$

4.2.1 Ternas equivalentes

Sean $\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\times$ y $\Psi \subset \mathcal{W} \subset \Psi^X$ dos ternas de Gel'fand, se dicen equivalentes $\iff \exists U$ unitario tal que [35]:

1. $U\mathcal{H} = \mathcal{W}$

2. $U\Phi = \Psi$ siendo U bicontinuo, es decir, $\varphi_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \varphi \iff U\varphi_n \xrightarrow{\tau_\Psi} U\varphi$

Con esto, U será extensible a $U^X : \Phi^\times \longrightarrow \Psi^X$ siendo también bicontinuo y biyectivo y vendrá definido por:

$$\langle U\varphi|U^X F\rangle \quad (4.8)$$

De forma que también se pueden trasladar los operadores. Si A en $\Phi \implies$ su análogo en la nueva terna será $UAU^{-1} / \text{Dom}(UAU^{-1}) = U\Phi = \Psi$.

Si \mathcal{W} es un espacio de Hilbert de funciones, esta terna se dice *representación* de la primera.

El concepto de representación es necesario para construir el espacio Φ en (4.3) ya que este estará definido a partir de su representación.

4.2.2 Autovectores generalizados

Considerar un operador A en Φ y extensible según (4.5), si para algún $\lambda \in \mathbb{C}$ y un funcional antilineal F ocurre que [35]:

$$\langle A^\dagger \varphi | F \rangle = \langle \varphi | A^X F \rangle = \lambda \langle \varphi | F \rangle \quad \forall \varphi \in \Phi \quad (4.9)$$

Entonces, F se dice autovector generalizado con autovalor λ de A .

Condensando notación y renombrando a los funcionales $F = |\lambda\rangle$ para ya usar la notación de Dirac, se puede decir:

$$A^X |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \quad (4.10)$$

Con esto, $|\lambda\rangle$ y λ son llamados autovector y autovalor generalizados del operador A , respectivamente.

4.2.3 Teorema nuclear espectral

Si $\{A_k\}_{k=1}^N$ es un sistema completo de operadores que conmutan (CCOC) (ver en apéndice B.2), esencialmente autoadjuntos, τ_Φ -continuos en la terna $\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\times$, entonces existen [35]:

$$\begin{aligned} |\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, \lambda^{(N)}\rangle &\in \Phi^\times \\ A_k^X |\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, \lambda^{(N)}\rangle &= \lambda^{(k)} |\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, \lambda^{(N)}\rangle \\ \lambda^{(k)} &\in \Lambda^{(k)} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Que, además, $\forall \varphi, \psi \in \Phi$ y una medida μ en $\Lambda = \Lambda^{(1)} \times \Lambda^{(2)} \times \dots \times \Lambda^{(N)}$, que es el producto cartesiano de los espectros de cada A_k^X , vale:

$$(\psi, \varphi) = \int_{\Lambda} d\mu(\lambda) \langle \psi | \lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, \lambda^{(N)} \rangle \langle \varphi | \lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, \lambda^{(N)} \rangle^* \quad (4.12)$$

O, equivalentemente:

$$\varphi = \int_{\Lambda} d\mu(\lambda) \langle \varphi | \lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, \lambda^{(N)} \rangle^* |\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, \lambda^{(N)}\rangle \quad (4.13)$$

En realidad, (4.13) es el funcional en Φ^\times asociado a φ .

Este teorema, también conocido como el Teorema de Gel'fand-Maurin, prueba que los autovectores generalizados del CCOC generan Φ .

Considerar el caso de un CCOC de un solo operador, se tendrá, para un dado elemento, que:

$$(\varphi, \varphi) = \int_{\Lambda} |\langle \varphi | \lambda \rangle^*|^2 d\mu(\lambda) \quad (4.14)$$

Esto implica que $\langle \varphi | \lambda \rangle^*$ es una función cuadrado integrable respecto de la medida $d\mu(\lambda)$. Por lo que habrá una correspondencia entre Φ y $L^2(\Lambda, d\mu(\lambda))$, es decir, $\varphi \longleftrightarrow \varphi(\lambda) = \langle \varphi | \lambda \rangle^*$. Esta correspondencia la da el operador U antes definido.

En conclusión, siempre se puede encontrar una representación de la terna (4.7), tal que $\mathcal{W} = L^2(\Lambda, d\mu(\lambda))$.

4.3 Construcción de Φ

El espacio Φ para el problema de scattering y, específicamente, para incluir resonancias y estados virtuales en el RHS, será definido a partir de su representación. O sea, se define primero una terna de Gel'fand de forma que su espacio de Hilbert asociado sea uno de funciones y la terna de los espacios abstractos será la obtenida con la aplicación de ese operador U unitario que los relaciona. Pero para llegar a esta representación hay que pasar por varios espacios antes, algunos serán importantes en sí mismos y otros simplemente auxiliares.

Para esta sección son necesarias algunas precisiones. El espacio \mathcal{H} puede descomponerse en la suma directa de los autoespacios del operador \mathbf{L}^2 [35, 38]:

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{H}_l$$

Como antes, l corresponde al momento angular orbital. Lo que sigue se restringirá al caso $l = 0$, o sea, estados dentro de \mathcal{H}_0 . Los resultados del capítulo son válidos para cualquier l arbitrario, la elección de restringirse a $l = 0$ es para simplificar notación y facilitar la exposición matemática.

También, recordar que:

$$\mathcal{H} = \mathcal{B} \oplus \mathcal{R}$$

En particular, \mathcal{H}_0 . Es decir, suma directa de estados ligados y estados del continuo con energía positiva, siempre con momento angular orbital cero.

Con esta restricción, el hamiltoniano libre H_0 cumple con las hipótesis del teorema de Gel'fand-Maurin y dado que su espectro son los reales positivos $\Lambda = \mathbb{R}^+$ y $d\mu(\lambda) = dE$, entonces:

$$U : \mathcal{H}_0 \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^+) \quad (4.15)$$

Antes se usó mayormente k como variable para las funciones de onda, ahora se pasa a la variable energía E .

Para llegar a construir Φ se necesitan utilizar los espacios de Hardy y Schwartz que serán definidos a continuación:

4.3.1 Espacios de Hardy

Sea $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, tal que [35]:

<p>a) $\exists f(z)$ analítica $\forall z \in \mathbb{C}^+ - \mathbb{R}$</p> <p>$\forall y > 0$ fijo:</p> <p>b) $\sup \int_{-\infty}^{\infty} f(x + yi) ^2 dx < K < \infty$</p> <p>c) $\lim_{y \rightarrow 0} f(x + yi) = f(x)$</p> <p>$\implies f \in H_+$</p>	<p>a') $\exists f(z)$ analítica $\forall z \in \mathbb{C}^- - \mathbb{R}$</p> <p>$\forall y < 0$ fijo:</p> <p>b') $\sup \int_{-\infty}^{\infty} f(x + yi) ^2 dx < K < \infty$</p> <p>c') $\lim_{y \rightarrow 0} f(x + yi) = f(x)$</p> <p>$\implies f \in H_-$</p>
---	--

Donde H_{\pm} son los llamados Espacios de Hardy, claramente son espacios de funciones a variable real. Estos son subespacios de Hilbert de $L^2(\mathbb{R})$, con la misma topología. Para aclarar, H_{\pm} heredan el producto interno de $L^2(\mathbb{R})$, en consecuencia, también la norma y métrica asociadas al mismo y la convergencia también será la convergencia en norma, así es completo. Y:

$$L^2(\mathbb{R}) = H_+ \oplus H_- \quad (4.16)$$

4.3.2 Espacio de Schwartz

Sea $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, tal que [35]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{a) } f \text{ es infinitamente diferenciable} \\ \text{b) } \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \left| x^n \frac{d^m}{dx^m} f(x) \right| = 0 \quad m, n = 0, 1, \dots \end{array} \right. \implies f \in \mathcal{S}$$

Se dice que una sucesión $f_n \in \mathcal{S}$ converge a f si:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\| \left(x^2 + \frac{d^2}{dx^2} \right)^p [f_n(x) - f(x)] \right\| \rightarrow 0 \quad \forall p \in \mathbb{N}_0$$

Con la norma de L^2 , de forma que \mathcal{S} será el espacio de Schwartz. $\mathcal{S} \subset L^2(\mathbb{R})$. Claramente, la topología de Schwartz es más fina que la de L^2 , siendo la de este último el caso particular de $p = 0$ en la “familia de topologías” que definen la convergencia en \mathcal{S} . Por lo cual, puede formarse $\mathcal{S} \subset L^2(\mathbb{R}) \subset \mathcal{S}^\times$, siendo \mathcal{S}^\times el espacio de funcionales antilineales en \mathcal{S} , también llamados distribuciones temperadas.

4.3.3 Espacios Δ y \mathcal{D}

Con estos espacios definidos, consideremos los espacios $\mathcal{S}(\mathbb{R}^+)$ y $\mathcal{S}(\mathbb{R}^-)$, que contienen las funciones de \mathcal{S} que son cero para $x \in \mathbb{R}^-$ o \mathbb{R}^+ , respectivamente. Sea \mathcal{F} la transformada de Fourier, entonces se definen [35]:

$$\Delta_\pm \equiv \mathcal{F}[\mathcal{S}(\mathbb{R}^\mp)] = \mathcal{S} \cap H_\pm \quad (4.17)$$

Δ_\pm es subespacio de \mathcal{S} y hereda su topología, es decir, $f_n(E) \xrightarrow{\tau_{\Delta_\pm}} f(E) \iff f_n(E) \xrightarrow{\tau_{\mathcal{S}}} f(E)$ y es completo con esta. Y ya se dijo antes que la convergencia en Schwartz implica convergencia en L^2 . Por lo que se puede formar:

$$\Delta_\pm \subset H_\pm \subset \Delta_\pm^\times \quad (4.18)$$

También se definen:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\pm &= \{\text{restricción a } \mathbb{R}^\pm \text{ de las funciones en } \Delta_\pm\} \\ \mathcal{D}_+ &= \mathcal{D}_-^* \end{aligned} \quad (4.19)$$

Por el teorema de Van Winter, una función en (4.18) está completamente determinada por sus valores en la recta real positiva (ver en apéndice B.3). Entonces, existe un mapeo biyectivo tal que:

$$\begin{aligned}\theta_{\pm} : \Delta_{\pm} &\longrightarrow \mathcal{D}_{\pm} \\ \theta_{\pm}[\Delta_{\pm}] &= \mathcal{D}_{\pm}\end{aligned}\tag{4.20}$$

Básicamente, el operador que “hace” la restricción en (4.19).

\mathcal{D}_{\pm} tendrán la siguiente topología:

$$\varphi_n(E) \xrightarrow{\tau_{\mathcal{D}_{\pm}}} \varphi(E) \iff \theta_{\pm}^{-1}\varphi_n(E) \xrightarrow{\tau_{\Delta_{\pm}}} \theta_{\pm}^{-1}\varphi(E)\tag{4.21}$$

O sea, la convergencia en Δ da la convergencia en \mathcal{D} . Ahora sí, se define Φ a partir de su representación de la forma:

$$\Phi_{\pm} = U^{-1}\mathcal{D}_{\mp}\tag{4.22}$$

Y se obtienen las ternas:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{\mp} &\subset L^2(\mathbb{R}^+) \subset \mathcal{D}_{\mp}^{\times} \\ \Phi_{\pm} &\subset \mathcal{H}_0 \subset \Phi_{\pm}^{\times}\end{aligned}\tag{4.23}$$

Siendo las primeras representaciones de las segundas (notar inversión de signos).

Usando los operadores de Møller y considerando que $\mathcal{R} = \Omega_{\pm}\mathcal{H}_0$, se definen para estados interactuantes:

$$\begin{aligned}\Phi^{\pm} &= \Omega_{\pm}\Phi_{\pm} \\ \Phi^{\pm} &\subset \mathcal{R} \subset \Phi^{\pm\times}\end{aligned}\tag{4.24}$$

La topología de estos nuevos espacios viene definida de forma análoga a lo que fue (4.21):

$$\varphi_n \xrightarrow{\tau_{\Phi_{\pm}}} \varphi \iff \Omega_{\pm}^{-1}\varphi_n \xrightarrow{\tau_{\Phi_{\pm}}} \Omega_{\pm}^{-1}\varphi\tag{4.25}$$

Con las extensiones de los operadores de Møller definidas por:

$$\langle \Omega_{\pm}\varphi | \Omega_{\pm}^X F \rangle \quad \forall \varphi \in \Phi_{\pm}, F \in \Phi_{\pm}^{\times}\tag{4.26}$$

$$\begin{array}{ccccc}
& \Phi^- & \subset & \mathcal{R} & \subset & \Phi^{-\times} \\
\Omega_-^{-1} & \downarrow & & \downarrow \Omega_-^{-1} & & \downarrow \Omega_-^{-1 \times} \\
& \Phi_- & \subset & \mathcal{H}_0 & \subset & \Phi_-^\times \\
U & \downarrow & & \downarrow U & & \downarrow U \\
& \mathcal{D}_+ & \subset & L^2(\mathbb{R}^+) & \subset & \mathcal{D}_+^\times \\
\theta_+^{-1} & \downarrow & & & & \downarrow (\theta_+^{-1})^\times \\
& \Delta_+ & \subset & L^2(\mathbb{R}) & \subset & \Delta_+^\times
\end{array}$$

(a)

$$\begin{array}{ccccc}
& \Phi^+ & \subset & \mathcal{R} & \subset & \Phi^{+\times} \\
\Omega_+^{-1} & \downarrow & & \downarrow \Omega_+^{-1} & & \downarrow \Omega_+^{-1 \times} \\
& \Phi_+ & \subset & \mathcal{H}_0 & \subset & \Phi_+^\times \\
U & \downarrow & & \downarrow U & & \downarrow U \\
& \mathcal{D}_- & \subset & L^2(\mathbb{R}^+) & \subset & \mathcal{D}_-^\times \\
\theta_-^{-1} & \downarrow & & & & \downarrow (\theta_-^{-1})^\times \\
& \Delta_- & \subset & L^2(\mathbb{R}) & \subset & \Delta_-^\times
\end{array}$$

(b)

Figura 4.1: En (a) y (b), esquemas de los espacios con los operadores que los relacionan. Tomado de [37].

En la figura 4.1, se muestran esquemas que ilustran la relación entre los espacios arriba definidos, junto con el operador que los relaciona.

Considerar ahora el operador H_R , que es la restricción del dominio del hamiltoniano completo H al espacio \mathcal{R} . Como se dijo, H_0 cumple con las hipótesis del teorema nuclear espectral [35], y en consecuencia:

$$\begin{aligned}
H_0^X |E_\pm\rangle &= E |E_\pm\rangle & \forall E \in \mathbb{R}^+ \\
(\varphi_\pm, \psi_\pm) &= \int_0^\infty \langle \varphi_\pm | E_\pm \rangle \langle \psi_\pm | E_\pm \rangle^* dE & \forall \varphi_\pm, \psi_\pm \in \Phi_\pm \\
\langle \psi_\pm | E_\pm \rangle^* &\equiv \psi_\mp(E) \in \mathcal{D}_\mp
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Siendo H_0^X la extensión de H_0 a los espacios Φ_{\pm}^X . Esto es, los estados $|E\rangle_{\pm}$ (por ejemplo ondas planas), por teorema nuclear espectral, forman una base de los espacios Φ_{\pm} , respectivamente. Prestar especial atención a las eventuales inversiones de signos \pm por \mp .

$$\begin{aligned}\Omega_{\pm}^X |E_{\pm}\rangle &= |E^{\pm}\rangle \\ H_R^X |E^{\pm}\rangle &= E |E^{\pm}\rangle\end{aligned}\quad (4.28)$$

Estos son estados estacionarios de dispersión para el hamiltoniano completo (con interacción) en este nuevo formalismo, ahora como funcionales en $\Phi^{\pm\times}$, y son base de los espacios Φ^{\pm} completos.

Por la definición en (4.24), los espacios Φ_{\pm} son los de estados asintota *in* y *out* definidos en (2.8), de forma que $\varphi_{in} \in \Phi_+$ y $\psi_{out} \in \Phi_-$.

4.4 Generalización

Hay otros autovectores generalizados para estos hamiltonianos cuyos autovalores son complejos con parte imaginaria no negativa [35]:

$$\begin{aligned}H_0^X |\omega_{\pm}\rangle &= \omega |\omega_{\pm}\rangle \\ H_R^X |\omega^{\pm}\rangle &= \omega |\omega^{\pm}\rangle & \forall \omega \in \mathbb{C}^{\pm} \\ \langle \varphi^{\pm} | \omega^{\pm} \rangle &= \langle \varphi_{\pm} | \omega_{\pm} \rangle = [g_{\mp}(\omega)]^* & g_{\mp}(E) = \theta_{\mp}^{-1} U \varphi_{\pm} \in \Delta_{\mp}\end{aligned}\quad (4.29)$$

Tanto a φ_{\pm} como a φ^{\pm} les corresponde una función $g_{\mp} \in \Delta_{\mp}$ dada por el operador $\theta_{\mp}^{-1} U$. Estos autovectores son funcionales que asignan a los elementos de Φ_{\pm} y Φ^{\pm} el número que resulta de evaluar su conjugada en el autovalor complejo ω .

Notar que, a pesar de que los espacios de funciones son a variable real, por como fueron definidos, el número $g(\omega)$ existe.

Puede demostrarse con el teorema de Titchmarsh (ver apéndice B.3) que:

$$\langle \varphi^{\pm} | \omega^{\pm} \rangle = \left\langle g_{\mp}(E) \left| \pm \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{E - \omega} \right. \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \pm \frac{1}{2\pi i} \frac{[g_{\mp}(E)]^*}{E - \omega} = [g_{\mp}(\omega)]^* \quad (4.30)$$

Se definen los funcionales de Green (resolventes) en Δ_{\pm}^X como:

$$\mathcal{G}_{\pm}(\omega) = \mp \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{E - \omega} \quad \text{con } \omega \in \mathbb{C}^{\mp} \quad (4.31)$$

Dado que el hamiltoniano H_R para los espacios Δ resulta de la transformación:

$$\hat{\varepsilon} = \theta_{\mp}^{-1} U \Omega_{\pm}^{-1} H_R \Omega_{\pm} U^{-1} \theta_{\mp} \quad (4.32)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \hat{\varepsilon} g_{\pm}(E) &= E g_{\pm}(E) \\ \hat{\varepsilon}^X \mathcal{G}_{\pm}(\omega) &= \omega \mathcal{G}_{\pm}(\omega) \end{aligned} \quad (4.33)$$

A la terna (4.18) se la utiliza como representación, aunque formalmente no lo es, dado que el operador que relaciona (4.18) con (4.24) no es unitario [35]. A pesar de esto, será referenciada en el próximo capítulo.

En el capítulo 2, se usó la extensión analítica de S para el plano complejo k . Ahora es en variable energía, por lo que S pasa a $S_I(\omega)$ y $S_{II}(\omega)$, estas son las extensiones analíticas para cada hoja de energía, I para la física y II para la no física.

Otra forma de expresar la transformación del plano k en estas dos hojas de energía a través de la relación de dispersión es utilizando superficies de Riemann ¹. Esta superficie está compuesta por dos planos complejos (las hojas) con origen en común y están conectados por sus semiejes positivos. El borde superior conecta la mitad superior de la primera hoja con la mitad inferior de la segunda hoja, mientras que el borde inferior conecta la mitad inferior de la primera hoja con la mitad superior de la segunda hoja (ver figura 4.2). Aunque lo relevante siguen siendo las propiedades analíticas de S , dadas en la sección 3.2.2, por lo que no es necesario profundizar en la estructura geométrica de la superficie de Riemann.

Los límites a los ejes reales de cada una cumplen [35]:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S_I(E + \epsilon i) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S_{II}(E - \epsilon i) \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S_I(E - \epsilon i) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S_{II}(E + \epsilon i) \end{aligned} \quad (4.34)$$

Por lo que se puede definir:

¹Una superficie de Riemann es una variedad unidimensional compleja que localmente se comporta como el plano complejo. Permite el estudio de funciones de una variable compleja y es utilizada para analizar fenómenos como las singularidades y ramificaciones de dichas funciones.

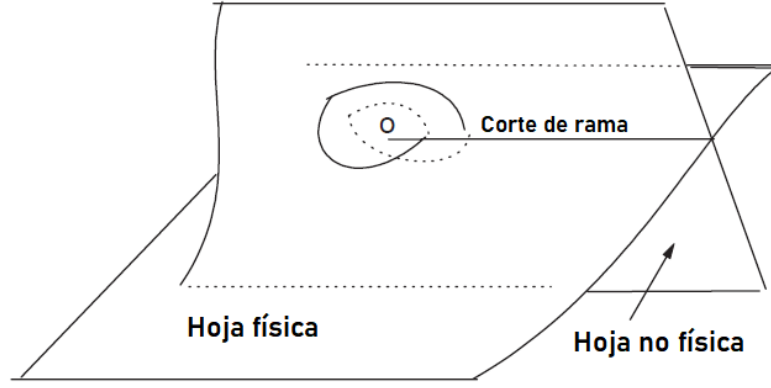


Figura 4.2: Esquema de la superficie de Riemann, tomado de [37]

$$S(E \pm 0i) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S_I(E \pm \epsilon i) \quad (4.35)$$

La probabilidad de que un estado *in*, dispersado, termine como un dado estado *out*, viene dada por (2.16) que en términos del formalismo de RHS está dado por el producto escalar [35]:

$$\begin{aligned} (\varphi_{out}, S\psi_{in}) &= (\varphi^-, \psi^+) = \int_0^{\infty} \langle \varphi_{out} | E_- \rangle \langle \psi_{in} | E_+ \rangle^* S(E + 0i) dE \\ &= \int_0^{-\infty} \langle \varphi^- | E^- \rangle \langle \psi^+ | E^+ \rangle^* S_{II}(E) dE \end{aligned} \quad (4.36)$$

La primera integral es hecha en el eje real positivo de la hoja física y la segunda en eje real negativo de la hoja no física.

Se asumirá que S_{II} estará acotada, en módulo, por un polinomio para cualquier ω . Es decir [35]:

$$\exists \rho > 0 : |S_{II}(\omega)| \leq |P(\omega)| \quad \forall \omega \in \mathbb{C} \text{ con } |\omega| \geq \rho \quad (4.37)$$

Donde $P(\omega)$ es un polinomio en ω . Considerar, como es usual, que hay infinitos pares de polos de S_{II} en $\omega = W_n = E_n - \frac{1}{2}\Gamma_n i$ y W_n^* . Entonces [35]:

$$\begin{aligned} H_R^X |W_n^- \rangle &= W_n |W_n^- \rangle \in \Phi^{-\times} \\ H_R^X |W_n^+ \rangle &= W_n^* |W_n^+ \rangle \in \Phi^{+\times} \end{aligned} \quad (4.38)$$

Las resonancias de decaimiento $|W_n^-\rangle$ y captura $|W_n^+\rangle$ son autovectores generalizados del hamiltoniano, o sea, funcionales antilineales. Además, $|W_n^\pm\rangle \notin \mathcal{H}_0$ y no les corresponde un vector en el espacio de Hilbert.

Con una lógica similar a la de Berggren, sólo que ahora en energías. Considerando la extensión analítica del integrando en (4.36) y haciendo la integral en un contorno semicircular que puede ser hacia abajo (donde están las resonancias de decaimiento) o hacia arriba (donde están las de captura), puede demostrarse [35]:

$$\begin{aligned}\psi^+ &= \int_0^{-\infty} S_{II}(E) \langle \psi^+ | E^+ \rangle^* | E^- \rangle dE - 2\pi i \sum_n \sigma_n \langle \psi^+ | W_n^+ \rangle^* | W_n^- \rangle \\ \varphi^- &= \int_0^{-\infty} S_{II}^*(E) \langle \varphi^- | E^- \rangle^* | E^+ \rangle dE + 2\pi i \sum_n \sigma_n^* \langle \varphi^- | W_n^+ \rangle^* | W_n^+ \rangle\end{aligned}\quad (4.39)$$

Donde al término integral se lo llama “de fondo” o *background*, σ_n es el residuo de S_{II} en W_n . De esta forma que se consigue incluir resonancias en los desarrollos de los estados.

Para cerrar el capítulo, se describe la evolución temporal de los mismos. Como se definieron hasta ahora las extensiones de los operadores, puede definirse la del operador evolución, que en esta sección lo nombraremos sólo en su forma explícita $e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}$ para evitar confusión con el operador U .

Su extensión será $e^{-i\frac{H^X t}{\hbar}}$; en $\Phi^{+\times}$ sólo puede definirse para $t > 0$, mientras que en $\Phi^{-\times}$ sólo para $t < 0$. Así [38]:

$$\begin{aligned}e^{-H^X t/\hbar} |W_n^-\rangle &= e^{-iE_n t/\hbar} e^{-\Gamma_n t/(2\hbar)} |W_n^-\rangle & \text{si } t > 0 \\ e^{-H^X t/\hbar} |W_n^+\rangle &= e^{-iE_n t/\hbar} e^{\Gamma_n t/(2\hbar)} |W_n^+\rangle & \text{si } t < 0\end{aligned}\quad (4.40)$$

Recuperando el comportamiento temporal esperado para cada resonancia.

Ahora, a las resonancias caracterizadas por las funciones radiales $\Phi(r)$ y $\tilde{\Phi}(r)$ descritas en el capítulo 3, en el cual no se les había dado una descripción matemática tan rigurosa, y en [19] por Berggren, les corresponden los vectores de estado generalizados $|W_n^-\rangle \in \Phi^{-\times}$ y $|W_n^+\rangle \in \Phi^{+\times}$, respectivamente.

Con esto, queda demostrada la utilidad de los espacios de Hilbert equipados para incorporar resonancias de manera rigurosa. Esto también será utilizado en capítulo 5, aplicado a valores medios.

Capítulo 5

Valores medios en estados resonantes

En este último capítulo se mostrará el resultado numérico de calcular el valor de dos magnitudes, $\langle r^2 \rangle$ y R_{rms} , para cuatro núcleos, a saber: ^{17}O , ^{11}Be , ^5He y ^{13}Be en su estado fundamental para distintas variaciones en los parámetros de intensidad y difusividad del potencial en (1.4). Todos serán tratados como un core, con A_c nucleones, más un neutrón de valencia, como se explicó en el capítulo 1, el núcleo tendrá un total del $A = A_c + 1$ nucleones. También, el valor de la energía fundamental será calculada, la cual dependerá de los parámetros elegidos para el potencial.

5.1 Definición teórica de valor medio en estados resonantes

En general, las magnitudes asociadas a resonancias traen problemas en cuanto a su interpretación. Por ejemplo, como se dijo en la sección 3.4 del capítulo 3, el módulo de la función de onda de una resonancia ya no puede interpretarse como una densidad de probabilidad [39]. La magnitud a analizar que ocupará esta sección será el valor medio de un observable en una resonancia, en particular del hamiltoniano H . Como se verá, este no sólo requiere ser reinterpretado sino también redefinido, habiendo varias formas de hacerlo que serán descritas a continuación.

5.1.1 Definición de Berggren

Berggren, en [19] propone reformular el valor medio de un observable. Por definición, este venía dado, para un observable A , por:

$$\langle A \rangle_{\text{tradicional}} = \frac{\text{Tr}(\rho A)}{\text{Tr}(\rho)} \quad (5.1)$$

Siendo ρ el operador densidad, que para una resonancia (estado puro) y en el formalismo de base bi-ortonormal de Berggren termina siendo $\rho = |\Theta_{l,m,n}\rangle\langle\tilde{\Theta}_{l,m,n}|$. Esto, usado en (5.1), resulta en un valor complejo. Berggren lo aplica para $A = H$, con H siendo el hamiltoniano del sistema, y dado que testea el valor medio entre autovectores, obtiene fácilmente que:

$$\langle H \rangle_{\text{tradicional}} = \langle \tilde{\Theta}_{l,m,n} | H | \Theta_{l,m,n} \rangle = E_{nl} - i\frac{1}{2}\Gamma_{nl} \quad (5.2)$$

Él propone considerar que el valor medio físico sea la parte real de (5.2). Así:

$$\langle A \rangle_{\text{físico}} = \langle A \rangle = \text{Re} \left(\frac{\text{Tr}(\rho A)}{\text{Tr}(\rho)} \right) \quad (5.3)$$

Dado que la desviación cuadrática $\Delta A^2 = \langle A^2 - \langle A \rangle^2 \rangle$ es en sí misma el valor medio de un operador, esto último más la nueva fórmula para el valor medio aplicado a H :

$$\begin{aligned} \Delta H^2 &= \langle \tilde{\Theta}_{l,m,n} | H^2 - \langle H \rangle^2 | \Theta_{l,m,n} \rangle \\ &= \langle \tilde{\Theta}_{l,m,n} | H^2 | \Theta_{l,m,n} \rangle - \langle H \rangle^2 \langle \tilde{\Theta}_{l,m,n} | \Theta_{l,m,n} \rangle \\ &= (E_{nl} - i\frac{1}{2}\Gamma_{nl})^2 - E_{nl}^2 = -\frac{1}{4}\Gamma_{nl}^2 - iE_{nl}\Gamma_{nl} \end{aligned}$$

Tomando las partes reales y usando que $\langle \tilde{\Theta}_{l,m,n} | \Theta_{l,m,n} \rangle = 1$, resulta en:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= E_{nl} \\ \Delta H^2 &= -\frac{1}{4}\Gamma_{nl}^2 \end{aligned} \quad (5.4)$$

Concluyendo que una posible interpretación para estos valores medios es que la parte real sea el valor medio físico y la parte imaginaria esté relacionada con su error o incerteza.

Posteriormente, en [40], Berggren demuestra las nociones del principio para un operador A que commute con H , valiendo:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \text{Re} \langle \tilde{\Theta}_{l,m,n} | A | \Theta_{l,m,n} \rangle \\ \Delta A^2 &= -\left(\text{Im} \langle \tilde{\Theta}_{l,m,n} | A | \Theta_{l,m,n} \rangle \right)^2 \end{aligned} \quad (5.5)$$

También se propone que el signo de la incerteza dependa de si el estado es de decaimiento o de captura, correspondiéndole el signo negativo para las de decaimiento.

5.1.2 Definición de Bohm

En el marco de los espacios de Hilbert equipados, para una resonancia de energía $W^- = E_R - \frac{\Gamma}{2}i$ y $W^+ = W^{-*} = E_R + \frac{\Gamma}{2}i$, en la terna (4.18), los estados de Gamow se corresponden con los funcionales de Green en (4.31). Es decir, a las resonancias de decaimiento $|W^-\rangle \in \Phi^{-\times}$ y captura $|W^+\rangle \in \Phi^{+\times}$ les corresponden, en Δ_{\pm}^{\times} los vectores:

$$\theta^{-1}U\Omega_{\pm}^{-1}|W^{\pm}\rangle = \frac{\pm 1}{2\pi i} \frac{1}{E - W^{\pm}} \in \Delta_{\mp}^{\times} \quad (5.6)$$

En [41], se propone equipar a los espacios Δ^{\times} (por simplicidad, se omiten los subíndices) con el producto escalar y la norma de L_2 . Así, los vectores de Gamow en los espacios Δ^{\times} podrán normalizarse. Esto requiere cambiar el factor $\pm 1/2\pi i$ en (5.6) por $1/\sqrt{\pi}$, de forma que los vectores:

$$\begin{aligned} W_{\Delta}^{-} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{E - W^{-}} \\ W_{\Delta}^{+} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{E - W^{+}} \end{aligned} \quad (5.7)$$

Son la representación de las resonancias como elementos de Δ^{\times} y estarán normalizados:

$$\begin{aligned} \|W_{\Delta}^{-}\|^2 &= (W_{\Delta}^{-}, W_{\Delta}^{-}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{E - W^{-}} \right)^* \frac{1}{E - W^{-}} dE = 1 \\ \|W_{\Delta}^{+}\|^2 &= (W_{\Delta}^{+}, W_{\Delta}^{+}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{E - W^{+}} \right)^* \frac{1}{E - W^{+}} dE = 1 \end{aligned} \quad (5.8)$$

Con lo cual, se propone definir el valor medio de la energía como:

$$\langle \hat{\varepsilon}^X \rangle = (W_{\Delta}^{\pm}, \hat{\varepsilon}^X W_{\Delta}^{\pm}) \quad (5.9)$$

Esto es:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{E - W^{\pm*}} \frac{E}{E - W^{\pm}} dE = \frac{2}{\pi\Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{E}{\left(\frac{E - E_R}{\Gamma/2}\right)^2 + 1} dE$$

Esta integral puede evaluarse [41, 37], resultando en:

$$\langle \hat{\varepsilon}^X \rangle = (W_{\Delta}^{\pm}, \hat{\varepsilon}^X W_{\Delta}^{\pm}) = E_R \quad (5.10)$$

De forma que el valor medio de la energía en un estado resonante, de captura o decaimiento, es su parte real, en coincidencia con el criterio de Berggren.

5.1.3 Definición de Michel

Lo anterior fue para el hamiltoniano o para operadores que conmuten con él. En [22], se propone una generalización de esto para un observable cualquiera comparando el valor medio, que dependerá del tiempo según Γ , y la dispersión temporal del mismo, con la definición dada en (5.5) junto con una nueva interpretación de las magnitudes.

Para una función de onda completa de una resonancia, se tendría:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Theta(\mathbf{r}) e^{iE_R t/\hbar} e^{-\Gamma t/2\hbar} \quad (5.11)$$

El valor medio convencional en este estado será:

$$A(t) = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \Theta | A | \Theta \rangle e^{-\Gamma t/\hbar} \quad (5.12)$$

Y el de Berggren:

$$\langle \tilde{\Theta} | A | \Theta \rangle = A_r + A_i i \quad (5.13)$$

Si el promedio temporal en un tiempo T_0 es :

$$\overline{f(t)} = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} f(t) dt$$

Entonces, esto, aplicado a la dispersión temporal de (5.12) para $T_0 \ll \frac{\hbar}{\Gamma}$ será:

$$\Delta_t(A) = \frac{1}{T_0} \sqrt{\overline{A(t)^2} - \overline{A(t)}^2} \approx \frac{\Gamma}{\hbar\sqrt{12}} |\langle \Theta | A | \Theta \rangle| \quad (5.14)$$

Para una resonancia angosta ($\Gamma \ll E_R$), puede considerarse a (5.13) como una función de la energía, expandirse en Taylor alrededor de E_R y evaluarla en $E_R - \frac{\Gamma}{2}i$ tal que $A_r + A_i i \approx A(E_R) - \frac{\Gamma}{2}A'(E_R)i$. El paso relevante está en hacer el link entre estos dos formalismos proponiendo que A_r puede interpretarse como el promedio temporal de A en mediciones hechas a tiempos $t \ll \hbar/\Gamma$ de forma que [22]:

$$\begin{aligned} A_r &= \overline{A(t)} \\ A_i &= -\hbar\sqrt{3} \frac{A'(E_R)}{|A(E_R)|} \Delta_t(A) \propto \Delta_t(A) \end{aligned} \quad (5.15)$$

Y, en consecuencia, A_i queda relacionada a la dispersión temporal de las mediciones.

En principio, tanto A_r como A_i podrían medirse experimentalmente, pero realizar un análisis estadístico de los observables vinculados a los estados de resonancia es muy complicado. Con lo cual, tanto estas ecuaciones como las propuestas anteriores, por ahora, son sólo de interés teórico, ya que su estudio experimental requeriría instrumentos extremadamente precisos que actualmente no existen.

También es importante notar que las incertezas propuestas en esta sección no corresponden a la desviación estándar de un operador encontrada en la literatura cuántica, se trata de una hipotética incerteza adicional originada por la condición de decaimiento de las resonancias y su energía compleja [42, 22].

5.2 Operador r^2 y R_{rms}

Si \mathbf{r} es el vector posición del neutrón de valencia respecto del centro del carozo inerte, el operador r^2 corresponde a la distancia al cuadrado del mismo.

Ahora bien, el estado total, core más valencia, definido en (1.3) puede escribirse como:

$$|\Psi\rangle = |1, \dots, A_c\rangle \otimes |\psi\rangle \quad (5.16)$$

Donde $|1, \dots, A_c\rangle$ es el estado del core y el $|\psi\rangle$ es el estado de partícula simple del neutrón de valencia. Con esto pueden definirse:

$$\langle r^2 \rangle = \langle \psi | r^2 | \psi \rangle \quad (5.17)$$

$$R_{rms}^2(A) = \frac{1}{A} \langle \Psi | \sum_{i=1}^A \mathbf{r}_i^2 | \Psi \rangle \quad (5.18)$$

Donde $\langle r^2 \rangle$ es el radio cuadrático del neutrón respecto del origen y a R_{rms} se lo llama radio cuadrático medio, o *root-mean-square radius*, y puede interpretarse como el radio del núcleo completo. Dado que consideramos $A = A_c + 1$, utilizando (5.16), (5.17) y (5.18), estos valores están relacionados por:

$$R_{rms}^2(A_c + 1) = \frac{A_c}{A_c + 1} R_{rms}^2(A_c) + \frac{A_c}{A_c + 1} \langle r^2 \rangle \quad (5.19)$$

Lo que se calculará numéricamente será $\langle r^2 \rangle$. Ese valor se usará también para calcular $R_{rms}(A_c + 1)$ usando la ecuación anterior y $R_{rms}^2(A_c)$ de datos experimentales [43].

5.3 Resultados

En esta sección se calculará el radio cuadrático del neutrón de valencia y el radio cuadrático medio de los núcleos ^{17}O , ^{13}Be , ^5He y ^{11}Be para el estado fundamental. Para calcular se usará un programa en Fortran, el “Gamow”, escrito por Vertse y Pal del Instituto de Investigación Nuclear de la Academia de Ciencias de Hungría [44]. Sus entradas son el momento angular l y total j del neutrón, también los parámetros del potencial (V_{0ws} , V_{0so} , a_{ws} , a_{so} y r_0). Las salidas son el valor de la energía para esos valores de momento y la función de onda, esto permite calcular $\langle r^2 \rangle$ correspondiente a la definición de Berggren dada en 5.1.1.

Se mostrará la relación entre el peso relativo de la parte imaginaria y real del valor medio de esos operadores en función de su análogo en la energía, en un intento de ver qué correlación hay, si es que la hay, entre Γ y los valores medios complejos de los operadores.

Para estos casos, los parámetros que variarán serán, mayormente, V_{0ws} y a_{ws} .

5.3.1 Núcleos con carozos de capas cerradas

En esta subsección se tratarán dos núcleos, el ^{17}O y el ^{13}Be . En ellos, los neutrones de los carozos ^{16}O y ^{12}Be , en estado fundamental, ocuparán los dos estados de $1s_{1/2}$, los cuatro $1p_{3/2}$ y los dos $1p_{1/2}$ de la figura 1.1. Por esto, estos núcleos carozo son llamados núcleos de *capas cerradas* ya que sus neutrones completan las capas que ocupan. En el caso del ^{16}O , se dice que es un núcleo de *doble capa cerrada*, dado que los protones también llenan sus respectivas capas [45]. En ambos casos, el neutrón de valencia debe ocupar el estado $1d_{5/2}$, de la siguiente capa. Para estos dos núcleos en cuestión, se obtuvieron resultados similares en todas las magnitudes calculadas, por eso se presentarán juntos.

Antes de presentar los resultados para las magnitudes definidas en la sección 5.2, se va a exponer la forma de las funciones de onda calculadas por el programa para los primeros estados del ^{17}O , sobre todo para ver explícitamente cómo es la función de onda de una resonancia.

Si bien en este trabajo no se busca reproducir resultados empíricos, dado que el estado fundamental experimental del ^{17}O es ligado, lo que lo hace un núcleo estable, se pueden encontrar los valores para los parámetros en los potenciales de manera que reproduzcan los datos medidos para el estado fundamental de este núcleo. Estos últimos se tomarán de [46].

Primero, hay que identificar la energía de separación de un neutrón S_n . Esta es la

Estado	E (MeV)	E_{exp} (MeV)
$1d_{5/2}$	-4,143	-4,143
$2s_{1/2}$	-3,276	-3,273
$1d_{3/2}$	$0,939 - 0,06i$	$0,943 - 0,09i$
$1f_{7/2}$	$6,553 - 1,28i$	-

Tabla 5.1: Valores calculados y experimentales de los niveles de energía del ^{17}O

energía necesaria para desprender el neutrón del núcleo desde su estado fundamental, o sea, para pasar de tener ^{17}O a ^{16}O más un neutrón libre, siempre con los núcleos en sus respectivos estados fundamentales, y es definida positiva.

Así, el estado fundamental del núcleo de ^{17}O se dará cuando el neutrón de valencia, en el estado $1d_{5/2}$, tenga una energía $-S_n$. Para el ^{17}O , $S_n = 4,143 \text{ MeV}$ [46]. Esto se da cuando los parámetros toman los siguientes valores: $V_{0ws} = 52,832 \text{ MeV}$, $V_{0so} = 13,492 \text{ MeV}$ y $a_{ws} = a_{so} = 0,7 \text{ fm}$.

En la tabla 5.1, se muestran los valores de los primeros cuatro niveles, con los parámetros que reproducen la energía del estado fundamental experimental, cotejados con sus correspondientes valores experimentales.

Como ya se ve en las energías, los primeros dos estados son ligados. En la figura 5.1 se pueden ver sus funciones de onda, que muestran claramente el carácter ligado de los estados.

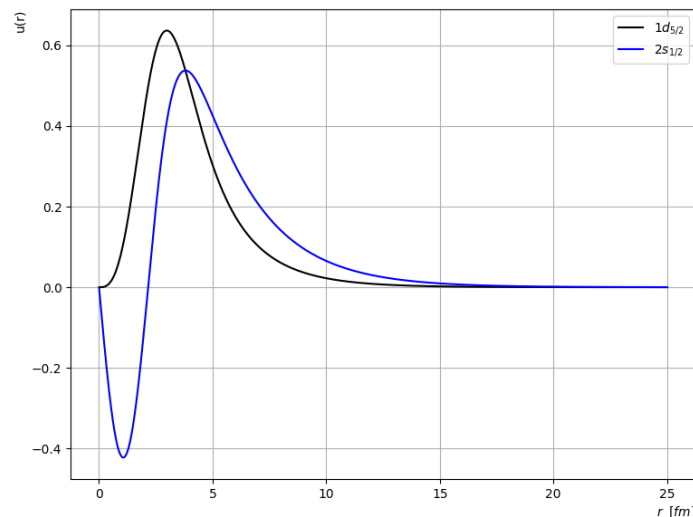


Figura 5.1: Función de onda radial para el estado fundamental y primer estado excitado del neutrón de valencia

Los siguientes dos estados son los resonantes. En la figura 5.2, se muestra la función de onda para la resonancia del estado $1d_{3/2}$. Es una resonancia angosta, siendo la parte

real de la energía quince veces, aproximadamente, más grande que la imaginaria. Cosa que se refleja en la función de onda. La parte real muestra una distribución localizada dentro del núcleo pero tanto la parte imaginaria como la parte real empiezan a mostrar su comportamiento oscilante al alejarse del mismo.

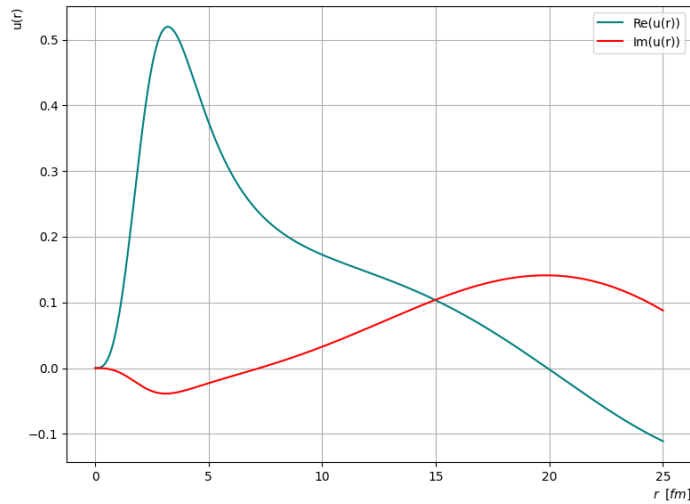


Figura 5.2: Partes real e imaginaria de la función de onda radial para el estado $1d_{3/2}$

La situación es distinta para el estado $1f_{7/2}$, donde la parte real de la energía es sólo cinco veces mayor a la imaginaria y se ve que las correspondientes partes en la función de onda son similares en magnitud. También se ve el carácter oscilatorio modulado por una exponencial de la resonancia, esto se muestra en la figura 5.3.

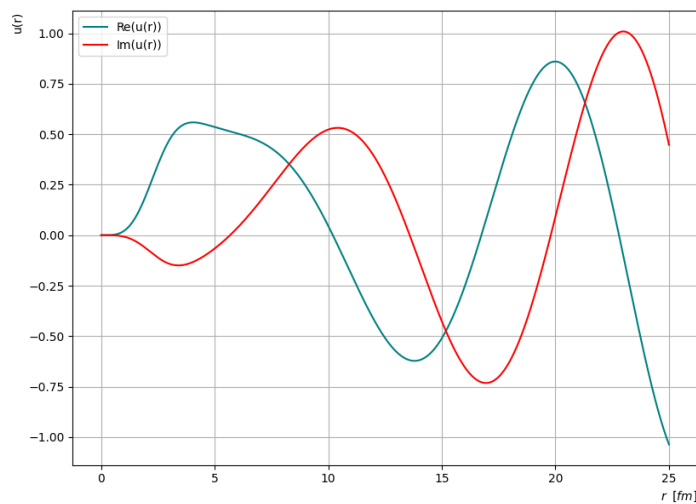


Figura 5.3: Partes real e imaginaria de la función de onda radial para el estado $1f_{7/2}$

A partir de acá, se mostrarán los valores de los polos de S , $\langle r^2 \rangle$ y R_{rms} para variaciones

en la intensidad V_{0ws} y la difusividad a_{ws} , dejando los otros parámetros fijos.

Para el ^{13}Be , los valores de los parámetros en el potencial que quedan fijos son $V_{0so} = 13,492 \text{ MeV}$ y $a_{so} = 0,7 \text{ fm}$. Para este caso, $R_{rms}(^{16}\text{O}) = 2,54 \text{ fm}$ [43]. Y para el ^{13}Be , $a_{so} = 0,7 \text{ fm}$, $V_{0so} = 14 \text{ MeV}$ y $R_{rms}(^{12}\text{Be}) = 2,5 \text{ fm}$ [43].

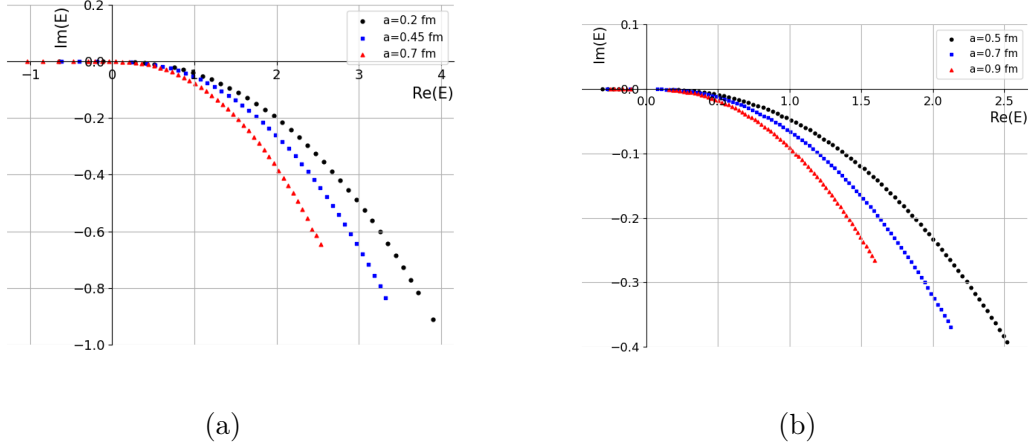


Figura 5.4: Ubicación de los autovalores de energía (en MeV) del ^{17}O en (a) y el ^{13}Be en (b), para las distintas difusividades, parametrizados en la intensidad del Woods-Saxon V_{0ws}

En la figuras 5.4, (a) y (b), se muestran las ubicaciones de los polos de S correspondiente al estado fundamental en MeV para el ^{17}O y el ^{13}Be , parametrizada en V_{0ws} para tres valores de difusividad.

Cada trayectoria corresponde a un dado valor de a_{ws} , a partir de ahora simplemente a y cada punto corresponde a un valor distinto de V_{0ws} . El rango de variación de esta intensidad es en general distinto para cada a . Las ramas roja, azul y negra corresponden a difusividades de $0,7 \text{ fm}$, $0,45 \text{ fm}$ y $0,2 \text{ fm}$ para el ^{17}O y $0,5 \text{ fm}$, $0,7 \text{ fm}$ y $0,9 \text{ fm}$ para el ^{13}Be , respectivamente.

Por la forma de estas trayectorias, puede decirse que $|\text{Im}(E)|$ aumenta con $\text{Re}(E)$, con lo cuál hablar de una energía con parte real grande ya implica que la resonancia sea ancha y lo propio para un parte real pequeña.

Las energías con partes imaginarias más grandes corresponden a los valores más bajos de V_{0ws} , es decir, los que hacen al potencial menos atractivos. Contrariamente, las energías negativas (ligadas) resultan de los valores más altos de ese parámetro.

En las figuras 5.5, se muestra la razón $\left| \frac{\text{Im}(E)}{\text{Re}(E)} \right|$ en función de V_{0ws} . Puede verse que ese ratio disminuye linealmente con el potencial hasta anularse. Que se anule implica que el estado pase de resonante a ligado a un dado valor V'_{0ws} de la intensidad de Woods-Saxon. Así $\left| \frac{\text{Im}(E)}{\text{Re}(E)} \right| \rightarrow 0$ cuando $V_{0ws} \rightarrow V'_{0ws}$.

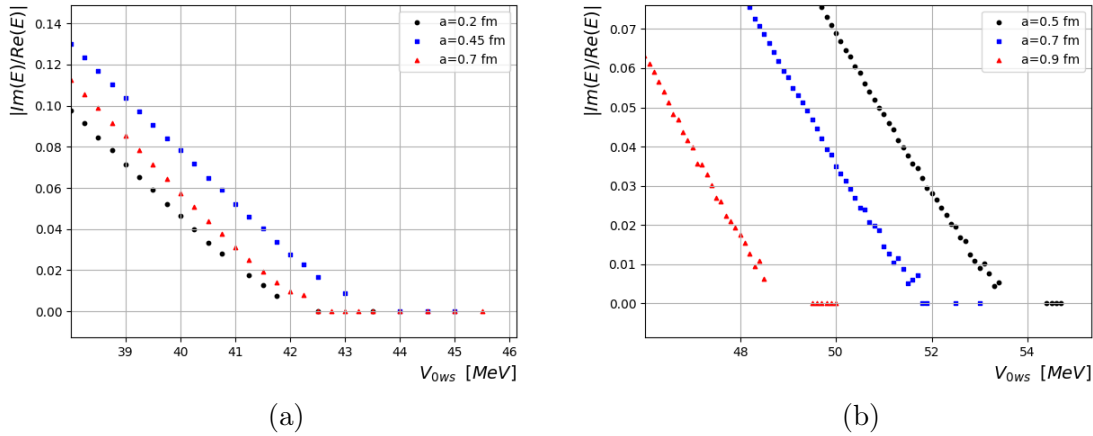


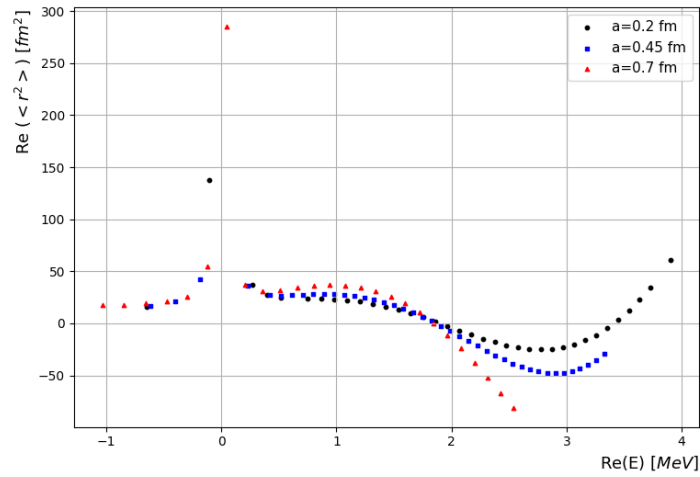
Figura 5.5: Ratio entre las partes de la energía en función de la intensidad de Woods-Saxon, en (a) para el ^{17}O y en (b) para el ^{13}Be

Para el ^{17}O , esto ocurre para $V'_{0ws} \approx 42,5 \text{ MeV}$ para $a = 0,2 \text{ fm}$ y $0,7 \text{ fm}$ y $V'_{0ws} \approx 43,5 \text{ MeV}$ para $a = 0,45 \text{ fm}$. En el caso del ^{13}Be , la situación es más diferenciada según la difusividad. Las energías resonantes se vuelven ligadas cuando $V'_{0ws} \approx 49,5 \text{ MeV}$, $51,8 \text{ MeV}$ y $54,4 \text{ MeV}$ para $a = 0,9 \text{ fm}$, $0,7 \text{ fm}$ y $0,5 \text{ fm}$, respectivamente. Para el ^{13}Be , difusividades más grandes hacen que la intensidad del Woods-Saxon sea menor para que el estado resonante se haga ligado y esta transición no se da suavemente, como sí ocurre para el ^{17}O .

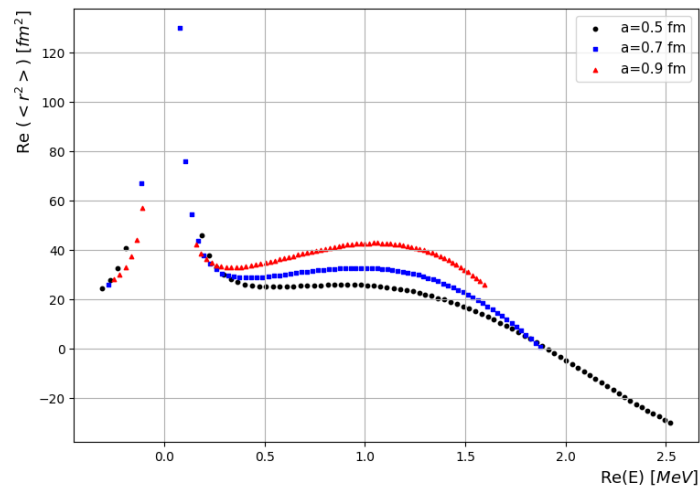
En la figura 5.6, se muestra la dispersión de la parte real del valor medio de r^2 (valor medio físico) en cada uno de los estados en función del valor real de la energía para estos dos núcleos. Ambos presentan un comportamiento muy similar. Los puntos con abscisa negativa corresponden a estados ligados (para estos $\langle r^2 \rangle$ es real) y los demás a las resonancias.

En ambos núcleos se observan picos en el umbral (energía cero). Esto es distinto de lo que se obtiene en [42], donde la transición de los valores resonantes a los ligados se da suavemente.

En un entorno del umbral ($[-1; 2] \text{ MeV}$ para el ^{17}O y $[-0,3; 0,4] \text{ MeV}$ para el ^{13}Be) los valores para $\text{Re}(\langle r^2 \rangle)$ son muy semejantes para las tres difusividades calculadas y comienzan a diferenciarse a medida que $\text{Re}(E)$ aumenta. Para el ^{17}O , el radio tiene un valor bastante estable para un rango amplio de resonancias y aumenta rápidamente cuando se acerca al umbral. El comportamiento cualitativo es el mismo para potenciales agudos o difusos, en un amplio rango de energías. A diferencia del oxígeno, para el ^{13}Be , los valores del radio están un poco más diferenciados según la difusividad.



(a) Parte real del radio cuadrático del neutrón de valencia en función de la parte real de la energía para el ^{17}O



(b) Parte real del radio cuadrático del neutrón de valencia en función de la parte real de la energía para el ^{13}Be

Figura 5.6

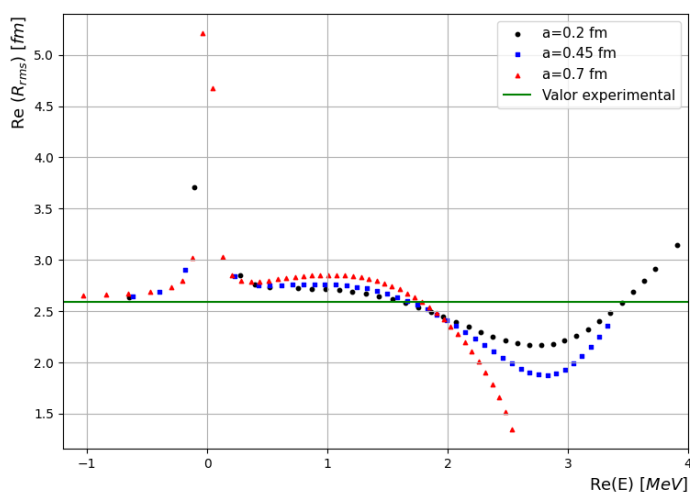
También puede verse que surgen valores negativos de $\text{Re}(\langle r^2 \rangle)$ para resonancias anchas [47], por ejemplo, a partir de $\text{Re}(E) = 2\text{MeV}$ para el ^{17}O , esto se debe a que la parte imaginaria de la función de onda toma valores del mismo orden que la parte real, como se observó para el estado $f_{7/2}$ en la figura 5.3. Estos no pueden interpretarse como el valor medio físico de r^2 , según las definiciones de la sección 5.1, ya que físicamente es una magnitud definida positiva.

En la figura 5.7, se muestra la parte real del radio cuadrático medio en función de $\text{Re}(E)$ para los dos núcleos completos. Dado que el ^{17}O es el único de los núcleos analizados cuyo estado fundamental empírico es ligado, en (a), la línea verde horizontal

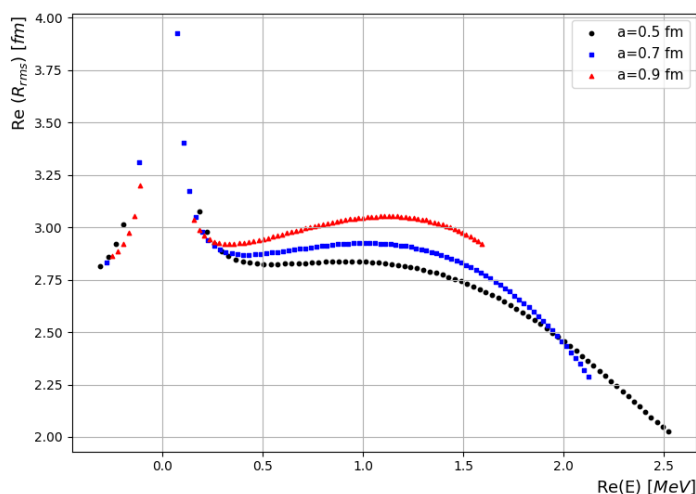
marca el valor experimental de su radio cuadrático medio, que es de $2,59 \text{ fm}$.

Dado que R_{rms} se calcula usando (5.19), los resultados son similares a los que se obtuvieron para $\langle r^2 \rangle$ y las interpretaciones de los mismos son análogas. Para $\text{Re}(R_{rms})$ también hay un pico en la transición entre energías resonantes a ligadas y los valores se van diferenciando según la difusividad a medida que la parte real de la energía aumenta.

Lo diferente respecto a lo anterior es que, en este caso, no ocurre que $\text{Re}(R_{rms})$ tome valores negativos. Por lo cual, en principio, podría mantenerse la interpretación de $\text{Re}(R_{rms})$ como valor medio físico para el rango de energías calculado.



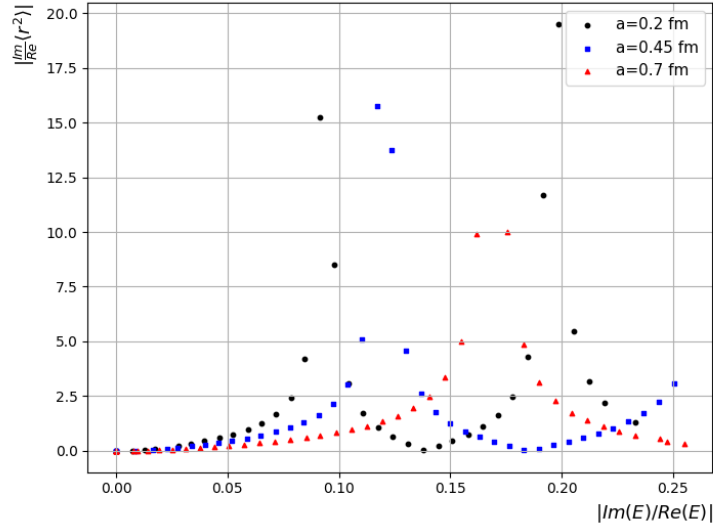
(a) Parte real del R_{rms} del núcleo completo de ^{17}O en función de $\text{Re}(E)$



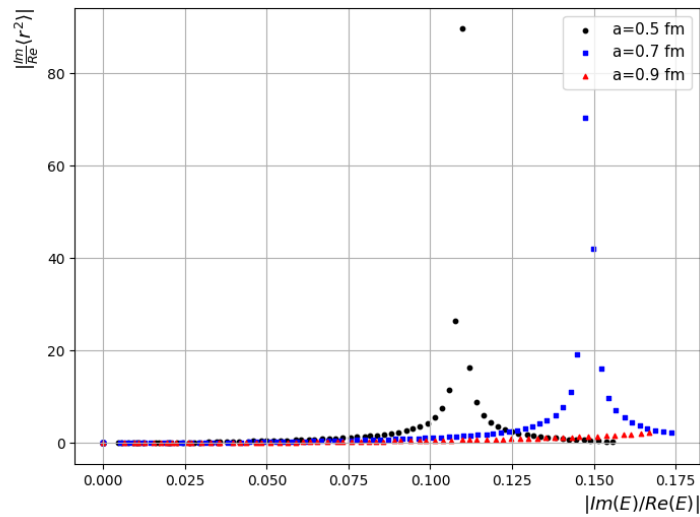
(b) Parte real del R_{rms} del núcleo completo de ^{13}Be en función de $\text{Re}(E)$

Figura 5.7

En la figura 5.8, se presenta la incerteza relativa de r^2 , $\frac{\text{Im}}{\text{Re}}(\langle r^2 \rangle)$, como función de la incerteza relativa en la energía ($\Gamma/2E$), en valores absolutos. Se ve que tiende a cero cuando $|\Gamma/2E| \rightarrow 0$.



(a) Ratio de parte imaginaria y real de $\langle r^2 \rangle$ en función de $|\Gamma/2E|$ para el ^{17}O



(b) Ratio de parte imaginaria y real de $\langle r^2 \rangle$ en función de $|\Gamma/2E|$ para el ^{13}Be

Figura 5.8

Además, para ciertas energías, existen picos en la misma debido al carácter resonante del estado. Para el ^{17}O , se ve ((a) de la figura 5.8) que estos picos aumentan su frecuencia de aparición a medida que se reduce la difusividad. En el caso del ^{13}Be , se encontró un sólo pico para dos de las tres difusividades estudiadas. Este se da en

una incerteza relativa en la energía cada vez mayor a medida que crece la difusividad y su magnitud aumenta cuando a decrece.

Otro factor a tener en cuenta es la magnitud de estos valores para la interpretación física de las cantidades complejas. Tanto en el ^{17}O como en el ^{13}Be hay incertezas relativas muy grandes, llegando al orden de la decena en los picos, que harían inviable una eventual medición experimental. Notar, también, que esto puede ocurrir incluso para resonancias angostas.

5.3.2 Núcleos halo

Ahora, se presentarán los resultados para los núcleos de ^5He y ^{11}Be , que entran dentro de las categoría de halos definida en el capítulo 1.

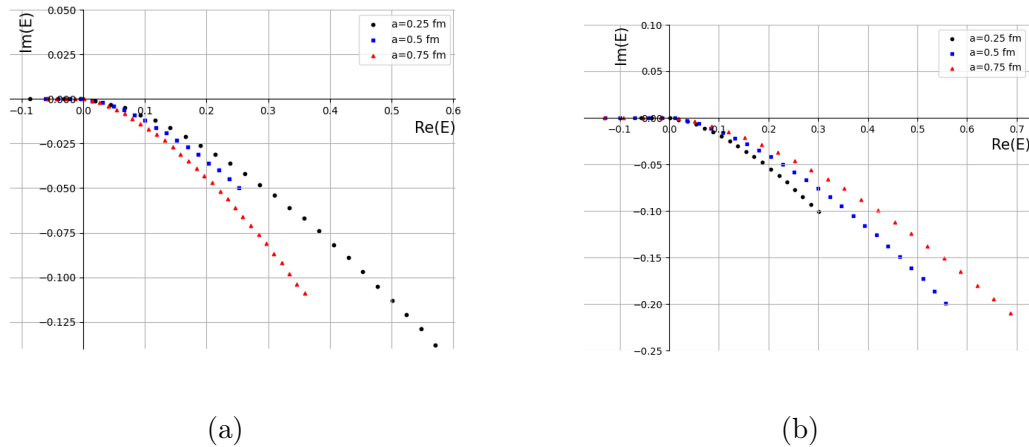


Figura 5.9: Ubicación de los autovalores de energía (MeV) del ^5He en (a) y el ^{11}Be en (b), para las distintas difusividades.

Para el núcleo de ^5He , el neutrón de valencia ocupa el estado $1p_{3/2}$. Se fijaron $V_{0so} = 14$ MeV, $a_{so} = 0,7$ fm y el radio del carozo $R_{rms}(^5\text{He}) = 2,3$ fm [43].

En el caso del ^{11}Be , se usaron, como en el ^{13}Be , los parámetros $V_{0so} = 14$ MeV y $a_{so} = 0,7$ fm fijos. El estado a ocupar por el neutrón será el $1p_{1/2}$ y se usó el radio del carozo $R_{rms}(^{10}\text{Be}) = 2,3$ fm [43].

En la figura 5.9, se muestran los autovalores de energía obtenidos para estos núcleos. Como en la subsección anterior, cada trayectoria corresponde a una dada a_{ws} mientras que V_{0ws} varía. Se observa que las trayectorias están invertidas una respecto a la otra, es decir, el ^5He da un ancho más grande cuando la difusividad es mayor mientras que para el ^{11}Be , el ancho es mayor cuando la difusividad del potencial es menor.

En las figuras 5.10, también se muestra la incerteza relativa en la energía como función

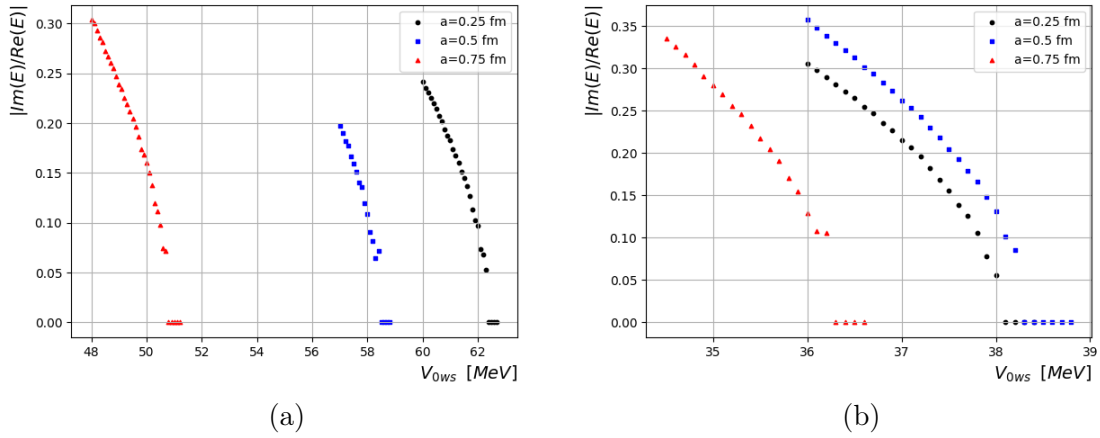


Figura 5.10: *Ratio entre las partes de la energía en función de la intensidad de Woods-Saxon, en (a) para el ${}^5\text{He}$ y en (b) para el ${}^{11}\text{Be}$*

de V_{0ws} . Este ratio también disminuye hasta anularse a medida que el potencial se hace más atractivo pero esta disminución es mucho menos lineal que las dos anteriores, sobre todo en el caso del ${}^{11}\text{Be}$.

Para el ${}^5\text{He}$, $V'_{0ws} \approx 50,8 \text{ MeV}$, $58,5 \text{ MeV}$ y $62,4 \text{ MeV}$ para $a = 0,75 \text{ fm}$, $0,5 \text{ fm}$ y $0,25 \text{ fm}$, respectivamente. En el caso del ${}^{11}\text{Be}$, $V'_{0ws} \approx 36,3 \text{ MeV}$, $38,1 \text{ MeV}$ y $38,3 \text{ MeV}$ para $a = 0,75 \text{ fm}$, $0,25 \text{ fm}$ y $0,5 \text{ fm}$, respectivamente.

En la figura 5.11, se muestra la parte real del radio cuadrático del neutrón en función de la parte real de la energía. El comportamiento de estos núcleos es muy similar entre sí pero diferente de los de la subsección 5.3.1.

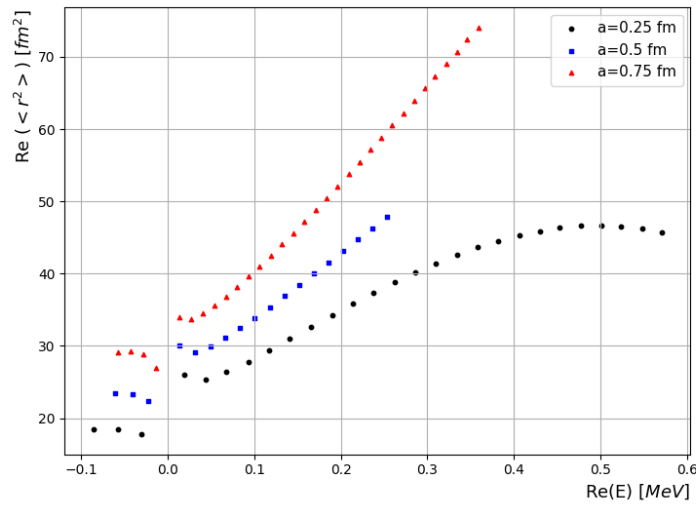
En ambos casos, se ve que el el radio cuadrático es creciente con la difusividad. En [42], se calcula el valor $\langle r^2 \rangle$ pero para un potencial de pozo cuadrado con barrera. En nuestro caso, el potencial utilizado tiende a pozo cuando $a_{ws} \rightarrow 0$ y para la difusividad más pequeña ($a = 0,25 \text{ fm}$) la aparición de un claro valor máximo en $\langle r^2 \rangle$ a una dada energía es compatible con los resultados de [42].

Para estos núcleos halo, los valores no se acercan a un pico en la energía cero como antes; sin embargo, la transición de valores resonantes a ligados tampoco es “continua”. Los radios tienden a valores diferentes a ambos lados del umbral, cosa que no ocurre en [42], donde la transición es continua, probablemente debido a la elección de parámetros en dicha referencia. En nuestros cálculos, el único caso que tiende a mostrar una continuidad es el ${}^{11}\text{Be}$ para $a = 0,75 \text{ fm}$.

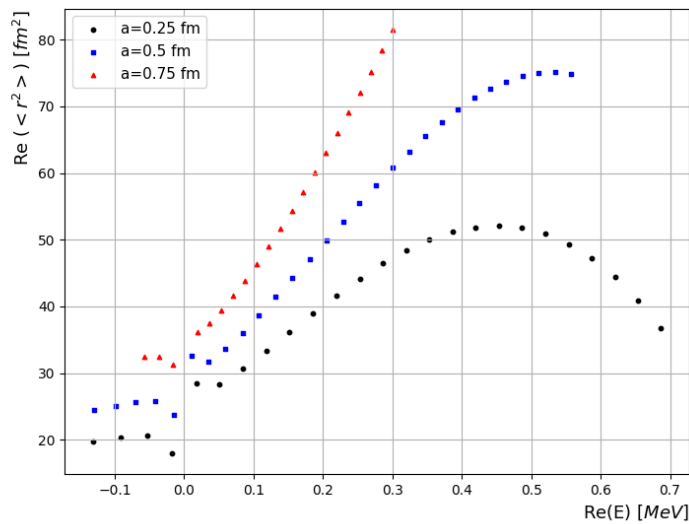
Todos los valores obtenidos son positivos, con lo cuál serían admisibles físicamente.

En la figura 5.12, se muestra la parte real del radio cuadrático medio en función de $\text{Re}(E)$ para los núcleos halo completos. En este caso, las interpretaciones del mismo

son totalmente análogas al $\langle r^2 \rangle$.



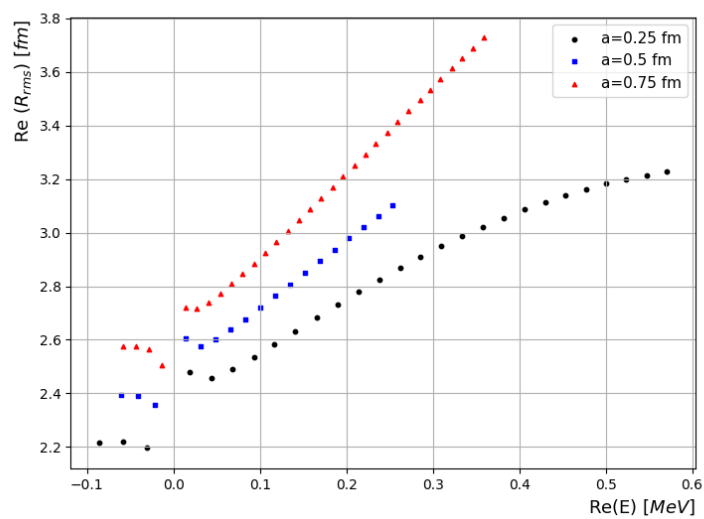
(a) Parte real del radio cuadrático del neutrón de valencia en función de la parte real de la energía para el ${}^5\text{He}$



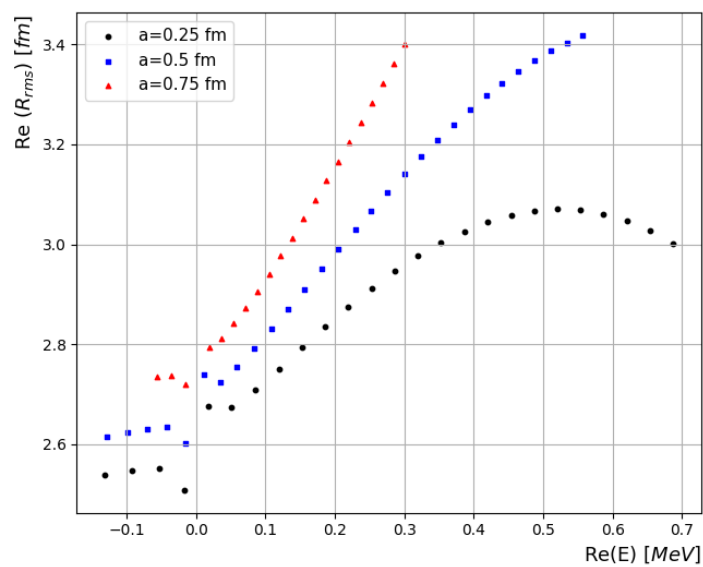
(b) Parte real del radio cuadrático del neutrón de valencia en función de la parte real de la energía para el ${}^{11}\text{Be}$

Figura 5.11

En la figura 5.13, se muestra otra vez la incerteza relativa del radio en función de $\Gamma/2E$. Para estos núcleos también hay picos donde la incerteza en el radio es máxima aunque no son tan pronunciados como los correspondientes a los núcleos con carozos de capas cerradas. Al mismo tiempo, luego del pico, esta crece al aumentar el ancho de la resonancia y no tiende a cero como ocurre en los núcleos de la subsección 5.3.1.

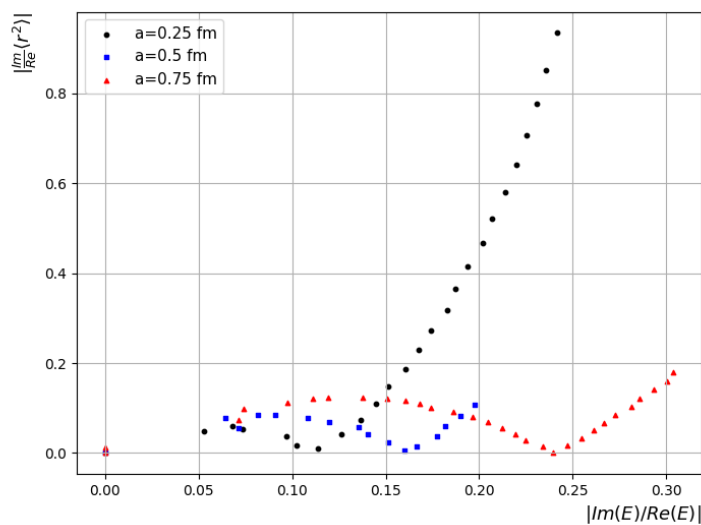


(a) *(a) Parte real del radio cuadrático del neutrón de valencia en función de la parte real de la energía para el ${}^5\text{He}$*

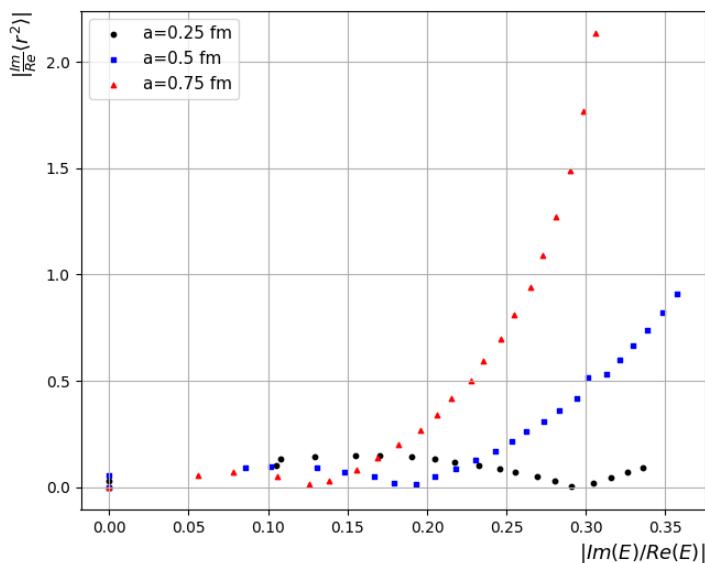


(b) *(b) Parte real del radio cuadrático del neutrón de valencia en función de la parte real de la energía para el ${}^{11}\text{Be}$*

Figura 5.12



(a) Ratio de parte imaginaria y real de $\langle r^2 \rangle$ en función de $|\Gamma/2E|$ para el ${}^5\text{He}$



(b) Ratio de parte imaginaria y real de $\langle r^2 \rangle$ en función de $|\Gamma/2E|$ para el ${}^{11}\text{Be}$

Figura 5.13

5.4 Discusión

Las diferencias encontradas entre los núcleos ${}^{17}\text{O}$ y ${}^{13}\text{Be}$ es debido sólo al carácter doblemente mágico del primero. O sea, la capa no cerrada de protones afecta de forma diferente al neutrón de valencia en el mismo estado fundamental $d_{5/2}$ de ambos núcleos.

Se obtuvo para todos los casos que el ratio $\left| \frac{\text{Im}}{\text{Re}} \langle r^2 \rangle \right| \rightarrow 0$ cuando $\left| \frac{\text{Im}}{\text{Re}}(E) \right| \rightarrow 0$. Estos resultados están en consonancia con los de [42]. Aunque en ese artículo, obtienen que en los resultados de $\text{Re}(\langle r^2 \rangle)$ en función de $\text{Re}(E)$, el paso de valores resonantes a ligados es suave, cosa que no ocurre en los resultados de (5.3), sino que hay una clara discontinuidad para el ^{11}Be y ^5He y un pico para el ^{13}Be y el ^{17}O . En principio, esto sería atribuible al haber usado potenciales y momentos diferentes. Tanto los picos como la discontinuidad cerca de la energía cero, pueden estar relacionados con los *Wigner cusps* [22], que son picos o discontinuidades en ciertas magnitudes que se dan cerca del umbral del continuo de energía.

Para los núcleos cuyos neutrones de valencia tienen el mismo momento angular orbital se obtuvieron resultados similares. Para el ^{13}Be y el ^{17}O , según las interpretaciones de la sección 5.1, hay un valor máximo de incerteza relativa en el radio cuadrático, dado por los picos que pueden verse en las figuras 5.6. Esto está también en acuerdo con [42]. Estos picos no son tan pronunciados para el ^{11}Be y el ^5He pero la incerteza relativa en el $\langle r^2 \rangle$ crece a medida que las resonancias se vuelven más anchas. Esta es una primera dificultad en el uso de estas interpretaciones, muchas resonancias, especialmente las anchas, resultan en incertezas desproporcionadas respecto de los valores medios de los observables, lo que haría inviable una eventual evaluación experimental. Para estos casos, dichas interpretaciones perderían validez.

Errores relativos grandes pueden verse en [49, 48], donde se usa este criterio para otras magnitudes.

En [48], donde se estudia el estado resonante 0_2^+ del ^4He . Este está $0,41 \text{ MeV}$ sobre el umbral de decaimiento con emisión de protón $^3\text{He} + p$, por lo que siempre decae emitiendo un protón, y $0,37 \text{ keV}$ y $3,64 \text{ MeV}$ debajo de los umbrales de decaimiento $^3\text{He} + n$ y $^2\text{He} + ^2\text{He}$, respectivamente. En el paper se usa el acople de estos tres canales de reacción y se calcula el número de ocupación a_c^2 para cada uno. En la figura 5.14, pueden verse las partes real e imaginaria de a_c^2 en función de $\Delta E_{th} = E - E_{thr}$, donde E_{thr} es la energía del umbral de decaimiento $^3\text{He} + p$ y E la parte real de la energía, usada como variable.

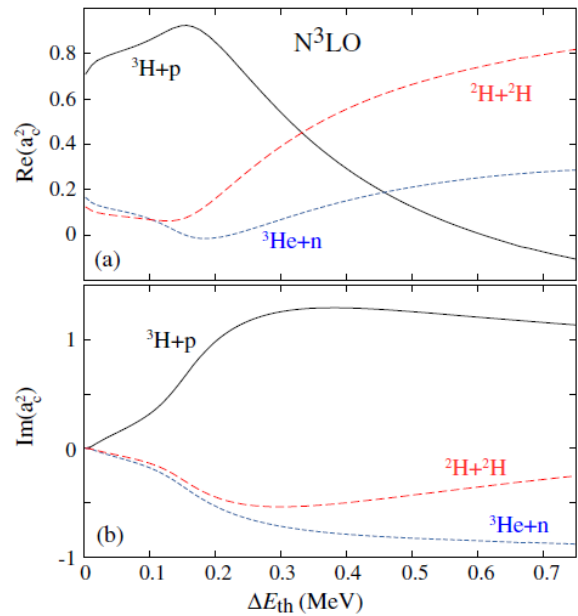


Figura 5.14: Número de ocupación $\text{Re}(a_c^2)$ arriba y su incerteza $\text{Im}(a_c^2)$ abajo en función de la energía ΔE_{th} para tres casos. Tomado de [48]

Se ve que para la mayor parte del intervalo de energías considerado, la incerteza ($\text{Im}(a_c^2)$) es del mismo orden del valor medio $\text{Re}(a_c^2)$, excepto para ΔE_{th} pequeños, o sea, energías cercanas al umbral de emisión de protón. Al aumentar E , también aumenta su respectiva parte imaginaria y puede verse que al aumentar el ancho, la incerteza también se vuelve exageradamente grande.

Un segundo impedimento para usar los criterios de interpretación es la aparición de valores medios negativos para observables, en principio, definidos positivos [47]. Esto puede verse en las figuras 5.6. También ocurre en [48], dado que el valor medio de a_c^2 , $\text{Re}(a_c^2)$, toma valores negativos (ver figura 5.14) a pesar de ser tradicionalmente definido positivo.

El tema de la interpretación de los observables complejos sigue siendo discutido y está lejos de ser saldado. Las propuestas de la sección 5.1 (Berggren, Bohm y Michel) no son definitivas y, por ahora, son sólo teóricas.

Capítulo 6

Conclusiones

El presente trabajo tuvo como objetivo el estudio de la representación espectral de Berggren dedicada a describir sistemas cuánticos abiertos, específicamente nucleares en estados resonantes. Se analizaron las consecuencias de su implementación mediante el cálculo de valores medios de algunos observables en estos estados y se expusieron sus fortalezas y limitaciones.

Primero, se desarrolló el modelo de capas con campo medio para describir la estructura de los núcleos, utilizando la aproximación de partícula simple.

Luego, se estudió en profundidad la teoría cuántica de dispersión para poder arribar al concepto de resonancia y su vínculo con los núcleos que decaen hasta alcanzar la representación de Berggren y otras representaciones adicionales. Todas con el mismo espíritu; utilizar estados del continuo complejo y resonantes para expandir otros estados.

En el proceso, se llegó a los límites del formalismo de Dirac, siendo necesario extender la matemática convencional de la mecánica cuántica para darle un marco correcto y riguroso a los estados resonantes. Para esto, se incluyó la teoría de Espacios de Hilbert Equipados (RHS).

Después, se utilizó el programa Gamow para calcular la energía, el valor medio del operador r^2 y el radio cuadrático medio del núcleo R_{rms}^2 en los estados fundamentales de los núcleos de ^{17}O , ^{13}Be , ^{11}Be y ^5He , comparando con publicaciones anteriores. Los parámetros de los potenciales fueron variados de forma que estos estados fundamentales tomen valores tanto ligados como resonantes, especialmente resonantes. Y allí se exploró el concepto de valores medios complejos, sus posibles interpretaciones y los problemas surgidos de las mismas.

Todas las interpretaciones expuestas tienen la misma esencia; asociar la parte real del valor medio con la “cantidad física” y relacionar la parte imaginaria con una

incerteza adicional natural a las resonancias. A los problemas de praxis de estas interpretaciones, referenciados en 5.4, se le suman algunos problemas de fondo, como la dependencia de la matemática utilizada o la falta de un criterio unificado. Un avance en este sentido podría ser encontrar una definición más precisa, conceptualmente clara, de estas magnitudes y el diseño de experimentos específicos que le den sustento empírico. Un adicional interesante sería encontrar que conexión tendría esta incerteza con la incerteza cuántica tradicional.

Bibliografía

- [1] Samuel SM Wong. *Introductory nuclear physics*. John Wiley & Sons, 1998.
- [2] Isao Tanihata, Hiroshi Toki y Toshitaka Kajino. *Handbook of nuclear physics*. Springer Nature, 2023.
- [3] I Tanihata et al. “Measurements of interaction cross sections and nuclear radii in the light p-shell region”. En: *Physical Review Letters* 55.24 (1985), pág. 2676.
- [4] MV Zhukov et al. “Bound state properties of Borromean halo nuclei: ^6He and ^{11}Li ”. En: *Physics reports* 231.4 (1993), págs. 151-199.
- [5] Jouni Suhonen. *From nucleons to nucleus: concepts of microscopic nuclear theory*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [6] Amos De-Shalit e Igal Talmi. *Nuclear shell theory*. Vol. 14. Academic Press, 2013.
- [7] John R Taylor. *Scattering theory, the quantum theory on nonrelativistic collisions*. 1972.
- [8] Roger G. Newton. *Scattering Theory of Waves and Particles*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1982.
- [9] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics (Revised Edition)*. 1.^a ed. Addison Wesley, sep. de 1993. ISBN: 0201539292.
- [10] B. H. Bransden y C. J. Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*. Harlow, England: Pearson Education Limited, 2003.
- [11] Roger G. Newton. “Analytic Properties of Radial Wave Functions”. En: *Journal of Mathematical Physics* 1.4 (1 de jul. de 1960), págs. 319-347.
- [12] WJ Romo. “Asymptotic forms of radial wavefunctions and Jost functions for cutoff potentials”. En: *Journal of Mathematical Physics* 20.6 (1979), págs. 1210-1224.
- [13] Gaute Hagen. “The Contour Deformation Method in Momentum Space, and Effective Interactions for Weakly Bound Nuclei”. Tesis doct. University of Bergen, 2005.
- [14] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopol'sky y J. Horáček. *Theory of Resonances*. Dordrecht: Springer Netherlands, 1989.
- [15] George Gamow. “Zur quantentheorie des atomkernes”. En: *Zeitschrift für Physik* 51.3 (1928), págs. 204-212.
- [16] N Michel et al. “Shell model in the complex energy plane”. En: *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* 36.1 (1 de ene. de 2009), pág. 013101.

-
- [17] A. J. F. Siegert. “On the Derivation of the Dispersion Formula for Nuclear Reactions”. En: *Phys. Rev.* 56, 750 (1939).
- [18] J Humblet y L Rosenfeld. “Theory of nuclear reactions: I. Resonant states and collision matrix”. En: *Nuclear Physics* 26.4 (1961), págs. 529-578.
- [19] Tore Berggren. “On the use of resonant states in eigenfunction expansions of scattering and reaction amplitudes”. En: *Nuclear Physics A* 109.2 (feb. de 1968), págs. 265-287.
- [20] YA. B. Zel’Dovich. “On the theory of unstable states”. En: (1960).
- [21] B. Gyarmati y T. Vertse. “On the normalization of Gamow functions”. En: *Nuclear Physics A* 160.3 (ene. de 1971), págs. 523-528.
- [22] Nicolas Michel y Marek Płoszajczak. *Gamow Shell Model: The Unified Theory of Nuclear Structure and Reactions*. Lecture Notes in Physics. Cham: Springer International Publishing, 2021.
- [23] Tore Berggren. “Completeness relations, Mittag-Leffler expansions and the perturbation theory of resonant states”. En: *Nuclear Physics A* 389.2 (nov. de 1982), págs. 261-284.
- [24] Patric Lind. “Completeness relations and resonant state expansions”. En: *Physical Review C* 47.5 (1993), pág. 1903.
- [25] Tore Berggren y Patric Lind. “Resonant state expansion of the resolvent”. En: *Physical Review C* 47.2 (1 de feb. de 1993), págs. 768-778.
- [26] WJ Romo. “Resonant-state perturbation formalisms”. En: *Nuclear Physics A* 398.3 (1983), págs. 525-543.
- [27] RJ Liotta et al. “A representation to describe nuclear processes in the continuum”. En: *Physics Letters B* 367.1-4 (1996), págs. 1-4.
- [28] P Curutchet, T Vertse y RJ Liotta. “Resonant random phase approximation”. En: *Physical Review C* 39.3 (1989), pág. 1020.
- [29] R Id Betan et al. “Two-particle resonant states in a many-body mean field”. En: *Physical review letters* 89.4 (2002), pág. 042501.
- [30] N Michel et al. “Gamow shell model description of neutron-rich nuclei”. En: *Physical review letters* 89.4 (2002).
- [31] Tore Berggren. “On resonance contributions to sum rules in nuclear physics”. En: (1972).
- [32] WJ Romo. “Inner product for resonant states and shell-model applications”. En: *Nuclear Physics A* 116.3 (1968), págs. 617-636.
- [33] WJ Romo. “A numerical study of resonance contributions to nuclear sum rules”. En: *Nuclear Physics A* 237.2 (1975), págs. 275-284.
- [34] WJ Romo. “A study of the convergence of Mittag-Leffler expansions of the Green function and the off-shell scattering amplitude in potential scattering”. En: *Nuclear Physics A* 302.1 (1978), págs. 61-82.
- [35] Arno Böhm, Manuel Gadella y John D Dollard. “Dirac Kets, Gamow Vectors and Gel’fand triplets: the rigged Hilbert space formulation of quantum mechanics: lectures in mathematical physics at the University of Texas at Austin”. En: (No Title) (1989).

- [36] Arno Böhm. Quantum mechanics: foundations and applications. Springer Science & Business Media, 2013.
- [37] O. Civitarese y M. Gadella. “Physical and mathematical aspects of Gamow states”. En: Physics Reports 396.2 (2004), págs. 41-113.
- [38] Rafael de la Madrid Modino. “Quantum mechanics in rigged Hilbert space language”. Tesis doct. PhD thesis. Universidad de Valladolid, 2001.
- [39] Naomichi Hatano, Tatsuro Kawamoto y Joshua Feinberg. “Probabilistic interpretation of resonant states”. En: Pramana 73.3 (sep. de 2009), págs. 553-564.
- [40] Tore Berggren. “Expectation value of an operator in a resonant state”. En: Physics Letters B 373.1-3 (1996), págs. 1-4.
- [41] O Civitarese, M Gadella y R Id Betan. “On the mean value of the energy for resonant states”. En: Nuclear Physics A 660.3 (1999), págs. 255-266.
- [42] B. Gyarmati, F. Krisztinkovics y T. Vertse. “On the expectation value in Gamow state”. En: Physics Letters B 41.2 (sep. de 1972), págs. 110-112. (Visitado 11-03-2024).
- [43] A Ozawa, T Suzuki e Isao Tanihata. “Nuclear size and related topics”. En: Nuclear Physics A 693.1-2 (2001), págs. 32-62.
- [44] T Vertse, KF Pál y Z Baloch. “GAMOW, a program for calculating the resonant state solution of the radial Schroedinger equation in an arbitrary optical potential”. En: Computer Physics Communications 27.3 (1982), págs. 309-322.
- [45] Maria Goeppert Mayer. “The shell model”. En: Science 145.3636 (1964), págs. 999-1006.
- [46] <https://www.nndc.bnl.gov/>.
- [47] Takayuki Myo y Kiyoshi Katō. “Possible interpretation of the complex expectation values associated with resonances”. En: Physical Review C 107 (4 de ene. de 2023).
- [48] N Michel, W Nazarewicz y M Płoszajczak. “Description of the Proton-Decaying $0\ 2^+$ Resonance of the α Particle”. En: Physical Review Letters 131.24 (2023), pág. 242502.
- [49] Mengran Xie et al. “Spectroscopic factors of resonance states with the Gamow shell model”. En: Science China Physics, Mechanics & Astronomy 67.1 (2024), pág. 212011.

A. Sobre la teoría de dispersión

A.1 Deducción de la ecuación de Lippmann-Schwinger

Primeramente, un estado dado por $iG^+(t-t')|\psi(t')\rangle$ siendo $|\psi(t')\rangle$ solución de la ecuación de Schrödinger en (2.4) por la ecuación que define los operadores de Green dependientes del tiempo en (2.17), el primer estado cumple [8]:

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t'} \left[G^+(t-t') |\psi(t')\rangle \right] &= -i\frac{\partial G^+(t-t')}{\partial t'} |\psi(t')\rangle + G^+(t-t') |\psi(t')\rangle i\frac{\partial}{\partial t'} |\psi(t')\rangle \\ &= -\delta(t-t') |\psi(t')\rangle + G^+(t-t')V |\psi(t')\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Al integrar esta ecuación entre $-\infty$ y ∞ en t' y usando (2.20) se obtiene :

$$\begin{aligned} -|\psi_{in}(t)\rangle &= -|\psi(t)\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} G^+(t-t')V |\psi(t')\rangle dt' \\ |\psi(t)\rangle &= |\psi_{in}(t)\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} G^+(t-t')V |\psi(t')\rangle dt' \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Aplicando la transformada de Fourier a esta ecuación. como en (2.30):

$$|\psi(E)\rangle = |\psi_{in}(E)\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} e^{Eit} \int_{-\infty}^{\infty} G^+(t-t')V |\psi(t')\rangle dt' dt \quad (\text{A.3})$$

Haciendo al sustitución $u = t - t'$ y $du = dt$, el término integral será:

$$\int_{-\infty}^{\infty} G^+(u)e^{Eiu} du V \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t')\rangle e^{eit'} dt' = G^+(E)V |\psi(E)\rangle$$

Usando esto en (A.3), se obtiene:

$$|\psi(E)\rangle = |\psi_{in}(E)\rangle + G^+(E)V |\psi(E)\rangle \quad (\text{A.4})$$

Este estado es el que en el cuerpo principal fue llamado $|\psi^+(E)\rangle$. La deducción para $|\psi^-(E)\rangle$ es análoga pero comenzando en la ecuación (A.1) con $G^-(t)$.

Estados de dispersión como autovectores del hamiltoniano

Dado que los estados (2.30) son independientes del tiempo, su derivada respecto del mismo será cero:

$$\begin{aligned}
i \frac{d}{dt} |\psi(E)\rangle &= i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} (e^{Eit} |\psi(t)\rangle) dt \\
&= i \int_{-\infty}^{\infty} \left(E i e^{Eit} |\psi(t)\rangle + e^{Eit} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right) dt \\
&= -E \int_{-\infty}^{\infty} e^{Eit} |\psi(t)\rangle dt + i \int_{-\infty}^{\infty} e^{Eit} \frac{H}{i} |\psi(t)\rangle dt \\
&= -E |\psi(E)\rangle + H \int_{-\infty}^{\infty} e^{Eit} |\psi(t)\rangle dt \\
&= -E |\psi(E)\rangle + H |\psi(E)\rangle = 0
\end{aligned}$$

Entonces:

$$H |\psi(E)\rangle = E |\psi(E)\rangle \quad (\text{A.5})$$

Estos estados, transformados de Fourier de un estado solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (2.4), por su propia definición serán solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (A.5), o sea la ecuación de autovalores. La deducción para los estados libres *in/out* es análoga y se obtiene:

$$H_0 |\psi(E)\rangle = E |\psi_{in/out}(E)\rangle \quad (\text{A.6})$$

Estos estados no cumplen la condición (2.6) [7], ya que:

$$\begin{aligned}
&\lim_{t \rightarrow -\infty} \|U(t) |\psi(E)\rangle - U^0(t) |\psi_{in}(E)\rangle\| = \\
&\lim_{t \rightarrow -\infty} \|e^{-Hit} |\psi(E)\rangle - e^{-H_0 it} |\psi_{in}(E)\rangle\| = \\
&\lim_{t \rightarrow -\infty} \|e^{-Eit} |\psi(E)\rangle - e^{-Eit} |\psi_{in}(E)\rangle\| = \\
&\lim_{t \rightarrow -\infty} \|e^{-Eit}\| \| |\psi(E)\rangle - |\psi_{in}(E)\rangle \| = \\
&\| |\psi(E)\rangle - |\psi_{in}(E)\rangle \| \neq 0
\end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Es decir que no la cumplen por ser estacionarios (autovectores de H y H_0) por lo que evolucionan según e^{-Eit} y con mismo autovalor, por lo cual ese factor se convierte en una fase global dentro del calculo de la norma y resulta en la norma de una diferencia de estados que no depende del tiempo.

A.2 Sobre las funciones radiales

Estas expresiones para las distintas funciones radiales no serán deducidas ni demostradas pero son ilustrativas para ver ciertos comportamientos de las mismas, que fueron afirmados en el capítulo 2 sin mayores explicaciones.

Las funciones radiales regulares e irregulares pueden escribirse como [11] :

$$\varphi_l(k, r) = k^{-l-1} \hat{j}_l(kr) + 2m \int_0^r g'_l(k, r, r') V(r') \varphi_l(k, r') dr' \quad (\text{A.8})$$

$$f_{l\pm}(k, r) = h_l^\mp(kr) + 2m \int_r^\infty g''_l(k, r, r') V(r') f_{l\pm}(k, r') dr' \quad (\text{A.9})$$

Donde g'_l y g''_l son las funciones de Green, como lo eran las de (3.2.1) para la función de onda física, pero con otras condiciones de contorno, a los fines de la interpretación de esas fórmulas no necesitamos más datos sobre ellas.

De (A.2) puede verse que si $r \rightarrow 0$, la integral tiende a 0, dado que su extremo superior tiende al inferior. Así, cerca del origen, la solución regular es proporcional a la función de Riccati-Bessel. En la literatura sobre teoría de dispersión, esta es una de las formas usadas para definir la solución regular, distintas de la dada por Newton en [11], como la solución que cerca del origen cumple esa proporcionalidad.

Y de (A.9), se ve que si el potencial se anula idénticamente a partir de un cierto valor $r = R$, la integral en esa ecuación queda $\int_{r \geq R}^\infty 0 dr'$ y las $f_{l\pm}$ serán las de Riccati-Hankel para cualquier $r \geq R$.

B. Espacios

B.1 Espacio de Hilbert \mathcal{H}

Para una dada función de onda de una partícula sin spin, considerar aquellas que satisfacen [7]:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{r})|^2 dr^3 < \infty \quad (\text{B.1})$$

El conjunto de funciones que cumplen (B.1) es el conocido Espacio de funciones cuadrado integrables $L^2(\mathbb{R}^3)$. Es un espacio vectorial lineal y, en particular, un espacio de Hilbert. El espacio abstracto \mathcal{H} de vectores de estado o *kets*, del formalismo de Dirac, es definido en correspondencia con el anterior. A cada función de onda cuadrado integrable le corresponde un vector de estado en \mathcal{H} y viceversa. El producto interno entre kets también es definido en correspondencia con L^2 tal que:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) dr^3 \quad (\text{B.2})$$

La norma de un elemento se deriva de este producto interno, resultando en $\| |\psi\rangle \|_H = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$.

Vectores propios e impropios

El espacio \mathcal{H} puede tener bases discretas compuestas por **vectores propios** que son aquellos normalizables, es decir, de norma finita o puede tener bases continuas compuestas por **vectores impropios**, o *generalizados*, que son los que no pueden normalizarse pero los elementos de \mathcal{H} pueden expandirse en ellos.

Para una base ortonormal de vectores propios discretos $\{|n\rangle\}$, se cumple la condición de normalización (u ortonormalización):

$$\langle n' | n \rangle = \delta_{n'n} \quad (\text{B.3})$$

y:

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle \quad (\text{B.4})$$

Pero para una base continua $\{|\mathbf{n}\rangle\}$ su condición de “normalización” es:

$$\langle \mathbf{n}'|\mathbf{n}\rangle = \delta(\mathbf{n}' - \mathbf{n}) \quad (\text{B.5})$$

Tal que:

$$|\psi\rangle = \int \langle \mathbf{n}|\psi\rangle |\mathbf{n}\rangle d\mathbf{n} \quad (\text{B.6})$$

Estos vectores impropios, a veces llamados kets generalizados, pueden ser autovectores de un operador y que, por teorema de descomposición espectral, compongan una base. Por ejemplo, una base de interés son las ondas planas $|\mathbf{k}\rangle$, autovectores impropios del operador número de onda cumplen (B.5) y, en consecuencia, los estados de dispersión estacionarios cumplen:

$$\langle \mathbf{k}' + |\mathbf{k} + \rangle = \langle \mathbf{k}' | \Omega_+^\dagger \Omega_+ | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | \mathbf{1} | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (\text{B.7})$$

O sea, estos últimos cumplen con la condición de normalización para estados del continuo y serán base para espacio \mathcal{R} .

Otra base de interés es la base $\{|E, l, m\rangle\}$, utilizada para el desarrollo en ondas parciales de la sección 2.4, de autovectores comunes a H_0 , \mathbf{L}^2 y L_z . En este caso es una base híbrida, con una parte continua y una discreta, por lo la normalización es una combinación de (B.3) y (B.5), de forma que [9]:

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \delta(E' - E) \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (\text{B.8})$$

Y sus proyecciones sobre los vectores $|\mathbf{r}\rangle$ y $|\mathbf{k}\rangle$ valen:

$$\langle \mathbf{r} | E, l, m \rangle = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} \frac{\hat{j}_l(kr)}{r} Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B.9})$$

$$\langle \mathbf{k} | E, l, m \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}) \quad (\text{B.10})$$

Estos coeficientes, usados en el desarrollo (2.51) resulta en (2.52). Y:

$$\langle \mathbf{r} | E, l, m + \rangle = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} \frac{\psi_l^+(kr)}{r} Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B.11})$$

Usados en el desarrollo (2.54) permitiendo obtener (2.55). Por supuesto, $\psi_l^+(kr)$ y $\hat{j}_l(kr)$ son soluciones de la ecuación radial (2.49) para energías positivas con y sin potencial, respectivamente.

B.2 Definiciones adicionales

En seguida algunas definiciones sobre espacios, operadores y topologías usadas en el capítulo 4, tomadas de [35]:

Operador τ_Φ -continuo:

Un operador A con dominio Φ es τ_Φ -continuo si $\forall \{\varphi_\gamma\}$ sucesión en $\Phi / \varphi_\gamma \xrightarrow{\tau_\Phi} 0 \implies A\varphi_\gamma \xrightarrow{\tau_\Phi} 0$.

Operador Hilbert-Schmidt:

Un operador acotado y autoadjunto B es Hilbert-Schmidt si $B = \sum_k \lambda_k P_k$ con P_k proyecciones sobre los autoespacios finitodimensionales H_k y $\sum_k (|\lambda_k| \dim H_k)^2 < \infty$.

Funcional antilineal:

Un funcional antilineal $F : \Phi \rightarrow \mathbb{C} /$ es antilineal si $F(\alpha\varphi + \beta\psi) = \alpha^*F(\varphi) + \beta^*F(\psi)$.

Funcional τ_Φ -continuo:

Dado un funcional F en Φ si $\forall \varphi_\gamma \xrightarrow{\tau_\Phi} \varphi \implies F(\varphi_\gamma) \xrightarrow{\mathbb{C}} F(\varphi)$ se dice que F es τ_Φ continuo.

Convergencia débil en Φ^X :

Si $\{F_\gamma\}$ es una sucesión de funcionales con $F_\gamma \in \Phi^X$, $\forall \gamma \in \mathbb{N} /$ si $F_\gamma(\varphi) \xrightarrow{\mathbb{C}} F(\varphi)$ cuando $\gamma \rightarrow \infty \forall \varphi \in \Phi \implies F_\gamma \xrightarrow{\tau^X} F$. O sea, la convergencia en la imagen es la convergencia débil en Φ^X y le define la topología τ^X .

También, Φ^X es completo con τ^X . De forma que toda sucesión de Cauchy de operadores antilineales continuos converge con ese criterio.

Operador lineal continuo B^X (operadores sobre funcionales):

$B^X : \Phi^X \rightarrow \Phi^X$ es lineal continuo si cumple:

- a) $B^X(\alpha F_1 + \beta F_2) = \alpha B^X(F_1) + \beta B^X(F_2)$ linealidad
- b) $\forall \varphi \in \Phi, \exists K > 0 \wedge \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n \in \Phi / |\langle \varphi | B^X F \rangle| \leq K(|\langle \varphi_1 | B^X F \rangle| + |\langle \varphi_2 | B^X F \rangle| + \dots + |\langle \varphi_n | B^X F \rangle|)$ continuidad

Álgebra de operadores

Un espacio \mathcal{A} es un álgebra si y sólo si:

- i) \mathcal{A} es un espacio lineal con cuerpo \mathbb{C}
- ii) $\forall A, B, C \in \mathcal{A} \wedge \alpha \in \mathbb{C}$ está definido el producto AB entre operadores tal que:
- $AB \in \mathcal{A}$
 - $(AB)C = A(BC)$
 - $A(B + C) = AB + AC$
 - $(\alpha A)B = \alpha AB$
- iii) El espacio tiene el elemento unidad, tal que $\mathbf{1}A = A$

Sistema de operadores que conmutan:

Sea $\{A_k\}_{k=1}^N$ una colección de N operadores, esta es un sistema de operadores que conmutan si y sólo si:

1. $[A_i, A_j] = 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, N$
2. $\sum_{k=1}^N A_k^2$ es esencialmente autoadjunto

Estos operadores generan un álgebra \mathcal{A} . El sistema se dice *completo* si $\exists \varphi \in \Phi$ tal que el espacio $\{A\varphi / A \in \mathcal{A}\}$ genera \mathcal{H} .

Adjunto de un operador

Sea $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ lineal con $D(A) \subset \mathcal{H}$ y denso, se define:

$$D(A^\dagger) = \{f \in \mathcal{H} / \exists! g \in \mathcal{H} : (f, Ah) = (g, h) = (A^\dagger f, h) \quad \forall h \in D(A)\}$$

A^\dagger es el adjunto de A .

Operador cerrado y clausura

Sea A operador, este es cerrado si: $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f \wedge \lim_{n \rightarrow \infty} Af_n = g$ con $f_n \in D(A) \forall n \implies f \in D(A)$ y $Af = g$. Es una condición más débil que la continuidad.

Si también $\lim_{n \rightarrow \infty} h_n = f$ y $\lim_{n \rightarrow \infty} Ah_n = g' \implies g = g' \implies \exists [A]$ clausura de A , que es la extensión a \mathcal{H} de A y es un operador cerrado con dominio $D([A]) = \{f \in \mathcal{H} : \lim_n f_n = f \wedge \{Af_n\} \text{ converge}\}$

Operador esencialmente autoadjunto

Un operador A es esencialmente autoadjunto si su clausura $[A]$ es autoadjunto.

Espacio nuclear

Φ es un espacio nuclear si $\exists A$ esencialmente autoadjunto, τ_Φ continuo/ A^{-1} es Hilbert-Schmidt.

Transformada de Mellin

Sea una función $h(x)$ definida para \mathbb{R}^+ , se define su transformada de Mellin como la integral:

$$E(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty h(x)x^{is-1/2} dx \quad (\text{B.12})$$

La transformada $E(s)$ es una función extendida a toda la recta real, no solo a positivos como la función h , siempre que la integral exista, por supuesto.

B.3 Teoremas adicionales

A continuación algunos teoremas usados implícitamente también en el capítulo 4:

Teorema de Van Winter

Una función $h(x)$ definida en \mathbb{R}^+ , puede ser extendida a \mathbb{R}^- siendo esta extensión una función de Hardy en H_+ única, si y sólo si su transformada de Mellin (B.12) satisface:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (1 + e^{2\pi s}) |E(s)|^2 ds < \infty \quad (\text{B.13})$$

Si $h \in \mathcal{D}_+$ entonces siempre cumple (B.13), con lo cual a cada h le corresponde una única función de Hardy en H_+ . Este resultado es igualmente aplicable a \mathcal{D}_- y H_- .

Teorema de Titchmarsh

Sea $f(x) \in H_{\pm}$ entonces $f(z) \forall z \in \mathbb{C}^{\pm}$ viene dado por:

$$f(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pm 1}{2\pi i} \frac{f(x)}{x - z} dx \quad (\text{B.14})$$