Lekce II – Úvod do kvantové teorie rozptylu (časově závislý přístup)

vývoj popsán Hamiltoniánem: $H = H_0 + V$ (např.: $H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$)

časový vývoj (orbita, trajektorie): $|\psi(t)\rangle = U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle$

... předpokládáme (vždy) H nezáv. na t ... $U(t-t_0) = \exp(-iH(t-t_0))$

Vstupní a výstupní asymptoty: ... "volná" částice $|\phi(t)\rangle = U_0(t-t_0)|\phi_0\rangle$

vstupní (in) asymptota: $\| U_0(t-t_0)|\psi_{in}(t_0)\rangle - U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle \| \xrightarrow[t\to-\infty]{} 0$

výstupní (out) $\| |\psi_{out}(t)\rangle - |\psi(t)\rangle \| \xrightarrow[t\to\infty]{} 0$

- Asymptotická podmínka

Řekneme, že teorie (zadané $\mathcal{H}$ a $H = H_0 + V$) splňuje asymptotickou podmínku pokud $\forall\ |\psi_{in}(t)\rangle$ (asymptotu) $\exists\ |\psi(t)\rangle$ orbita. Podobně exist. $\psi(t)$ $\forall$ $|\psi_{out}(t)\rangle$.

PŘ (Taylor)

dá se DK, že $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ a $H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$, kde $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$

a I $V(r) = O(r^{-3-\varepsilon})$ pro $r \to \infty$; $\varepsilon > 0$

II $V(r) = O(r^{-3/2+\varepsilon})$ pro $r \to 0$; $\varepsilon > 0$

III $V(r)$ je spojité na $0 < r < \infty$ až na konečn. počet konečn. skoků

splňuje asymptotickou podmínku.

Náznak DK: (búno $t_0 = 0$) $U(t)|\psi_0\rangle - U^0(t)|\psi_{in}\rangle \to 0$ $t \to -\infty$

$\Leftrightarrow\ |\psi_0\rangle - U(t)^+ U^0(t)|\psi_{in}\rangle \to 0$ $t \to -\infty$

tj. $|\psi\rangle = \lim_{t\to\infty} U^+(t)U^0(t)|\psi_{in}\rangle = \left(\int_0^t \underbrace{\frac{d}{dt}\left(U^+(t)U^0(t)\right)}_{iU^+VU^0} + I\right)|\psi_{in}\rangle$ (pokud lim existuje)

$= |\psi_{in}\rangle + i\int_0^t d\tau\, U(\tau)^+ V U^0(\tau)|\psi_{in}\rangle$ ... dk konverg. integrálu pro $t \to -\infty$

postač. ~~nutná~~ podmínka $\int_{-\infty}^0 d\tau\, \| U^+(\tau) V U^0(\tau)\psi_{in} \| < \infty$ $\forall \psi_{in}$

(unitarita U) $= \int_{-\infty}^0 d\tau\, \| V U^0(\tau)\psi_i \|$ ... stačí DK na husté množině:

$\langle x|\psi_{in}\rangle = e^{-(\vec{x}-\vec{a})^2/2\varrho^2} \longrightarrow |\langle x|U^0(\tau)\psi_{in}\rangle|^2 = \left(1+\frac{\tau^2}{m^2\varrho^4}\right)^{-3/2} \exp\left(-\frac{(\vec{x}-\vec{a})^2}{\varrho^2+\tau^2/m^2\varrho^2}\right)$

$\longrightarrow \int_{-\infty}^0 \|\ \| \le \sqrt{\int |V(x)|^2}\ \int_{-\infty}^0 d\tau \left(1+\frac{\tau^2}{m^2\varrho^4}\right)^{-3/4} < \infty$

Møllerovy (vlnové) operátory

asymptotická podmínka zaručuje existenci $\Omega_\pm$:

$$\boxed{\Omega_\pm \equiv \lim_{t\to\mp\infty} U^+(t)\,U_0(t)}$$

vlastnosti: izometrie ... někdy se užívá značení $|\phi+\rangle \equiv \Omega_+|\phi\rangle$
$|\phi-\rangle \equiv \Omega_-|\phi\rangle$

.. budeme nadále také značit

platí: $\langle\phi+|\psi+\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$ ... obecně se dá dk, že limita unitárních operátorů je izometr. oper.

projektor na obor hodnot

tj $\Omega^+\Omega = I$, ale obecně nejsou unitární $\Omega\Omega^+ \neq I$ (viz. níže.)

pokud $\{|n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ je báze v $\mathcal{H}$ můžeme psát $\Omega_+ = \sum_n |n+\rangle\langle n|$

a $\{|n+\rangle\}$ tvoří bázi v $\mathcal{R}(\Omega_+) \subset \mathcal{H}$ .. obor hodnot $\Omega_+ \equiv \mathcal{R}_+$

podobně $\mathcal{R}_-$

ortogonalita: $\mathcal{R}_+ \perp \mathcal{B}$, $\mathcal{R}_- \perp \mathcal{B}$; kde $\mathcal{B}$ = lin. obal všech vázaných stavů v H

Dk: nechť $|\psi\rangle = \Omega_+|\psi_{in}\rangle \in \mathcal{R}_+$; $H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$
(náznak)

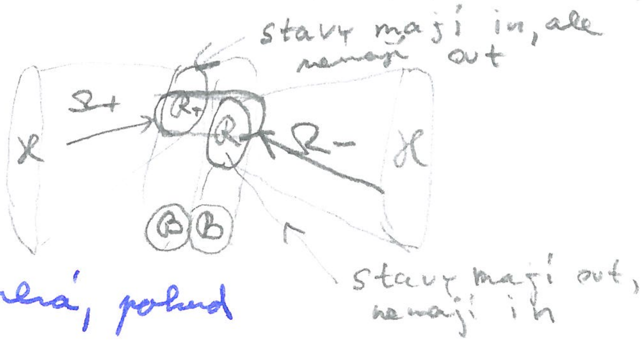
pak $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|U(t)^+U(t)|\psi\rangle$ pro libovol t (unitarita $U(t)$)

evoluce vl st $= e^{iEt}\langle\phi|U(t)|\psi\rangle = e^{iEt}\langle\phi|U^0(t)|\psi_{in}\rangle \to 0$

$t \to -\infty$ (rozplývání balíku)

konstrukce S-operátoru:

potřebujeme $S: |\psi_{in}\rangle \longrightarrow |\psi_{out}\rangle$; ale



• Asymptotická úplnost

Řekneme, že teorie je asymptoticky úplná, pokud

$\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_- = \mathcal{B}^\perp$; tj $\mathcal{H} = \mathcal{B} \oplus \mathcal{R}$ ... rozklad na rozptylové a vázané stavy

poznámka: viděli jsme, že $\forall$ báze v $\mathcal{H}$ ~~po~~ $\{|n\rangle\}$ generuje bázi v $\mathcal{R}$ $\{|n+\rangle\}$

$|n+\rangle = \Omega_+|n\rangle$; $\Omega_+ = \sum_n |n+\rangle\langle n|$.

zobrazení $\Omega_\pm$: ~~...~~ $\mathcal{H} \to \mathcal{R}$ lze obrátit: $\Omega_\pm^+ = \sum_n |n\rangle\langle n\pm|$: $\mathcal{R} \longrightarrow \mathcal{H}$

Rozptylový operátor: $\boxed{S \equiv \Omega_-^+\,\Omega_+}$ ... pro asymptot. úpl. teorii:

S je lineární izometrický operátor $\mathcal{H}$ na $\mathcal{H}$ a tedy unitární

$\rightarrow$ $SS^+ = S^+S = I$ ... částice se neztrácejí .. zachov. pravděpodobnost.

S dává odpověď na základ. otázku teorie rozptylu: $\boxed{|\psi_{out}\rangle = S|\psi_{in}\rangle}$

• Vlastnosti S-matice

pozn: S je unitární operátor ... vždy je vhodnější pracovat se samosdruženým operátorem ... reál. vl.č.

Caley transformation: $K = i(1-S)(1+S)^{-1}$ (1) **K-matice**

$S = (1+iK)(1-iK)^{-1}$ (2)

snadno ověříte, že Caley transformace (1) přiřazuje ∀ unit. oper. S oper $K=K$

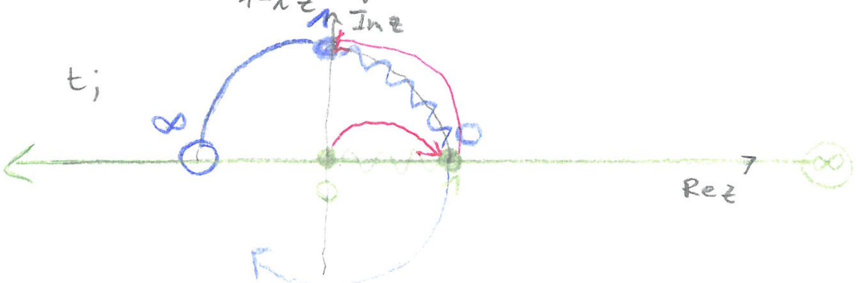
dk: $K^+ = -i(1+S^+)^{-1}(1-S^+) = -i(1+S^{-1})^{-1}(1-S^{-1}) = -i(S+1)^{-1}(S-1) = K$

a naopak inverzní transf (2) ... ∀ samosdruženém oper K přiřadí unit S

pozn: (2) ... $\frac{1+iz}{1-iz}$ je lin. lomené zobrazení $-i\to\infty$, $\underbrace{0\to 1,\ \infty\to -1,\ 1\to i}$

tj; přímce Im $z=0$ přiřadí kružnici $|z|=1$

tj;



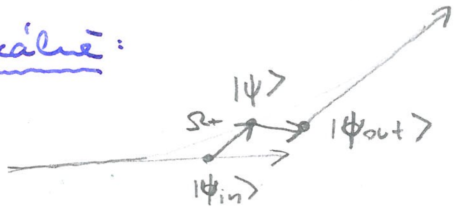
• zachování energie: $[U_0,H_0]=[U,H]=0$

→ energie se zachovává podél trajektorie $H|\psi(t_0)\rangle = E|\psi(t_0)\rangle$

$\Rightarrow H|\psi(t)\rangle = E|\psi(t)\rangle$

důsl. pro S-matici: ? ~~$[S,H]=0$~~ ? jemnější:

fyzikálně: ... energie $|\psi_{in}\rangle$ je daná pomocí H_0!



v t_0: v $t=-\infty$

$H|\psi_{in}\rangle_{t_0} \neq H_0|\psi_{in}\rangle_{t_0} = H_0|\psi_{in}\rangle_t = H|\psi_{in}\rangle_t$

$\to H|\psi\rangle_{t_0} = H|\psi\rangle_t$

čekáme $H_0|\psi_{in}\rangle = H|\psi\rangle = H_0|\psi_{out}\rangle$

technicky: intertwining relations: $H\Omega_\pm = \Omega_\pm H_0$

DK: platí: $e^{iHt}\Omega_+ = e^{iHt}\lim_{\tau\to-\infty} e^{iH\tau}e^{-iH_0\tau} = \lim_{\tau\to-\infty} e^{iH\underbrace{(t+\tau)}_{T}}e^{-iH_0(\tau+t-t)}$

$= \lim_{T\to-\infty} e^{iHT}e^{-iH_0T}\cdot e^{iH_0t} = \Omega_+ e^{iH_0t}$ $\quad + \frac{d}{dt}\Big|_{t=0}$

důsledek: $SH_0 = \Omega_-^+\Omega_+H_0 = \Omega_-^+H\Omega_+ = (H\Omega_-)^+\Omega_+$

$= (\Omega_-H_0)^+\Omega_+ = H_0\Omega_-^+\Omega_+ = H_0S$

tj; $\boxed{[S,H_0]=0}$

důsl: $\langle E,\alpha | H_0 S | E',\alpha' \rangle = \langle E\alpha | S H_0 | E'\alpha' \rangle$

$\rightarrow (E - E') \langle E\alpha | S | E'\alpha' \rangle = 0 \longrightarrow \langle E\alpha | S | E'\alpha' \rangle = \delta(E - E') S_{\alpha\alpha'}(E)$

požadavek unitarity $\rightarrow$ $S_{\alpha\alpha'}$ je unit. matice $\forall E$

def: vl. č. matice $S_{\alpha\alpha'}(E)$ lze psát ve tvaru $e^{2i\delta_n(E)}$

$\delta_n(E)$ nazýváme vlastní fáze (eigenphases)

varování: $|p\alpha\rangle = \eta(p) |E\alpha\rangle$ tj

toto pokazí unitaritu

$$\langle p\alpha | S | p'\alpha' \rangle = \eta^2 \langle E\alpha | S | E'\alpha' \rangle = \eta^2 \delta(E - E') S_{\alpha\alpha'}(E)$$

použít

$$= \delta(p - p') S_{\alpha\alpha'}(p) \quad \left(\equiv S_{\alpha\alpha'}\left(\frac{p^2}{2m}\right)\right)$$

Def: T-matice na energ. slupce (on-shell T-matrix)

$$\boxed{\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) - 2\pi i \, \delta(E_{p'} - E_p) \, t(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})}$$

tj netriviální část S-matice

obsahuje: 1, z.z. energie 2, fakt, že $V \to 0$ $S = I$

účinný průřez

maticový element S-operátoru udává amplitudu pravděpodobnosti pro proces $\vec{p} \to \vec{p}'$ $\rightarrow$ kvadrát dá pravděpodobnost, ale: $\rightarrow$ co s δ-fcí nadrulou?

$\rightarrow$ správné geometrické faktory?

... potřeba regularizovat: — podstata je nejlépe vidět v 1D:

- pravděpod. průchodu a odrazu v 1D:

$$\ldots \langle p' | S | p \rangle = \delta_1(p - p') - 2\pi i \, \delta(E_{p'} - E_p) \, t(p' \leftarrow p) \left[= \underbrace{\frac{p}{m}\delta(E' - E)}_{\delta(p - p')} \underbrace{\left[\delta_{\dot{m}m} - 2\pi i \frac{m}{p} t\right]}_{S_{\dot{m}m}(p)} \right]$$

- pozn: jen dva směry .. $m = \pm$ ... $|p\rangle = ||p|, m\rangle$

regularizace: $|p\rangle$ není $\in L^2(\mathbb{R})$ ... nahrazení $|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \, dp$ ← úzký peak kolem $p = |p_{in}| \cdot m$

pravd. odrazu: $\sigma_- = w_{-\leftarrow\phi} = \int_0^{\infty} dp \, |\psi_{out}(-p)|^2$; $\ldots |\psi_{out}\rangle = S|\phi\rangle$

$$\text{tj } \sigma_- = \int_0^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp' \underbrace{\delta(E_{p'} - E_p)}_{\frac{m}{p}\delta(p - p')} (+2\pi i) \overset{*}{t}_{-p \leftarrow p'} \overset{*}{\phi}(p') \int_{-\infty}^{\infty} dp'' \underbrace{\delta(E_{p''} - E_p)}_{\frac{m}{p}\delta(p'' - p)} t_{-p \leftarrow p''} \, \phi(p'') (-2\pi i)$$

$$= (2\pi m)^2 \int_0^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp' \, \delta(p - p') \frac{1}{pp'} |t_{-p \leftarrow p'} \phi(p')|^2 = (2\pi m)^2 \int_0^{\infty} \frac{1}{p^2} |t_{-p \leftarrow p} \phi(p)|^2 dp$$

$+ \phi$ je úzký peak $\rightarrow$ $\sigma_- = \left| \frac{2\pi m}{p} t(-p_{in} \leftarrow p_{in}) \right|^2 \left(= |S_{-+}(p)|^2 \right)$

podobně se dá najít σ_+ (udělána přímo s S_{mn})

$$\sigma_+ = \int_0^\infty dp\, |\psi_{out}(p)|^2 = \int_0^\infty dp \int_{-\infty}^{\infty} dp'\, S^*_{++}(p')\, \phi\, \delta(p-p')\, \phi(p') \int_{-\infty}^{\infty} dp''\, S_{++}(p)\, \delta(p-p'')\, \phi(p'')$$

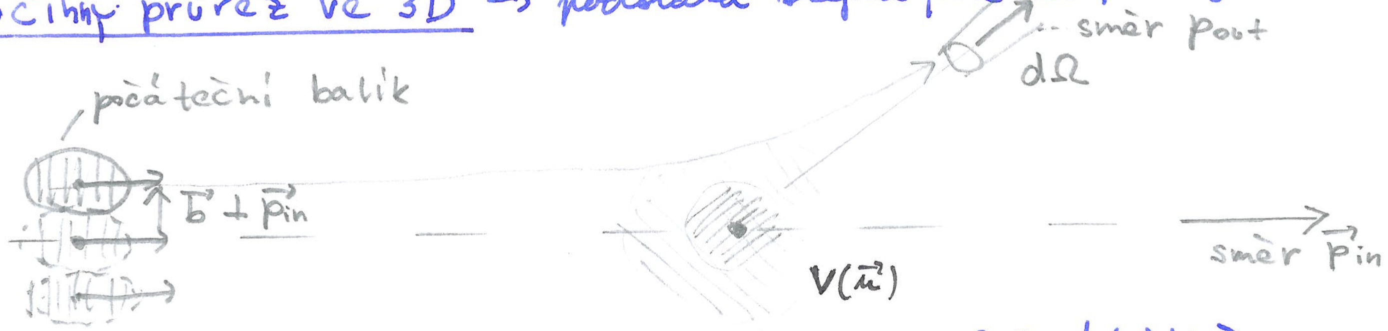
$$= \int_0^\infty |S_{++}(p)\phi(p)|^2 dp \underset{\phi\text{-úzký peak}}{\approx} |S_{++}(p)|^2 \left(= \left|1 - 2\pi i \frac{m}{p}\, t_{+p_{in} \leftarrow p_{in}}\right|^2 \right)$$

pozn: $|\delta(E-E')|^2$ se nám podařilo regularizovat, protože → není kvadrát, ale konvoluce!

pozn: $\sigma_+ + \sigma_- = 1$ díky unitaritě S-matice ... $S^+S = 1$

$$S^*_{++}S_{++} + S^*_{-+}S_{-+} = \sum_\alpha (S^+)_{+\alpha} S_{\alpha +} = \delta_{++} = 1$$

• účinný průřez ve 3D → podstata stejná, ale komplik. geometrie:



opět: $|p_{in}\rangle$ není v $L^2(\mathbb{R}^3)$ ... def: $|\phi\rangle = \int d^3p\, \phi(p)\, |p\rangle$

počáteční vlnový balík → – kde $\phi(p)$... úzký peak kolem $\vec{p}_{in}$

zajímá nás pravd. nálezu v $d\Omega$ kolem $\vec{p}_{out}$ po rozptylu:

$$d\sigma = \int_{p \in d\Omega} w_{p \leftarrow \phi}\, d^3p \underset{\text{úzký } d\Omega}{=} d\Omega \int_0^\infty p^2 dp\, |\psi_{out}(\vec{p})|^2 \quad \ldots |\psi_{out}\rangle = S|\phi\rangle$$

problém ... neznáme impact parameter (střední), ani tvar ϕ
uvidíme, že na tvaru nezáleží

středování přes $\forall \vec{b} \perp \vec{p}_{in}$:

... operátor posunutí: $\phi_{\vec{b}}(\vec{p}) = e^{-i\vec{b}\cdot\vec{p}}\, \phi(\vec{p})$

středování: $\langle d\sigma \rangle = \int d^2b\, d\sigma_{\vec{b}}$

+ složení všeho dohromady: (budeme předp. že $\vec{p}_{out} \neq \vec{p}_{in}$
tj. neměříme rozptyl dopředu ... v $S = \delta - 2\pi i \delta_E t$ vynecháme)

tj: $$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int d^2b \int_0^\infty p^2 dp\, |\psi_{out}(\vec{p})|^2$$

kde $$\psi_{out}(\vec{p}) = S\phi_{\vec{b}}(\vec{p}) = \int d^3p'\, (-2\pi i)\, \delta(E_p - E_{p'})\, t_{pp'}\, e^{-i\vec{b}\cdot\vec{p}'}\, \phi(\vec{p}')$$

tj (viz násl. str.:)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(d\Omega \leftarrow \phi) = \int d^2b \int_0^\infty p^2\,dp \int d^3p' \,(+2\pi i)\,\delta(E_p - E_{p'})\, t^*_{pp'}\, e^{+ib\cdot p'}\, \phi^*(p')$$
$$\int d^3p'' \,(-2\pi i)\,\delta(E_p - E_{p''})\, t_{pp''}\, e^{-ib\cdot p''}\, \phi(p'')$$

- $\int db^2\, e^{-i\vec b\cdot(\vec p' - \vec p'')} = (2\pi)^2\, \delta(\vec p'_\perp - \vec p''_\perp)$ ... složky kolmé na $\vec p_{in}$

$$= (2\pi)^4 \int_0^\infty p^2\,dp \int d^3p' \int d^3p''\, \underbrace{\delta_2(p'_\perp - p''_\perp)\,\delta(E_{p'} - E_{p''})}_{\frac{m}{p''}\delta^3(p' - p'')}\,\delta(E_p - E_{p'})\, t^*_{pp'}\, t_{pp''}\, \phi^*(p')\,\phi(p'')$$

p'' složka rovnoběžná s p_{in}

$$p_\perp^2 + p_\parallel^2 = 2mE \;\rightarrow\; \delta(E_{p'} - E_{p''}) = \frac{\delta(p'_\parallel - p''_\parallel)}{\frac{dE}{dp_\parallel}} = \frac{m}{p''}\,\delta(p'_\parallel - p''_\parallel)$$

$$= (2\pi)^4 \int_0^\infty p^2\,dp \int d^3p'\, \underbrace{\delta(E_p - E_{p'})}_{\frac{m}{p}\delta(|p| - |p'|)}\, |t_{pp'}\,\phi_{p'}|^2\, \frac{m}{p''} = (2\pi)^4 m^2 \int d^3p'\, \frac{p}{p'_\parallel}\, |t_{pp'}\,\phi_{p'}|^2$$

v t .. platí $|p| = |p'|$

úzký peak kolem p_{in} $\Rightarrow$ $p'_\parallel = |p|$

tj $$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec p_{out} \leftarrow \vec p_{in}) = \left|(2\pi)^2 m\, t_{\vec p_{out} \leftarrow \vec p_{in}}\right|^2 = |f(\vec p_{out}, \vec p_{in})|^2$$

poznámky:
- def $f \equiv -m(2\pi)^2 t$ .. amplituda rozptylu
- v t potřebujeme jen argumenty $|\vec p_{out}| = |\vec p_{in}|$ $\equiv$ energetická slupka ($\equiv$ on shell)
- výsledný vzorec nezávisí na tvaru $\phi(\vec p)$ pokud ϕ je hodně úzký peak a t se málo mění v šířce toho peaku

- interpretace faktoru $(2\pi)^4 m^2$:
  - v bázi $\langle E\vec n | E'\vec n'\rangle = \delta(E - E')\,\delta(\vec n - \vec n')$ ← směr pohybu, a energie; $|E\vec n\rangle = \sqrt{mp}\,|\vec p\rangle$

    je $\langle E'n'|S|En\rangle = \delta(E - E')\, S_{nn'}(E) = \delta(E - E')\left[\delta(n - n') - 2\pi i\, mp\, t_{p'\leftarrow p}\right]$

    → v termínech $S_{nn'}$: $S_{nn'}(E) = \delta(n - n') - 2\pi i\, mp\, t_{p'\leftarrow p}$

    tj $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^2}{p^2}\,|S_{n'\leftarrow n}(E)|^2$ tj $\frac{(2\pi)^2\,(2\pi)^2 m^2 p^2}{p^2} = (2\pi)^4 m^2$

    normalizace $\delta(E) \to \delta(p)$ a def $S = -2i\pi T$

    → geometrický faktor

- ve 2D: $\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{(2\pi)^3 m^2}{p}\,|t_{pp'}|^2 = \frac{2\pi}{p}\,|S_{n'n}|^2$

.. $|En\rangle = \sqrt{m}\,|p\rangle$ → $\langle E'n'|S|En\rangle = \delta(E - E')\left(\delta(n - n') - 2\pi i\, m\, t_{p'\leftarrow p}\right)$

tj