

UNIVERSIDAD SIMÓN BOLÍVAR
Licenciatura en Química

Tratamiento Grupal para los Estados Ligados y de Scattering de los Potenciales de Natanzon Hipergeométricos

Por
Hermann Albrecht

Trabajo de Grado
presentado ante la Ilustre Universidad Simón Bolívar
como requisito parcial para optar al título de
Licenciado en Química

Realizado con la Asesoría de
Prof. Sebastián Salamó

Sartenejas, Octubre de 2001

Este trabajo ha sido aprobado en nombre de la Universidad Simón Bolívar por el siguiente jurado examinador:

Prof. José Luis Paz
Jurado

Prof. Jorge Stephany
Jurado

Prof. Sebastián Salamó
Tutor

Resumen

Se extiende el tratamiento algebraico de los estados ligados de los Potenciales de Natanzon Hipergeométricos (PNH) de Cordero y Salamó [13] para estados de scattering. Se ha empleado para ello el formalismo algebraico de la Conexión Euclídea, desarrollado por Alhassid, et al. [3]. Considerando la realización en coordenadas dada en [13], se ha investigado su comportamiento asintótico para emplear la fórmula de conexión conseguida por Alhassid et al. en [3] y su expresión general del coeficiente de Reflexión $R_m(k)$ para un sistema cuyo Hamiltoniano se puede escribir como una función del Casimir de $so(2, 1)$. Se ha determinado el factor $R_{m_0}(k)$ en completa concordancia con la expresión obtenida por Natanzon [41] y se asocia los polos de $R_m(k)$ con el espectro de energía de los estados ligados. Se resuelven los casos de los potenciales de *Pöschl-Teller*, *Rosen Morse* y *Hulthén* como ejemplos particulares.

Agradecimientos

Al Prof. S. Salamó, por su paciencia y deseos de enseñarme

A Mario, un gran amigo que me guió en mi metamorfosis

A todos los que ayudaron en mi formación

Al GRUPO DE RELATIVIDAD Y CAMPOS por aceptarme y darme su apoyo

Al Prof. Revel Chión, por entender...

A todos los panas de SALTE

A los gigantes que me inspiran:

Barut, Dirac, Heisenberg, Wigner...

Dedicatoria

A Cosita, que siempre estuvo para apoyarme

A quienes creyeron que podía

A mí, el sobreviviente

A L.F.Q.P.

Índice General

1	Introducción	4
2	Potenciales de Natanzon	10
2.1	Potenciales Hipergeométricos de Natanzon	10
2.2	Ejemplos de PNH	12
2.2.1	Potencial de Pöschl-Teller	12
2.2.2	Potencial de Rosen-Morse	13
2.2.3	Potencial de Eckart	14
2.2.4	Potencial de Hulthén	15
3	Estados Ligados de los PNH	18
3.1	Tratamiento Algebraico: $so(2, 1)$	18
3.2	Realización de $so(2, 1)$	19
3.3	Solución Algebraica de los PNH	21
3.4	La Función de Onda	22
3.5	Ejemplos	23
3.5.1	Potencial de Pöschl-Teller	23
3.5.2	Potencial de Rosen-Morse	25
3.5.3	Caso Especial del Potencial de Eckart: Potencial de Hulthén	26
4	Scattering Algebraico	28
4.1	Potencial de Pöschl-Teller Reducido	29
4.2	Conexión Euclídea para $so(2, 1)$	34
4.2.1	Álgebra Euclídea $e(2)$	34
4.2.2	Estados Asintóticos	35
4.2.3	Fórmula de Conexión	36
4.2.4	Expresión General de $R_m(k)$	38
4.3	Scattering Potencial de los PNH usando $SO(2, 2)$	40
5	Scattering de los PNH	41
5.1	La función $z(r)$	41
5.2	Scattering del PTP	42
5.2.1	Realización de $so(2, 1)$ y Álgebra Asintótica	43
5.2.2	Conexión Euclídea para el PTP	43

5.2.3	Coeficiente de Reflexión para el PTP	46
5.3	Caso General de los PNH	47
5.3.1	El Algebra Asintótica	47
5.3.2	Conexión Euclídea para los PNH	48
5.3.3	Coeficiente de Reflexión para los PNH	49
5.4	Ejemplos	50
5.4.1	Potencial de Rosen-Morse	51
5.4.2	Caso Especial del Potencial de Eckart: Potencial de Hulthén	52
6	Conclusiones	54
A	Teoría de Grupos	56
A.1	Grupos de Lie de Tres Parámetros	56
A.1.1	Conmutadores	57
A.1.2	Invariantes de Casimir	58
A.2	Representaciones Unitarias de $SO(2,1)$	59
A.2.1	Representaciones Proyectivas	61
A.3	Grupo Euclídeo $E(2)$	62
B	Scattering: Conceptos Básicos	64
B.1	Introducción	64
B.2	Scattering Independiente del Tiempo	65
B.2.1	Ecuación de Lippmann-Schwinger	65
B.2.2	Estados de Scattering y Matriz S	69

Capítulo 1

Introducción

Ha transcurrido poco más de un siglo desde que en 1873 Marcus Sophus Lie empezara sus investigaciones en lo que ha evolucionado como una de las más bellas y fructíferas ramas de la matemática moderna: la **Teoría de Grupos de Lie**. Veinte años antes ya habían sido introducidas las matrices y grupos de matrices por A. Cayley, Sir W.R. Hamilton y J.J. Sylvester (1850-1859). Así, la publicación entre 1888 y 1893 de los importantes tratados de W. Killing [32], como del mismo S. Lie [34], cerraba el círculo en la creación de una nueva disciplina matemática. En ese momento, los matemáticos se sentían orgullosos por haber sido capaces de inventar algo cuya aplicabilidad en las ciencias naturales parecía inexistente. Sin embargo, los grupos de Lie han venido a jugar un papel cada vez más importante dentro de las teorías de la física moderna. De hecho, los grupos de Lie entraron en la física principalmente a través de sus representaciones matriciales de dimensión finita e infinita.

Aún antes del desarrollo de la teoría cuántica, los grupos de Lie encontraron su camino hacia la física, dada su utilidad para la descripción de espacios simétricos (localmente) homogéneos pseudo-Riemannianos, usados particularmente en teorías geométricas de la gravitación. Posteriormente, fueron forzados a entrar en escena en la teoría cuántica, dado el desarrollo que ésta tuvo en 1925-1926. En ella, los observables físicos aparecen a través de matrices hermíticas, mientras que los procesos que producen transformaciones se describen por sus representaciones matriciales unitarias o anti - unitarias. Operadores que cierran bajo conmutación pueden pertenecer a un álgebra de Lie de dimensión finita, mientras que los procesos de transformación descritos por un número finito de parámetros continuos pueden pertenecer a un grupo de Lie.

Los tipos de aplicaciones de la teoría de grupos de Lie en la física moderna caen en dos clases distintas:

1. *Grupos de Simetría* (1929-1960): Una simetría en el sistema se manifiesta por la presencia de degeneración, siendo que a mayor simetría, mayor degeneración. Asumamos que un grupo de Lie G con álgebra de Lie g conmuta con un Hamiltoniano \mathcal{H} :

$$GHG^{-1} = \mathcal{H} \Leftrightarrow [\mathcal{H}, g] = 0$$

Por el teorema de Wigner [24], la base de vectores de un autoespacio de energía fija llevan una representación de G . Por ejemplo, el *Oscilador Armónico Isotrópico en 3 dimensiones* tiene simetría esférica. Así, sus autofunciones llevan una representación del grupo de rotaciones¹ $SO(3)$.

2. *Grupos de No Simetría* (1960-): En la década de 1960, los físicos se vieron gradualmente forzados a darse cuenta que grupos que no conmutan con el Hamiltoniano de un sistema pueden resultar incluso más útiles, desde un punto de vista computacional, que los grupos de simetría . Siguiendo con el ejemplo del *Oscilador Armónico Isotrópico en 3 dimensiones*, con Hamiltoniano $\mathcal{H} = \hbar\omega [a_i^\dagger a_i + 3/2]$ ($i=1,2,3$), es posible conseguir un grupo 16-dimensional de no simetría con generadores $a_i^\dagger a_j$, a_i^\dagger , a_j , I

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, a_i^\dagger a_j] &= 0 \\ [\mathcal{H}, a_i^\dagger] &= \hbar\omega a_i^\dagger \\ [\mathcal{H}, a_j] &= -\hbar\omega a_j \\ [\mathcal{H}, I] &= 0 \end{aligned}$$

Este grupo es contraído del grupo no compacto $U(3, 1)$ [24]. Usando esta álgebra [11], puede obtenerse cualquier autoestado de otro al aplicar una secuencia de elementos en esta álgebra de Lie. En particular, todos los estados excitados pueden computarse del estado base, que puede calcularse por medios algebraicos o por métodos analíticos (variacionales). El átomo de Hidrógeno, modelos de superconductores y superfluidos, sistemas láser y partículas cargadas en campos externos son tan solo algunos de los problemas susceptibles a tal tratamiento.

El interés particular de este trabajo está en la segunda categoría de aplicaciones, ya que se ha relacionado el Hamiltoniano perteneciente a la familia de los potenciales de Natanzon Hipergeométricos [40] con el invariante de Casimir de un grupo $SO(2, 1)$ en una representación particular [13] por medio de una cierta función (\mathcal{G}), tal que $[\mathcal{H}, Q] \neq 0$.

Aunque a veces de forma intuitiva, el concepto de simetría siempre ha estado presente en la conciencia del químico. Basta revisar la literatura básica de áreas como Química Orgánica, Inorgánica y Espectroscopía para ver como se basan en la simetría de las moléculas para discutir algunas de sus propiedades químicas. Los tratamientos más formales, basados en grupos puntuales, finitos y de Lie, también están presentes desde los niveles más básicos. No es extraño conseguir referencias a la Teoría de Grupos Finitos en libros para Química Inorgánica de pregrado. Igualmente se pueden encontrar libros especializados en las aplicaciones de la Teoría de Grupos en Química [15], [27].

¹Sin embargo, la existencia de degeneraciones accidentales [24] hace más útil y deseable, desde un punto de vista de cálculo, etiquetar sus autofunciones con el grupo $SU(3)$.

Se han realizado importantes avances en aplicaciones de los *Grupos y Álgebras de Lie* a problemas de Química Molecular, principalmente en el campo de espectros roto-vibracionales de moléculas [29]. Incluso se han empleado las denominadas *Álgebras de Lie Dinámicas* [10] para el estudio teórico de colisiones moleculares inelásticas con superficies, que tienen aplicaciones directas a los procesos de catálisis, como ocurre en [60]. Los autores de dicho trabajo aplican el formalismo algebraico al scattering de moléculas de NO sobre una superficie de Ag(111).

El estudio de la ecuación de Schrödinger, con *Potenciales Exactamente Solubles (PES)*, se remonta a los inicios mismos de la mecánica cuántica. Como ejemplos se pueden mencionar el oscilador armónico, Coulomb [11], Pöschl-Teller [43], Manning-Rosen [37], entre tantos otros. En cada caso, la exacta solubilidad de estos potenciales se manifiesta en el hecho de que la ecuación de Schrödinger respectiva puede ser transformada a una ecuación hipergeométrica o hipergeométrica confluyente. Las clases más generales de potenciales exactamente solubles fueron construidas por Natanzon en la década de 1970 [40] y se conocen como los **Potenciales de Natanzon Hipergeométricos (PNH)** y **Potenciales de Natanzon Confluentes (PNC)**, respectivamente.

La importancia de los *PES* va más allá de un interés netamente académico. Algunos han encontrado aplicabilidad directa en la descripción de fenómenos reales, como ocurre con el potencial Coulombiano y el átomo de Hidrógeno [11]. Igualmente pueden servir como bases de modelos aproximados, proporcionar Hamiltonianos para expansiones perturbativas o como bases de funciones de onda para cálculos variacionales.

Existen extensas aplicaciones de los *PNH* en la Química Teórica, aún cuando es más común encontrar referencias en las que se empleen potenciales como los de Morse y de Kratzer [19], pertenecientes a la familia de los *PNC*. El tratamiento algebraico de este tipo de potenciales ya fue estudiado por Cordero y Salamó en [14].

Al ahondar un poco más en literatura existente, se puede conseguir que, aunque no tan extensamente, los *PNH* han sido empleado en estudios moleculares y de sólidos. Los Potenciales de Rosen-Morse y Pöschl-Teller tienen cabida en la descripción de espectros roto-vibracionales de moléculas.

El **Potencial de Pöschl-Teller (PTP)** ha sido propuesto principalmente para describir movimientos de torsión en moléculas triatómicas, principalmente por Makarewicz [36]. Otros autores han desarrollado modelos perturbados basados en este potencial para el tratamiento de movimientos roto-vibracionales de moléculas triatómicas [48], moléculas lineales [56] y, más recientemente, Requena et al. [45] construyen un Hamiltoniano para moléculas triatómicas con un término tipo PTP perturbado que describe los movimientos de torsión y otro basado en el potencial de Kratzer [33], o *Simons-Parr-Finlan (SPF)* [54], para describir los de elongación. Sus cálculos son aplicados numéricamente, mediante un método variacional, a la descripción de una molécula de HCN, obteniendo una excelente convergencia en sus resultados. Actualmente, F. Iachello está usando el potencial de Pöschl-Teller en sus desarrollos algebraicos del hamiltoniano roto-vibracional para moléculas poliatómicas [49]. Hornburger y Dierksen [28] discuten la aplicación del *PTP* en la descripción de vibraciones fuera del plano en moléculas como la de Benceno.

Otro *PNH* que ha encontrado variadas aplicaciones en la Química Teórica es el **Potencial de Eckart** [18], especialmente algunos casos particulares (Hulthén y Manning-

Rosen). El potencial unidimensional ha sido empleado para modelar efectos tipo túnel en moléculas como los tautómeros de complejos metálicos con núcleos de bis(oxo)dicobre [42]. El **Potencial de Hulthén** [19] es aplicado al estudio de moléculas diatómicas [19], dado su comportamiento similar al potencial de Coulomb a distancias r pequeñas. En 1980, Myhrman [39] publicó un interesante trabajo donde estudió el **Potencial de Manning-Rosen** [37] como una generalización del potencial de Hulthén para $\alpha\nu$ pequeños y momentum angular l fijo, abriendo así las aplicaciones de este potencial a problemas moleculares reales.

Las colisiones juegan un papel fundamental en la Química. Tan sólo pensemos en que los equilibrios térmico y químico se mantienen por colisiones, así como también las velocidades de reacciones químicas, la transferencia de energía y masa dependen de la frecuencia y dinámica detallada de las colisiones moleculares. La comprensión del scattering es relevante para la Química dada su utilidad para la descripción de fuerzas intermoleculares y la relevancia de las colisiones sobre superficies en los procesos de catálisis. Así, la aplicación de métodos conceptualmente similares de scattering a problemas de la Química permite una visión más profunda de la dinámica intermolecular que no podría obtenerse de ninguna otra forma.

Una presentación interesante de aplicaciones de scattering en Química es el texto de Maitland, et al. [35], dedicado al estudio de fuerzas intermoleculares. En el capítulo 4 de dicho texto se discute la determinación de fuerzas moleculares a partir de datos experimentales de scattering.

Los grupos dinámicos han sido ampliamente usados en muchos campos de la física [10], a pesar de que la mayoría de estas aplicaciones se han restringido al problema de estados ligados. Los primeros pasos en tratamientos algebraicos para scattering se dan a finales de la década de 1960 con la publicación de un importante trabajo de Zwanziger [61] donde se calculan desplazamientos de fase δ_l para scattering del átomo de Hidrógeno usando el álgebra $so(3, 1)$. Un tratamiento completo del átomo de Hidrógeno fue realizado por Barut, et al. [8] usando $so(4, 2)$. Esta misma álgebra fue empleada para el análisis de sistemas con cargas eléctricas y magnéticas [9]. En esta referencia se calculan transiciones discreto-discreto y discreto-continuo (scattering y efecto fotoeléctrico). El scattering algebraico del sistema coulombiano fue extendido en 1979 por W. Rasmussen y S. Salamó al caso de N dimensiones, empleando un álgebra $so(N + 1, 1)$ [44].

Recientemente Alhassid, et al. [2], [3], [20] han intentado extender estas técnicas a problemas diversos de scattering. Las extensiones de estos investigadores permiten la construcción algebraica de la matriz S para varias familias de potenciales. Esta técnica algebraica está basada en las denominadas *Álgebras Potenciales* [2], en las que los generadores conectan estados de la misma energía pero pertenecientes a diferentes parámetros del potencial. Con este tipo de técnicas se consiguen tanto los estados ligados como los de scattering al usar representaciones discretas y continuas del álgebra, respectivamente. Trabajos recientes por Kerimov [31] han tratado de simplificar conceptualmente el cálculo de la matriz S para el caso general en que el Hamiltoniano de un sistema conmuta con el *Casimir* de un álgebra $so(p, q)$.

El objetivo de este trabajo es extender el tratamiento algebraico para los estados ligados de los Potenciales de Natanzon Hipergeométricos (*PNH*) de Cordero y Salamó

[13] para estados de scattering. Para ello se ha empleado el formalismo algebraico de la Conexión Euclídea, desarrollada por Alhassid, et al. [3]. Considerando la realización en coordenadas dada en [13], se ha investigado su comportamiento asintótico para emplear la expresión general del coeficiente de Reflexión $R_m(k)$ para un sistema con simetría $su(1,1) \sim so(2,1)$, conseguida por Alhassid et al. en [3]. Se ha determinado el factor $R_{m_0(k)}$ para una completa concordancia con la expresión obtenida por Natanzon [41] y se han asociado los polos con el espectro de energía de los estados ligados. Se resuelven como ejemplos particulares los casos de los potenciales de *Pöschl-Teller*, *Rosen Morse* y *Hulthén*.

En el capítulo 2 se introducen los Potenciales de Natanzon Hipergeométricos [40]. Se discuten los casos particulares de los potenciales Pöschl-Teller (*PTP*), Rosen-Morse (*RMP*), Eckart y Hulthén, un caso especial del Eckart. Estos serán discutidos con mayor detalle en capítulos posteriores.

El capítulo 3 está dedicado a presentar el tratamiento algebraico para los estados ligados de los *PNH* realizado por Cordero y Salamó en [13]. Este formalismo es ejemplificado con los potenciales de Pöschl-Teller [43], Rosen-Morse [46], y Eckart [18].

En el capítulo 4 se presenta una introducción al cálculo algebraico de la matriz S . Se introduce el scattering algebraico por medio del trabajo de Frank y Wolf [20], donde se calcula la matriz S del *PTP* empleando el álgebra $so(2,1)$. A continuación, se presenta el formalismo de la Conexión Euclídea [3], estudiando el álgebra $e(2)$ y una representación en coordenadas polares. Se discute la fórmula de conexión presentada en [3] y la expresión obtenida para el coeficiente de reflexión $R_m(k)$ para sistemas cuyo Hamiltoniano puede expresarse como una función del Casimir de $so(2,1)$.

En el capítulo 5 se realiza la extensión del tratamiento algebraico [13] para los estados de scattering. Se estudia el álgebra asintótica y los generadores de ésta $\{J_0^{(\infty)}, J_{\pm}^{(\infty)}\}$ se expanden en función de los generadores asintóticos de $E(2)$, siguiendo el formalismo de las *Conexiones Euclídeas*. Empleando los resultados para la fórmula general de $R_m(k)$ obtenidos en el capítulo anterior, se halla la expresión correspondiente a los *PNH*. Todos estos resultados son discutidos comparándolos con el trabajo de Natanzon [41] y Alhassid, et al. [5] determinando el factor R_{m_0} para una completa concordancia con los resultados anteriores. Igualmente se estudian los polos de $R_m(k)$ [55], que reproducen satisfactoriamente el espectro de energía de los estados ligados.

Unas breves conclusiones cierran el trabajo en el capítulo 6.

Se han incluido dos anexos por completitud. El lector que no esté muy familiarizado con ciertos aspectos de la Teoría de Grupos o el tratamiento de colisiones en Mecánica Cuántica usados en este trabajo podrá revisar estas breves introducciones a dichos temas.

El anexo A introduce el grupo $SO(2,1)$ y su respectiva álgebra. Se presentan conceptos de *Teoría de Grupos* que son relevantes para la comprensión del tratamiento algebraico realizado en este trabajo. Se han seguido principalmente los lineamientos de [59], [24].

El anexo B introduce el formalismo matemático asociado al scattering en Mecánica Cuántica. Se presenta la ecuación de Lippmann-Schwinger como herramienta para la deducción de los estados asintóticos asociados al scattering independiente del tiempo. Igualmente se hace un breve presentación de la matriz S . Esta presentación sigue los lineamientos de [50], como también los de [11] y [38]. El carácter analítico de la matriz S

se discute brevemente siguiendo a [55].

Capítulo 2

Potenciales de Natanzon

El estudio de problemas exactamente solubles en Mecánica Cuántica No Relativista tiene una larga historia. Por exactamente solubles se entienden aquellos problemas para los cuales la ecuación de Schrödinger (2.1) puede ser transformada a la forma hipergeométrica (o hipergeométrica confluyente). El primer frente por el cual se atacó este problema fue propuesto por uno de los padres mismos de la teoría cuántica, Erwin Schrödinger, quien introdujo el renombrado *Método de Factorización* [52]. Esta técnica fue generalizada posteriormente por Infeld y Hull [30], entre otros.

En la década de 1970, Natanzon enfrentó el problema desde otro punto [40]. Obtuvo la forma más general del potencial para el cual la parte radial de la Ecuación de Schrödinger (2.1) puede ser reducida a la forma hipergeométrica o a un caso límite de ésta: la hipergeométrica confluyente.

En el presente capítulo se introducen los potenciales hipergeométricos de Natanzon, siguiendo la referencia [40]. Se presentan algunos ejemplos particulares de estos potenciales que serán discutidos con mayor detalle en capítulos posteriores. En algunos casos, los gráficos presentados se corresponden al caso unidimensional. Esto se ha hecho por razones históricas.

2.1 Potenciales Hipergeométricos de Natanzon

En la década de 1970, G.A. Natanzon publica dos importantes trabajos [40], [41] en los que resuelve el caso general en que la parte radial de la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + (V(\vec{r}) - E) \right] \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (2.1)$$

puede transformarse a una ecuación hipergeométrica o a una ecuación hipergeométrica confluyente. En [40] discute el caso de estados ligados y deduce una expresión general para aquellos $V(r)$ donde este cambio es posible para cada caso. Así, pues, estos potenciales se conocen como los *Potenciales de Natanzon*.

Los *PNH* [40] dependen de seis parámetros f, h_0, h_1, a, c_0, c_1 , denominados *Parámetros de Natanzon*, y la función $z(r) \equiv z$:

$$\begin{aligned}
 V_{Natanzon}(z) &= \frac{fz^2 - (h_0 - h_1 + f)z + h_0 + 1}{R(z)} \\
 &+ \left(a + \frac{a + (c_1 - c_0)(2z - 1)}{z(z - 1)} - \frac{5}{4} \frac{\Delta}{R(z)} \right) \frac{z^2(1 - z)^2}{R(z)^2}
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

donde:

$$R(r) = az(r)^2 + \tau z(r) + c_0 \tag{2.3}$$

$$\tau = c_1 - c_0 - a \tag{2.4}$$

$$\Delta = \tau^2 - 4ac_0 \tag{2.5}$$

y donde $z = z(r)$ es una función arbitraria que cumple la ecuación diferencial:

$$\frac{dz}{dr} = \frac{2z(z - 1)}{\sqrt{R(z)}} \tag{2.6}$$

Aunque la función $z(r)$ es en principio arbitraria hay ciertas restricciones que le son impuestas. El dominio de $z(r)$ se restringe a $[0, 1]$ [40] y se asume que la transformación $r(z)$ lleva los puntos $r = 0$ a $z = 0$ y $r \rightarrow \infty$ a $z = 1$ [41]¹.

Sobre los parámetros de Natanzon también existe una restricción, que surge del límite asintótico de (2.2). Si vemos dicha expresión, cuando tomamos el límite $r \rightarrow \infty$ o, equivalentemente, $z \rightarrow 1$, se tiene que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V_{Natanzon} = \frac{1 + h_1}{c_1} \tag{2.7}$$

La importancia de estas condiciones resultará evidente al momento de extender el tratamiento algebraico de estados ligados [13] para los estados de scattering.

Los ejemplos más conocidos de *PNH* son: Pöschl-Teller (*PTP*), Rosen-Morse (*RMP*), Eckart, Scarf y Manning-Rosen ².

Una tabla con los *Potenciales de Natanzon*, tanto *PNH* como *PNC*, que pueden escribirse explícitamente puede encontrarse en [16] y se reproduce al final de este capítulo. Para cada uno de los potenciales incluidos en dicha tabla se puede tener una expresión analítica de la transformación inversa $r(z)$ y forman un subconjunto importante de los *Potenciales de Natanzon*. Se denominan *Potenciales Invariantes de Forma* (*Shape-Invariant Potentials*) y son solubles por técnicas algebraicas de Mecánica Cuántica Supersimétrica (*SUSYQM*) [12].

¹Dado que en el trabajo de Natanzon se están resolviendo potenciales radiales, $r \in [0, \infty)$

²Este potencial es un caso especial del potencial de Eckart [40].

2.2 Ejemplos de PNH

En esta sección se introducen los PNH mencionados anteriormente:

2.2.1 Potencial de Pöschl-Teller

El **Potencial de Pöschl-Teller** viene dado por:

$$V_{PT} = (A - B)^2 - A(A + \alpha)\operatorname{sech}(\alpha r)^2 + B(B - \alpha)\operatorname{csch}(\alpha r)^2 \quad (2.8)$$

y es uno de los PNH más estudiados [2], [3], [4], [5], [12], [16], [19], [20]. Dado que a distancias r pequeñas tiene un comportamiento semejante al del oscilador armónico y posee un número finito de estados ligados encuentra extensas aplicaciones en estudios fenomenológicos [28], [49], [36], [45], [48], [56].

Gráficamente es:

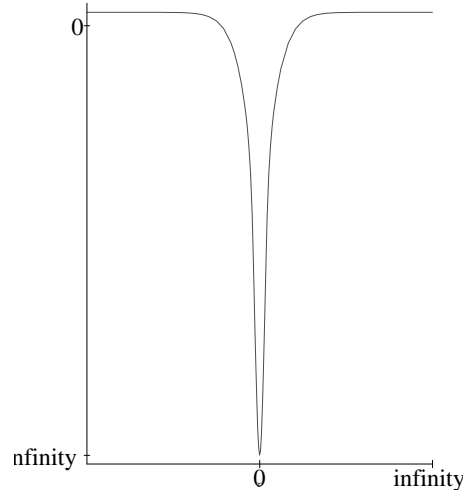


Figura 2.1: Potencial de Pöschl-Teller

donde se ha tomado $A = 1$, $B = 1/2$ y $\alpha = 1$.

En la literatura es más común encontrarse referido el PTP en su versión reducida:

$$V_{PTR} = -V_0\operatorname{sech}(\alpha r)^2 + V_1 \quad (2.9)$$

con V_0 el parámetro que describe la profundidad del potencial y V_1 definiendo el mínimo del potencial, generalmente tomado $V_1 = 0$. Si se toma $A = 1$, $B = 0$ y $\alpha = 1$ en (2.8) se tiene que:

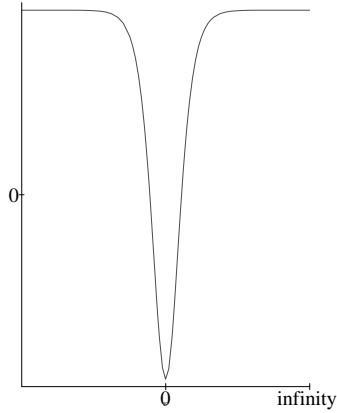


Figura 2: Potencial de Pöschl-Teller Reducido

Los parámetros de Natanzon para este potencial son:

$$\begin{aligned}
 z(r) &= \tanh(\alpha r)^2 \\
 f &= \frac{(2A - \alpha)(2A + 3\alpha)}{4\alpha^2} \\
 h_0 &= \frac{(2B + \alpha)(2B - 3\alpha)}{4\alpha^2} \\
 h_1 &= \frac{(A - B + \alpha)(A - B - \alpha)}{\alpha^2} \\
 a &= 0 \\
 c_0 &= 0 \\
 c_1 &= \frac{1}{\alpha^2}
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

La verificación de los parámetros es inmediata. Basta con sustituir (2.10) en (2.2).

2.2.2 Potencial de Rosen-Morse

El Potencial de Rosen-Morse viene dado por:

$$V_{RM} = A^2 + \frac{B^2}{A^2} - A(A + \alpha) \operatorname{sech}(\alpha r)^2 + 2B \tanh(\alpha r) \tag{2.11}$$

y gráficamente tiene la forma:

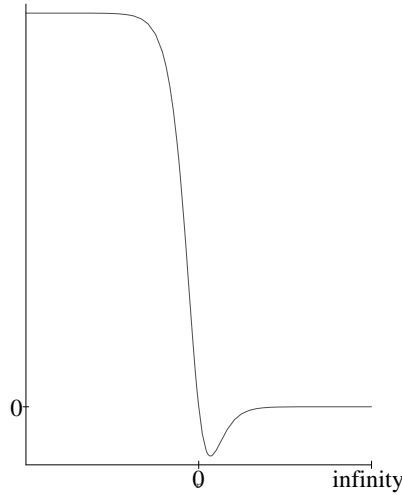


Figura 2.3: Potencial de Rosen-Morse

donde se ha tomado $A = B = 1$ y $\alpha = 1$.

Dado que si se toma $B = 0$ en (2.11) se obtiene el potencial (2.9), es posible encontrarse en la literatura referencias confusas [28] que hablen del *RMP* en la forma (2.9), que en general es más conocido como el *PTP* (reducido), dada su forma simétrica.

Los parámetros de Natanzon para este potencial son:

$$\begin{aligned}
 z(r) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh(\alpha r) \\
 f &= 4A\frac{A + \alpha}{\alpha^2} \\
 h_0 &= \frac{(B - A^2 + A\alpha)(B - A^2 - A\alpha)}{(A\alpha^2)} \\
 h_1 &= \frac{(B + A^2 + A\alpha)(B + A^2 - A\alpha)}{(A\alpha)^2} \\
 a &= 0 \\
 c_0 &= \frac{1}{\alpha^2} \\
 c_1 &= \frac{1}{\alpha^2}
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

2.2.3 Potencial de Eckart

El Potencial de Eckart

$$V_{Eckart} = A^2 + \frac{B^2}{A^2} - 2B\coth(\alpha r) + A(A - \alpha)\operatorname{csch}(\alpha r)^2 \tag{2.13}$$

queda gráficamente como:

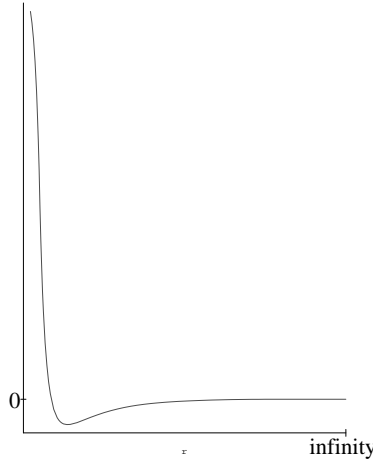


Figura 2.4: Potencial de Eckart

donde se ha tomado $A = B = 1$ y $\alpha = 1/2$.

Los parámetros de Natanzon de este potencial son:

$$\begin{aligned}
 z(r) &= 1 - e^{-2\alpha r} \\
 f &= \frac{(B + A^2 + A\alpha)(B + A^2 - A\alpha)}{A^2\alpha^2} \\
 h_0 &= -4A \frac{(-A + \alpha)}{\alpha^2} \\
 h_1 &= \frac{(-B + A\alpha + A^2)(-B - A\alpha + A^2)}{\alpha^2 A^2} \\
 a &= \frac{1}{\alpha^2} \\
 c_0 &= 0 \\
 c_1 &= \frac{1}{\alpha^2}
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

2.2.4 Potencial de Hulthén

El **Potencial de Hulthén**, un caso especial del *Potencial de Eckart* (2.13), es ampliamente utilizado en la química teórica. Viene dado por:

$$V_{Hulthén} = -V_0 \left(\frac{e^{2\alpha r}}{1 - e^{2\alpha r}} + 1 \right) \tag{2.15}$$

y gráficamente queda como:

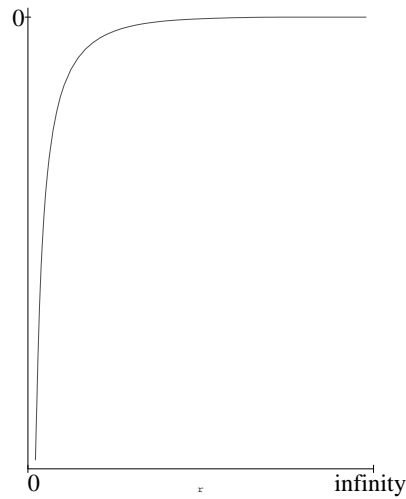


Figura 2.5: Potencial de Hulthén

donde se ha tomado $V_0 = -1$ y $\alpha = 1/2$.

Los parámetros de Natanzon para este potencial son:

$$\begin{aligned}
 z(r) &= 1 - e^{-2\alpha r} \\
 a &= \frac{1}{\alpha^2} \\
 c_0 &= 0 \\
 c_1 &= \frac{1}{\alpha^2} \\
 f &= -1 \\
 h_0 &= 0 \\
 h_1 &= -1
 \end{aligned}
 \tag{2.16}$$

En la siguiente página se presenta una tabla de los Potenciales de Natanzon, tomada de [16].

Tabla 2.1:
Potenciales Invariantes de Forma

Nombre	Potencial	Energía	Variable	Función de Onda
Oscilador 3D	$\frac{1}{4}\omega^2 r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \left(l + \frac{3}{2}\right)\omega$	$2n\omega$	$y = \frac{1}{2}\omega r^2$	$e^{-\frac{y}{2}} y^{\frac{l+1}{2}} L_n^{\frac{l+1}{2}}(y)$
Coulomb	$-\frac{q^2}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{q^4}{4(l+1)^2}$	$\frac{q^4}{4} \left(\frac{1}{(l+1)^2} - \frac{1}{(n+l+1)^2} \right)$	$y = \frac{r q^2}{n+l+1}$	$y^{l+1} e^{-\frac{y}{2}} L_{n-l-1}^{2l+1}(y)$
Morse	$A^2 + B^2 e^{-2\alpha x}$ $-2B(A + \alpha)e^{-\alpha x}$	$A^2 - (A - n\alpha)^2$	$y = \frac{2B}{\alpha} e^{-\alpha x}$ $s = \frac{A}{\alpha}$	$y^{s-n} e^{-\frac{y}{2}} L_n^{2s-2n}(y)$
	$A^2 + (B^2 - A^2 - A\alpha) \operatorname{sech}^2(\alpha x)$ $+B(2A + \alpha) \operatorname{sech}(\alpha x) \tanh(\alpha x)$	$A^2 - (A - n\alpha)^2$	$y = \sinh(\alpha x)$ $s = \frac{A}{\alpha}, \lambda = \frac{B}{\alpha}$	$i^n (1 + y^2)^{-\frac{s}{2}} e^{-\lambda \tanh^{-1} y}$ $\times P_n^{(i\lambda - s - \frac{1}{2}, -i\lambda - s - \frac{1}{2})}(iy)$
Rosen-Morse	$A^2 + B^2/A^2 + 2B \tanh(\alpha x)$ $-A(A + \alpha) \operatorname{sech}(\alpha x)^2$	$A^2 - (A - n\alpha)^2$ $+ \frac{B^2}{A^2} - \frac{B^2}{(A - n\alpha)^2}$	$y = \tanh(\alpha x), s = \frac{A}{\alpha}$ $\lambda = \frac{B}{\alpha^2}, a = \frac{\lambda}{s-n}$	$(1 - y)^{\frac{s-n+a}{2}} (1 + y)^{\frac{s-n-a}{2}}$ $\times P_n^{(s-n+a, s-n-a)}(y)$
	$A^2 + (B^2 + A^2 + A\alpha) \operatorname{csch}^2(\alpha r)$ $-B(2A + \alpha) \operatorname{coth}(\alpha r) \operatorname{csch}(\alpha r)$	$A^2 - (A - n\alpha)^2$	$y = \cosh(\alpha r)$ $s = \frac{A}{\alpha}, \lambda = \frac{B}{\alpha}$	$(y - 1)^{\frac{\lambda-s}{2}} (y + 1)^{-\frac{\lambda+s}{2}}$ $\times P_n^{(\lambda-s-\frac{1}{2}, \lambda-s-\frac{1}{2})}(y)$
Eckart	$A^2 + \frac{B^2}{A^2} - 2B \operatorname{coth}(\alpha r)$ $+A(A - \alpha) \operatorname{csch}^2(\alpha r)$	$A^2 - (A + n\alpha) + \frac{B^2}{A^2} - \frac{B^2}{(A+n\alpha)^2}$	$y = \operatorname{coth}(\alpha r), s = \frac{A}{\alpha}$ $\lambda = \frac{B}{\alpha}, a = \frac{\lambda}{n+s}$	$(y - 1)^{\frac{s-n+a}{2}} (y + 1)^{-\frac{s-n-a}{2}}$ $\times P_n^{(-s-n+a, -s-n-a)}(y)$
Pöschl-Teller	$(A - B)^2 - A(A + \alpha) \operatorname{sech}^2(\alpha r)$ $+B(B - \alpha) \operatorname{csch}^2(\alpha r)$	$(A - B)^2 - (A - B - 2n\alpha)^2$	$y = -1 + 2 \operatorname{sinh}^2(\alpha r)$ $s = \frac{A}{\alpha}, \lambda = \frac{B}{\alpha}$	$(y - 1)^{\frac{\lambda}{2}} (y + 1)^{-\frac{\lambda}{2}}$ $\times P_n^{(\lambda-\frac{1}{2}, -s-\frac{1}{2})}(y)$

Capítulo 3

Estados Ligados de los PNH

En el capítulo anterior hemos presentado los *Potenciales de Natanzon*, considerada la clase más general de *Potenciales Exactamente Solubles (PES)*. La resolución de estos tipos de potenciales ha sido ampliamente estudiada. Los casos particulares [18], [46], [43], fueron unificados por Natanzon en su artículo [40], en el que consigue expresiones generales para el espectro de energía de estos potenciales. Igualmente, se han desarrollado tratamientos algebraicos para estudiar tanto los sectores de estados ligados como de scattering de estos potenciales [5]. Estos autores emplean para ello el grupo $SO(2, 2) \sim SO_a(2, 1) \otimes SO_b(2, 1)$ en la denominada *representación simétrica*, en la que los Invariantes de Casimir de cada subgrupo $SO(2, 1)$ son tomados iguales. Así, pues, los autoestados de los PNH se pueden etiquetar completamente con los autovalores del Casimir y el generador compacto de cada subgrupo $SO(2, 1)$.

En el presente capítulo se va a profundizar en el tratamiento grupal diseñado por Cordero y Salamó [13] para el estudio de los estados ligados de los PNH . A diferencia de la algebrización de Alhassid, et al. [5], en [13] se emplea un álgebra $so(2, 1)$ como *SGA*. Este tratamiento es la base teórica a ser extendida para el estudio posterior de los estados de scattering.

3.1 Tratamiento Algebraico: $so(2, 1)$

La estrategia diseñada por Cordero y Salamó [13] para la resolución de los Potenciales de Natanzon Hipergeométricos (PNH) consiste en tres pasos: (i) Considerar una realización particular de $SO(2, 1)$, (ii) asumir que el Hamiltoniano puede relacionarse al operador Casimir del álgebra:

$$(Q - q)\Psi(r, \phi) = \mathcal{G}(r)(E - H)\Psi(r, \phi) \quad (3.1)$$

donde el Hamiltoniano H (con $\hbar = 1$ y masa $\mu = \frac{1}{2}$) es:

$$H = -\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (3.2)$$

donde q es el autovalor del Casimir Q y $\mathcal{G}(r)$ es una función de r y cuya presencia garantiza la consistencia de la igualdad, y (iii) los autoestados del Hamiltoniano lo serán a su vez del Casimir y del operador compacto del álgebra, J_0 , teniendo la forma:

$$\Psi(r, \phi) = e^{im\phi} \Phi(r) \quad (3.3)$$

3.2 Realización de $so(2, 1)$

El Algebra de Lie $so(2, 1)$ cumple con las relaciones de conmutación siguientes:

$$\begin{aligned} [J_1, J_2] &= -i J_0 \\ [J_2, J_0] &= i J_1 \\ [J_0, J_1] &= i J_2 \end{aligned}$$

donde se ha seguido la notación de [13]. En la notación más usual, se identifica $J_1 = J_x$, $J_2 = J_y$ y $J_0 = J_z$.

Se puede definir el Casimir como:

$$Q = J_0^2 - J_1^2 - J_2^2 \quad (3.4)$$

Se conoce que la acción del Casimir Q y del generador compacto J_0 sobre un autoestado de ambos es:

$$\begin{aligned} Q|q, m\rangle &= q|q, m\rangle \\ q &= j(j+1) \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$J_0|q, m\rangle = m|q, m\rangle \quad (3.6)$$

De esto, se tiene directamente la forma de los estados (3.3) y que el generador J_0 esté dado por [13]:

$$J_0 = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (3.7)$$

El punto de partida para hallar los dos generadores no compactos J_1 y J_2 sigue el tratamiento ideado por Ghirardi en su artículo [25]. En éste se emplean los operadores escalera, $J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2$:

$$J_{\pm} = e^{\pm i\phi} \left[\pm A(r) \partial_r - iB(r) \partial_{\phi} + \frac{1}{2} (C_1(r) \pm C_2(r)) \right] \quad (3.8)$$

Si se requiere que los generadores (3.7) y (3.8) cumplan las relaciones de conmutación (3.4), se obtiene que:

$$A(r) = \frac{1 + B(r)^2}{B'(r)} \quad (3.9)$$

$$A'(r)C_1'(r) = B(r)C_1(r) \quad (3.10)$$

De este sistema de ecuaciones se obtiene que:

$$C_1(r) = p\sqrt{B(r)^2 - 1} \quad (3.11)$$

donde $B(r)$ es una función arbitraria y p es una constante arbitraria de integración. El hecho de que la condición de clausura del álgebra deje libre una constante arbitraria de integración juega un rol central en la importancia de este método. Como se vió anteriormente, las Funciones Hipergeométricas ${}_2F_1(a, b; c; r)$ tienen tres parámetros, por lo que sin esta constante de integración no sería posible etiquetar completamente los estados.

Para conseguir el coeficiente $C_2(r)$, se requiere que el Casimir no contenga un término del tipo ∂_r , por lo que se tiene la condición:

$$C_2(r) = \frac{1}{2} \frac{B^2 - 1}{B'^2} B'' - \frac{1}{2} B \quad (3.12)$$

Finalmente, haciendo el cambio de variable:

$$B(r) \equiv \frac{1}{2} \frac{1 + z(r)}{\sqrt{z(r)}} \quad (3.13)$$

se obtiene que los generadores toman la forma:

$$J_+ = e^{i\phi} \left[\frac{\sqrt{z}(z-1)}{z'} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{2} \frac{i(z+1)}{\sqrt{z}} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] + \frac{1}{2} e^{i\phi} (z-1) \left[\frac{1-p}{\sqrt{z}} - \frac{z''\sqrt{z}}{z'^2} \right] \quad (3.14)$$

$$J_- = e^{-i\phi} \left[-\frac{\sqrt{z}(z-1)}{z'} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{2} \frac{i(z+1)}{\sqrt{z}} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] - \frac{1}{2} e^{-i\phi} (z-1) \left[\frac{1+p}{\sqrt{z}} - \frac{z''\sqrt{z}}{z'^2} \right] \quad (3.15)$$

donde $z = z(r)$ es una función arbitraria y $z' = dz/dr$ está dada por (2.6) . El Casimir Q que se obtiene de esta representación es:

$$Q = \frac{z(z-1)^2}{z'^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{4} \frac{(z-1)^2}{z} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{2} \frac{i p (z^2-1)}{z} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{4} (z-1)^2 \frac{[z^2(2z'''z' - 3z'') - z'^4(p^2-1)]}{z z'^4} \quad (3.16)$$

Como puede observarse en las expresiones de los generadores y del Casimir, se tiene una función arbitraria $z(r)$ que se ha dejado libre. Así, las Funciones Hipergeométricas a emplear son del tipo ${}_2F_1(a, b; c; z(r))$.

Para conseguir los estados ligados, se emplea la representación $\mathcal{D}^{(+)}$ [59], que tiene cota inferior, por lo que el operador J_0 con autovalores m (3.6) dados por [24], [59]:

$$m = \nu + \frac{1}{2} + \sqrt{q + \frac{1}{4}} \quad (3.17)$$

donde $\nu = 0, 1, 2, \dots, \nu_{max}$

3.3 Solución Algebraica de los PNH

La base de la resolución algebraica de los estados ligados de los PNH parte de la ecuación (3.1), empleando la representación adecuada, derivada en la sección anterior.

El Casimir se hace actuar sobre los estados $\Psi(r, \phi)$ (3.3) para eliminar las derivadas tipo ∂_ϕ^n y quedando solamente una derivada ∂_r^2 . El factor que acompaña a ∂_r^2 es justamente $\mathcal{G}(r)^{-1}$:

$$\mathcal{G}(r) = -\frac{z(r)[z(r)-1]^2}{z'(r)^2} = -\frac{1}{4} \frac{R(r)}{z(r)} \quad (3.18)$$

por lo que incluirlo en (3.1) garantiza que se pueda simplificar este término. Una vez eliminadas todas las derivadas, nos queda una relación tipo $E - V(r) = f(m, p, z(r))$, donde sólo nos falta sustituir $V(r)$ por la expresión general de los PNH (2.2) e imponer las condiciones sobre $z'(r)$ y sus demás derivadas usando (2.6).

De esto se obtienen tres expresiones:

$$\begin{aligned} E c_1 &= 4q - h_1 \\ E c_0 &= h_0 + 1 - (p - m)^2 \\ E a &= f + 1 - (p + m)^2 \end{aligned} \quad (3.19)$$

Usando estas igualdades junto con la condición (3.17), se obtiene la ecuación del Espectro de Energías [7]:

$$2\nu + 1 = \alpha_\nu - \beta_\nu - \delta_\nu \quad (3.20)$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha_\nu &= \sqrt{-aE + f + 1} = p + m \\ \beta_\nu &= \sqrt{-c_0E + h_0 + 1} = p - m \\ \delta_\nu &= \sqrt{-c_1E + h_1 + 1} = \sqrt{4q + 1} \end{aligned} \quad (3.21)$$

La ecuación (3.20) da el espectro de Energías para el *PNH* más general posible. Es importante notar que α_ν , β_ν y δ_ν son raíces cuadradas, por lo que su signo dependen del caso específico que se esté resolviendo.

Cabe destacar que el número de estados ligados asociados a los *PNH* es finito, puesto que el potencial está acotado (2.13). Esto implica que existe un ν_{max} , tal que $E(\nu_{max}) \leq \frac{1+h_1}{c_1}$. Por lo tanto, el intervalo permitido para ν es $[0, \nu_{max}]$.

3.4 La Función de Onda

El espacio sobre el cual actúa la realización del álgebra definida en (3.7), (3.14) y (3.15) es [13]:

$$\Phi(r) = \frac{z^{c/2}(1-z)^{(a+b+1-c)/2}}{\sqrt{z'}} {}_2F_1(a, b, c; z) \quad (3.22)$$

donde $z = z(r)$ es la misma función usada en las secciones anteriores. Los parámetros a , b y c son aquellos que aparecen en ${}_2F_1(a, b, c; z)$ y no deben confundirse con los que aparecen en el *PNH* (2.2). Estos parámetros deben satisfacer:

$$\begin{aligned} (m+p)^2 &= (b-a)^2 \\ (p-m)^2 &= (c-1)^2 \\ 4q+1 &= (a+b-c)^2 \end{aligned} \quad (3.23)$$

Una posible solución para este conjunto de ecuaciones es:

$$\begin{aligned} b-a &= \alpha_\nu \\ c-1 &= \beta_\nu \\ a+b-c &= \delta_\nu \end{aligned} \quad (3.24)$$

Así, con estos resultados, se tiene que la función de onda es [13]:

$$\Phi_{qmp}(r) \propto z^{\beta_\nu/2}(1-z)^{\delta_\nu/2}R^{1/4}{}_2F_1(-\nu, \alpha_\nu - \nu, 1 + \beta_\nu, z) \quad (3.25)$$

donde α_ν , β_ν y δ_ν dependen de los parámetros del grupo $\{q, m, p\}$ según (3.21). Deseamos hacer hincapié en que los parámetros grupales en general dependen de ν , como se puede observar de (3.21). Este hecho nos indica que cada $\Phi_{q_\nu p_\nu m_\nu}$ es un estado del espacio soporte de $SO_{p_\nu}(2, 1)$. Si denotamos dichos espacios soportes mediante $R[SO_{p(\nu)}(2, 1)]$, tendremos que el conjunto de soluciones para un PNH, $\{\Phi_{q_\nu p_\nu m_\nu}\}$ debe ser tal que

$$\{\Phi_{q_\nu p_\nu m_\nu}\} \in \sum_{\nu=0}^{\nu_{max}} \oplus R[SO_{p(\nu)}(2, 1)] \quad (3.26)$$

Estas conclusiones pueden ser representadas por el siguiente esquema:

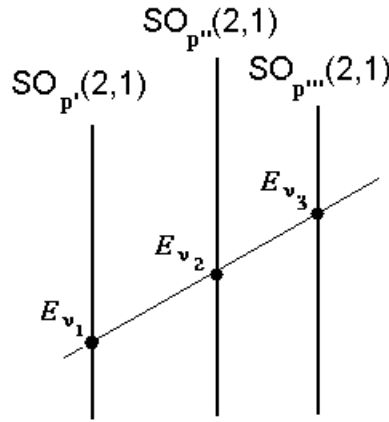


Figura 3.1: Representaciones de $SO(2, 1)$ y Energía de los PNH.

3.5 Ejemplos

Como puede verse de lo anteriormente discutido, para resolver un caso concreto de un PNH, sólo hace falta conocer la función $z(r)$ y los parámetros de Natanzon. Esto puede lograrse fácilmente usando la familia de soluciones de (2.6) e igualando el potencial con la forma general de (2.2).

Para comprender el poder y lo directo del método antes expuesto, veamos su aplicación a cuatro casos concretos: Potenciales de Pöschl-Teller, Rosen-Morse, Eckart y Hulthén.

3.5.1 Potencial de Pöschl-Teller

El Potencial de Pöschl-Teller viene dado por:

$$V_{PT} = (A - B)^2 - A(A + \alpha)sech(\alpha r)^2 + B(B - \alpha)csh(\alpha r)^2 \quad (3.27)$$

y la escogencia de parámetros es (2.10):

$$\begin{aligned}
z(r) &= \tanh(\alpha r)^2 \\
f &= \frac{(2A - \alpha)(2A + 3\alpha)}{4\alpha^2} \\
h_0 &= \frac{(2B + \alpha)(2B - 3\alpha)}{4\alpha^2} \\
h_1 &= \frac{(A - B + \alpha)(A - B - \alpha)}{\alpha^2} \\
a &= 0 \\
c_0 &= 0 \\
c_1 &= \frac{1}{\alpha^2}
\end{aligned}$$

Con este conjunto de parámetros se tiene que las expresiones (3.21) quedan como:

$$\begin{aligned}
\alpha_\nu^{(PTP)} &= 1 + \frac{1}{4} \frac{(2A - \alpha)(2A + 3\alpha)}{\alpha^2} \\
\beta_\nu^{(PTP)} &= 1 + \frac{1}{4} \frac{(2B + \alpha)(2B - 3\alpha)}{\alpha^2} \\
\delta_\nu^{(PTP)} &= 1 - \frac{E}{\alpha^2} \frac{(A - B + \alpha)(A - B - \alpha)}{\alpha^2}
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Usando estas tres expresiones y manipulando algebraicamente la ecuación (3.20) se obtiene el espectro de Energía:

$$E_\nu = -4\alpha\nu(\alpha\nu - A + B) \tag{3.29}$$

donde

$$\begin{aligned}
\nu &= 0, 1, \dots, \nu_{max} \\
\nu_{max} &= \text{intpart} \left(\frac{A - B}{2\alpha} \right) \\
&\Downarrow \\
A &> B
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Igualmente, se puede verificar que los autovalores con los que se etiquetan los estados q , m y p dependen de ν , A , B y α , según:

$$\begin{aligned}
 q_\nu^{(PTP)} &= \frac{1}{4} \frac{(A - B - 2\alpha\nu)^2 - \alpha^2}{\alpha^2} \\
 m^{(PTP)} &= \frac{1}{2} \frac{A - B + \alpha}{\alpha} \\
 p^{(PTP)} &= \frac{1}{2} \frac{A + B}{\alpha}
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

3.5.2 Potencial de Rosen-Morse

Para el **Potencial de Rosen-Morse**

$$V_{RM} = A^2 + \frac{B^2}{A^2} - A(A + \alpha) \operatorname{sech}(\alpha r)^2 + 2B \tanh(\alpha r) \tag{3.32}$$

la escogencia de parámetros es (2.12):

$$\begin{aligned}
 z(r) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh(\alpha r) \\
 f &= 4A \frac{A + \alpha}{\alpha^2} \\
 h_0 &= \frac{(B - A^2 + A\alpha)(B - A^2 - A\alpha)}{(A\alpha^2)} \\
 h_1 &= \frac{(B + A^2 + A\alpha)(B + A^2 - A\alpha)}{(A\alpha)^2} \\
 a &= 0 \\
 c_0 &= \frac{1}{\alpha^2} \\
 c_1 &= \frac{1}{\alpha^2}
 \end{aligned}$$

Con este conjunto de parámetros se tiene que las expresiones (3.21) quedan como:

$$\begin{aligned}
 \alpha^{(RMP)} &= \frac{2A + \alpha}{\alpha} \\
 \beta_\nu^{(RMP)} &= \frac{1}{A\alpha} \sqrt{(A^2 - B)^2 - A^2 E_\nu} \\
 \delta_\nu^{(RMP)} &= \frac{1}{A\alpha} \sqrt{(A^2 + B)^2 - A^2 E_\nu}
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

Usando estas tres expresiones y manipulando algebraicamente la ecuación (3.20) se obtiene el espectro de Energía:

$$E_\nu = A^2 + \frac{B^2}{A^2} - (A - \alpha\nu)^2 - \frac{B^2}{(A - \alpha\nu)^2} \quad (3.34)$$

donde

$$\begin{aligned} \nu &= 0, 1, \dots, \nu_{max} \\ \nu_{max} &= \text{intpart} \left(\frac{A \pm \sqrt{-B}}{\alpha} \right) \\ &\Downarrow \\ B &< 0 \end{aligned} \quad (3.35)$$

Igualmente, se puede verificar que los autovalores con los que se etiquetan los estados q , m y p dependen de ν , según:

$$\begin{aligned} q_\nu^{(RMP)} &= \left(B + \alpha A + A^2 - \alpha^2 \nu - 2\nu \alpha A + \nu^2 \alpha^2 \right) \\ &\quad \times \frac{(B - \alpha A + A^2 + \alpha^2 \nu - 2\nu \alpha A + \nu^2 \alpha^2)}{4(-A + \nu \alpha)^2 \alpha^2} \\ m_\nu^{(RMP)} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\alpha + 2A}{\alpha} + \frac{B - (\nu \alpha - A)^2}{(A - \nu \alpha) \alpha} \right] \\ p_\nu^{(RMP)} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\alpha + 2A}{\alpha} - \frac{B - (-A + \nu \alpha)^2}{(A - \nu \alpha) \alpha} \right] \end{aligned} \quad (3.36)$$

3.5.3 Caso Especial del Potencial de Eckart: Potencial de Hulthén

Para el Potencial de Hulthén

$$V_{Hulthén} = -V_0 \left(\frac{e^{2\alpha r}}{1 - e^{2\alpha r}} + 1 \right) \quad (3.37)$$

la escogencia de parámetros es (2.16):

$$\begin{aligned} z(r) &= 1 - e^{-2\alpha r} \\ a &= \frac{1}{\alpha^2} \\ c_0 &= 0 \\ c_1 &= \frac{1}{\alpha^2} \\ f &= -1 \\ h_0 &= 0 \\ h_1 &= -1 \end{aligned}$$

Con este conjunto de parámetros se tiene que las expresiones (3.21) quedan como:

$$\begin{aligned}\alpha^{(Hulthén)} &= \frac{\sqrt{-E_\nu}}{\alpha} \\ \beta_\nu^{(Hulthén)} &= 1 \\ \delta_\nu^{(Hulthén)} &= \frac{\sqrt{-E_\nu + V_0}}{\alpha}\end{aligned}\quad (3.38)$$

Usando estas tres expresiones y manipulando algebraicamente la ecuación (3.20) se obtiene el espectro de Energía:

$$E_\nu = - \left[\frac{V_0}{4\alpha(\nu+1)} - \alpha(\nu+1) \right]^2 \quad (3.39)$$

donde

$$\begin{aligned}\nu &= 0, 1, \dots, \nu_{max} \\ \nu_{max} &= \text{intpart} \left(\frac{-2\alpha \pm \sqrt{-V_0}}{2\alpha} \right) \\ &\Downarrow \\ V_0 &< 0\end{aligned}\quad (3.40)$$

Igualmente, se puede verificar que los autovalores con los que se etiquetan los estados q , m y p dependen de ν , según:

$$\begin{aligned}q_\nu^{(Hulthén)} &= \frac{16\nu^3\alpha^4(\nu+4) + 8\alpha^2(10\alpha^2 + V_0)\nu^2}{64\alpha^4(\nu+1)^2} \\ &\quad + \frac{16\alpha^2(2\alpha^2 + V_0)\nu + V_0(8\alpha^2 + V_0)}{64\alpha^4(\nu+1)^2} \\ m_\nu^{(Hulthén)} &= \frac{4\alpha^2\nu(\nu+1) - V_0}{8\alpha^2(\nu+1)} \\ p_\nu^{(Hulthén)} &= -\frac{V_0 - 4\alpha^2(\nu+2)(\nu+1)}{8\alpha^2(\nu+1)}\end{aligned}\quad (3.41)$$

Capítulo 4

Scattering Algebraico

Los primeros pasos en tratamientos algebraicos para scattering se dieron a finales de la década de 1960 con la publicación de un importante trabajo de D. Zwanziger [61]. En este artículo, Zwanziger calcula los desplazamientos de fase δ_l para scattering del átomo de Hidrógeno usando el grupo de Lorentz y su álgebra $so(3,1)$. Empleando el álgebra $so(4,2)$, Barut, et al. [8] logran una descripción conjunta de estados ligados y de scattering para el mismo sistema. Esta misma álgebra fue empleada para el tratamiento de sistemas con cargas eléctricas y magnéticas [9], calculándose transiciones continuo-continuo y discreto-continuo (scattering y efecto fotoeléctrico). El tratamiento algebraico del scattering coulombiano fue extendido en 1979 por W. Rasmussen y S. Salamó al caso de N dimensiones, empleando un álgebra $so(N+1,1)$ [44].

En años recientes se le ha prestado nuevamente gran atención a las teorías de grupos dinámicos, dada su aplicabilidad al scattering de algunos sistemas cuánticos. Un importante desarrollo contemporáneo fue presentado en [2], [3], [5]. Se puede determinar algebraicamente la matriz S para scattering de sistemas cuyo Hamiltoniano se puede expresar como una función del Casimir de un grupo no-compacto \mathcal{G} . El cálculo explícito de la matriz S se logra escribiendo los operadores infinitesimales del grupo dinámico \mathcal{G} en términos de los del grupo asintótico \mathcal{G}^0 , que describe el problema en ausencia de interacciones.

En el presente capítulo se estudiará con cierto detalle un caso simple de scattering algebraico: El Potencial de Pöschl-Teller Reducido (*RPTP*) unidimensional. Este tratamiento algebraico usando $so(2,1)$ permite una introducción de las técnicas básicas del scattering algebraico. Igualmente, sirve de preámbulo para la formulación puramente algebraica que realiza Alhassid, et al. en [3], que se discutirá con amplio detalle. En este formalismo, denominado *Conexión Euclídea*, los generadores asintóticos, que se asume cierran un álgebra $so(2,1)$, son expandidos como funciones de los generadores del álgebra euclídea $e(2)$. Adicionalmente, la base de estados asintóticos $\{|j, m\rangle^{(\infty)}\}$ se escribe en término de representaciones de $E(2)$, dándole un carácter puramente algebraico al formalismo. Con este procedimiento se consigue una expresión general para el coeficiente de reflexión $R_m(k)$ para sistemas cuyo Hamiltoniano puede escribirse como una función del Casimir de $so(2,1)$.

4.1 Potencial de Pöschl-Teller Reducido

Las ideas básicas del trabajo de Zwanziger [61], con la descripción de los estados asintóticos del sistema coulombiano usando el grupo de Lorentz, como también los realizados por el grupo de Alhassid, et al. [2] dieron piso para que en 1984 A. Frank y K.B. Wolf [20] consiguieran una descripción completa de estados ligados y de scattering a partir del álgebra $so(2, 1)$ para el potencial de Pöschl-Teller reducido (*RPTP*). El problema planteado por ellos [20] es el **caso unidimensional**, que difiere del interés de este trabajo. Sin embargo, resulta un ejemplo instructivo para introducir el scattering algebraico.

Empleando un álgebra $so(2, 1)$ (3.4), con la realización [26]:

$$\begin{aligned} J_x &= -i(y\partial_z + z\partial_y) \\ J_y &= i(x\partial_z + z\partial_x) \\ J_z &= -i(x\partial_y - y\partial_x) \end{aligned} \tag{4.1}$$

donde se ha hecho uso de la convención

$$\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$$

con $i = 1, 2, 3$ y $x_1 = x$, $x_2 = y$ y $x_3 = z$.

Efectuando un cambio de variables a coordenadas polares hiperbólicas

$$\begin{aligned} x &= r \cosh \rho \cos \theta \\ y &= r \cosh \rho \sin \theta \\ z &= r \sinh \rho \end{aligned} \tag{4.2}$$

y luego realizando una transformación de similaridad por $\cosh \rho$, se tienen los generadores siguientes:

$$\begin{aligned} J_{\pm} &= e^{\pm i\theta} \left[\mp \partial_{\rho} + \tanh \rho \left(\pm \frac{1}{2} \mp i\partial_{\theta} \right) \right] \\ J_z &= -i\partial_{\theta} \end{aligned} \tag{4.3}$$

El Casimir correspondiente está dado por:

$$Q = \partial_{\rho}^2 - \operatorname{sech}^2 \rho \left(\partial_{\theta}^2 + \frac{1}{4} \right) - \frac{1}{4} \tag{4.4}$$

Un cálculo detallado de la obtención de esta representación y de las transformaciones a realizar puede encontrarse en [26]. Si se denotan por $\{|k, m\rangle\}$ la base de autoestados de $\{Q, J_z\}$, de las relaciones de autovalores dadas en el anexo **A** se tiene que la forma de los estados $|k, m\rangle$ está dada por:

$$|k, m\rangle = e^{im\theta} u_m^k(\rho) \quad (4.5)$$

Combinando (4.4) con (4.5) se tiene que:

$$\begin{aligned} \left(Q + \frac{1}{4}\right) u_m^k(\rho) &= \left[\partial_\rho + \operatorname{sech}^2(\rho) \left(m^2 - \frac{1}{4}\right)\right] u_m^k(\rho) \\ &= \left(q + \frac{1}{4}\right) u_m^k(\rho) \end{aligned} \quad (4.6)$$

donde q es el autovalor del Casimir, estudiado en el anexo **A**. Como sabemos, se tiene que

$$\begin{aligned} q &= -k(-k+1) \\ k &> 0 \end{aligned}$$

al considerar la representación D^+ del álgebra $so(2, 1)$. Utilizando el hecho que

$$q + \frac{1}{4} = \left(k - \frac{1}{2}\right)^2 \quad (4.7)$$

escribimos la ecuación (4.6) de la siguiente forma:

$$\left[-\partial_\rho^2 - \left(m^2 - \frac{1}{4}\right) \operatorname{sech}^2(\rho)\right] u_m^k(\rho) = E_k(m) u_m^k(\rho) \quad (4.8)$$

con

$$E_k(m) = -\left(k - \frac{1}{2}\right)^2 \quad (4.9)$$

Para comparar estos resultados con los obtenidos en el capítulo **3** (3.29), debemos estudiar los valores de k . Cabe destacar que la conexión entre este tratamiento y el realizado por Cordero y Salamó [13] no es directa. El valor de q empleado en (4.6) y (4.7) no es el mismo que el de las expresiones (3.21). En ambos casos se trata de dos realizaciones distintas del álgebra $so(2, 1)$ con parámetros grupales distintos. Dado que ambos conjuntos de generadores cierran un mismo álgebra, existe una transformación

de similitud $\mathcal{T}_{(KBW \rightarrow CS)}$ que conecta ambas realizaciones (4.3) y (5.6). Luego de un cambio de variables, se tiene que:

$$\mathcal{T}_{(KBW \rightarrow CS)} = \tanh(r)^{m-\frac{1}{2}} \sqrt{\cosh(r)} e^{-2p \operatorname{arctanh}(e^r)} \quad (4.10)$$

Como es evidente de (4.8), el valor de m es fijo para una profundidad de potencial dada. Del apéndice **A** sabemos que en las representaciones D^+ , se tiene que (3.17):

$$m = \nu + \frac{1}{2} + \sqrt{q + \frac{1}{4}}$$

donde $\nu = 0, 1, 2, \dots, \nu_{max}$. Así, usando (3.17) y (4.7), se tiene que:

$$\begin{aligned} k &= \frac{1}{2} \left(m - \nu + \frac{1}{2} \right) \\ \nu &= 0, 1, 2, \dots, \nu_{max} \end{aligned} \quad (4.11)$$

De las ecuaciones (4.6) y (4.9) se ha establecido una conexión directa entre el casimir Q de $so(2,1)$ y el Hamiltoniano de un $RPTP$ (4.8). Así, en (4.9) hemos expresado la energía del sistema en función del autovalor q de dicho casimir. Para completar el estudio del $RPTP$ estamos interesados en el scattering. En este caso, la energía ya no es discreta, si no que pertenece al continuo. Del apéndice **A** sabemos que se dispone de representaciones discretas, como la $\mathcal{D}^{(+)}$ empleada para describir los estados ligados, y de representaciones continuas \mathcal{C} . De esta forma, es natural emplear una representación \mathcal{C} , con $k = -\frac{1}{2} + i\kappa$, donde $\kappa \in \mathfrak{R}$ para poder describir el sistema con energía $E = \kappa^2$. Como veremos a continuación, la representación \mathcal{C} nos permite calcular el coeficiente de reflexión del sistema, teniendo de esta manera un tratamiento conjunto para los estados ligados y de scattering a partir del mismo álgebra $so(2,1)$.

El tratamiento del sector de scattering procede de la siguiente forma. Se definen los operadores asintóticos $J_+^{(\pm\infty)}$, tomando el límite para cuando $\rho \rightarrow \pm\infty$ a J_+ (4.3)

$$J_+^{(\pm\infty)} \equiv \lim_{\rho \rightarrow \pm\infty} J_+ = e^{i\theta} \left(-\partial_\rho \pm \frac{1}{2} \mp i\partial_\theta \right) \quad (4.12)$$

La base de funciones asintóticas $\{|\psi^\pm\rangle\}^1$ se escribe como:

$$\begin{aligned} |\psi^-\rangle &= \lim_{\rho \rightarrow -\infty} |k, m\rangle = a_m e^{im\theta} e^{i\kappa\rho} + c_m e^{im\theta} e^{-i\kappa\rho} \\ |\psi^+\rangle &= \lim_{\rho \rightarrow +\infty} |k, m\rangle = b_m e^{im\theta} e^{i\kappa\rho} \end{aligned} \quad (4.13)$$

¹Se sigue la notación dada en [20]. Para mantener la consistencia con lo estudiado en el anexo **B**, se deberían emplear $|\psi^{in}\rangle$ y $|\psi^{out}\rangle$ en lugar de $|\psi^+\rangle$ y $|\psi^-\rangle$, respectivamente.

Usando estas expresiones junto con la acción de J_+ sobre $|k, m\rangle$ {ver apéndice **A**, ecuación (A.16)}

$$J_+|k, m\rangle = \sqrt{\left(\frac{1}{2} + m - i\kappa\right)\left(-\frac{1}{2} - m - i\kappa\right)}|k, m + 1\rangle \quad (4.14)$$

y tomando que:

$$\lim_{\rho \rightarrow \pm\infty} (J_+|k, m\rangle) = J_+^{(\pm\infty)}|\psi^\pm\rangle \quad (4.15)$$

se pueden obtener relaciones de recurrencia para estados contiguos $|k, m\rangle$ y $|k, m + 1\rangle$ al tomar el límite de la expresión (4.14)

$$\begin{aligned} \lim_{\rho \rightarrow \pm\infty} (J_+|k, m\rangle) &= \lim_{\rho \rightarrow \pm\infty} \left(\sqrt{\left(\frac{1}{2} + m - i\kappa\right)\left(-\frac{1}{2} - m - i\kappa\right)}|k, m + 1\rangle \right) \\ &= \sqrt{\left(\frac{1}{2} + m - i\kappa\right)\left(-\frac{1}{2} - m - i\kappa\right)}|\psi^\pm\rangle_{(m+1)} \end{aligned} \quad (4.16)$$

e igualando esta expresión con la acción del generador asintótico (4.12), según (4.15). Así, pues, se obtienen relaciones de recurrencia para los coeficientes a_m , b_m y c_m :

$$\begin{aligned} a_{m+1} &= i \left[\frac{\frac{1}{2} + m - i\kappa}{-\frac{1}{2} - m - i\kappa} \right]^{1/2} a_m \\ b_{m+1} &= i \left[\frac{-\frac{1}{2} - m - i\kappa}{\frac{1}{2} + m - i\kappa} \right]^{1/2} b_m \\ c_{m+1} &= -i \left[\frac{-\frac{1}{2} - m - i\kappa}{\frac{1}{2} + m - i\kappa} \right]^{1/2} c_m \end{aligned} \quad (4.17)$$

Por inducción, se consiguen expresiones para los coeficientes a_m , b_m y c_m con factores a_0 , b_0 y c_0 indeterminados:

$$\begin{aligned} a_m &= e^{\frac{i}{2}m\pi} \sqrt{(-1)^m} \sqrt{\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + m - i\kappa\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + m + i\kappa\right)}} \sqrt{\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\kappa\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - i\kappa\right)}} a_0 \\ b_m &= \frac{e^{\frac{i}{2}m\pi}}{\sqrt{(-1)^m}} \sqrt{\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + m + i\kappa\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + m - i\kappa\right)}} \sqrt{\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\kappa\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - i\kappa\right)}} b_0 \\ c_m &= e^{\frac{i}{2}m\pi} \sqrt{(-1)^m} \sqrt{\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + m - i\kappa\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + m + i\kappa\right)}} \sqrt{\left[\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\kappa\right)\right]^3 \Gamma\left(\frac{1}{2} - i\kappa\right)} c_0 \end{aligned} \quad (4.18)$$

Tomando en cuenta las definiciones de los estados asintóticos (4.13), se consiguen los coeficientes de transmisión T_m y de reflexión R_m , definidos como:

$$\begin{aligned} R_m &= \frac{c_m}{a_m} \\ T_m &= \frac{b_m}{a_m} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Así, se tiene que:

$$R_m^{(PTP)}(\kappa) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\kappa\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + m + i\kappa\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - i\kappa\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + m - i\kappa\right)} \Delta_0(\kappa) \quad (4.20)$$

donde²

$$\begin{aligned} \Delta_0(\kappa) &\equiv \frac{a_0}{b_0} \\ &= \frac{\Gamma(i\kappa)}{\Gamma(-i\kappa)} \end{aligned} \quad (4.21)$$

La matriz S para este problema está dada por³:

$$S_m = \begin{pmatrix} R_m & T_m \\ T_m & R_m \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

Hemos estudiado un caso sencillo de scattering algebraico en el que se ha encontrado una relación directa entre el Casimir de un álgebra $so(2, 1)$ y la ecuación de Schrödinger para un $RPTP$ unidimensional. El cálculo de la matriz S ha requerido de una realización explícita de los generadores del álgebra y el estudio de su comportamiento asintótico.

Tratando de formalizar el cálculo algebraico asociado a problemas de scattering, otros autores han seguido los lineamientos de [20] para lograr un formalismo más elegante. Alhassid et al. estudian los casos en que los generadores asintóticos mantienen el álgebra original. Usando las técnicas de expansiones de grupos, los autores consiguen expresar los generadores asintóticos como funciones de generadores del grupo euclídeo $E(2)$, por lo que este tratamiento recibe el nombre de *Conexión Euclídea* [3]. Alhassid et al. han estudiado las conexiones euclídeas para las álgebras $so(2, 1)$ [3], $so(2, 2)$ y $so(2, 3)$ [4]. Nos limitaremos a estudiar el caso de $so(2, 1)$.

²Este resultado no coincide con el reportado por Frank y Wolf en [20], pero si es consistente con los resultados obtenidos por Alhassid, et al. en [3]. Por ello confiamos en que la discrepancia se debe a errores en la transcripción de [20].

³Esta expresión se deriva para potenciales asintóticamente simétricos y su deducción puede encontrarse en [23].

4.2 Conexión Euclídea para $so(2, 1)$

En 1986 Alhassid et al. publican un importante trabajo [3] en el cual formalizan la descripción algebraica de los estados asintóticos en los problemas de scattering, permitiendo así un cálculo puramente algebraico de la matriz S . En dicha referencia, se escriben los generadores J_{\pm} como funciones (expansiones) de los generadores del grupo $E(2)$ y se consiguen expresiones generales para el coeficiente de reflexión para problemas cuyo Hamiltoniano puede escribirse como una función del Casimir de $so(2, 1)$:

$$\begin{aligned} H &= h \left[Q + \frac{1}{4} \right] \\ &\Downarrow \\ E_j &= h \left[q + \frac{1}{4} \right] \end{aligned}$$

En la presente sección revisaremos con cierto detalle dicha referencia.

4.2.1 Álgebra Euclídea $e(2)$

El álgebra euclídea $e(2)$ cumple las siguientes reglas de conmutación:

$$\begin{aligned} [L_z, P_x] &= iP_y \\ [L_z, P_y] &= -iP_x \\ [P_x, P_y] &= 0 \end{aligned} \tag{4.23}$$

Una realización en coordenadas cartesianas es:

$$\begin{aligned} P_i &= -i\partial_i \\ L_z &= -i\epsilon_{ijz}x_i\partial_j \end{aligned} \tag{4.24}$$

Dado que nos interesa resolver el problema radial, es conveniente llevar esta representación a coordenadas polares:

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos(\phi) \\ y &= \rho \sin(\phi) \end{aligned}$$

donde ρ es la variable radial y ϕ la angular⁴. En estas coordenadas, la realización (4.24) queda, luego de una transformación de similaridad por $\sqrt{\rho}$, como:

⁴Se sigue por comodidad la notación empleada por Alhassid, et al. en [2]

$$\begin{aligned}
P_x &= -i \left[\cos(\phi) \partial_\rho - \frac{1}{\rho} \left(\sin(\phi) \partial_\phi + \frac{1}{2} \cos(\phi) \right) \right] \\
P_y &= -i \left[\sin(\phi) \partial_\rho + \frac{1}{\rho} \left(\cos(\phi) \partial_\phi - \frac{1}{2} \sin(\phi) \right) \right] \\
L_z &= -i \partial_\phi
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Introduciendo los operadores escalera P_\pm [24] y empleando la representación anterior (4.25), se tiene que:

$$\begin{aligned}
P_\pm &= P_x \pm iP_y \\
&= e^{\pm i\phi} \left[-i\partial_\rho + \frac{1}{\rho} \left(\pm i\partial_\phi + \frac{1}{2} \right) \right]
\end{aligned} \tag{4.26}$$

El Casimir \mathbf{P}^2 está dado por:

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}^2 &= P_x^2 + P_y^2 \\
&= P_+ P_- \\
&= -\partial_\rho^2 - \frac{1}{\rho^2} \left(\partial_\phi^2 + \frac{1}{4} \right)
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Para la descripción de los estados asintóticos necesitamos estudiar el comportamiento de los generadores de $e(2)$ (4.25) cuando $\rho \rightarrow \infty$. De las expresiones (4.26) y (4.25), es inmediato ver que:

$$\begin{aligned}
P_\pm^{(\infty)} &= -ie^{\pm i\phi} \partial_\rho \\
L_z^{(\infty)} &= -i\partial_\phi \\
\mathbf{P}^2(\infty) &= -\partial_\rho^2
\end{aligned} \tag{4.28}$$

que también cierran un álgebra $e(2)$.

4.2.2 Estados Asintóticos

Sea $\{|j, m\rangle\}$ una base completa de estados de $SO(2, 1)$ y $\{|j, m\rangle^{(\infty)}\}$ la correspondiente base de estados asintóticos. Como se vio en el trabajo de Frank [20], los estados asintóticos se expresan como una combinación lineal de exponenciales (4.13), por lo que se puede escribir

$$|j, m\rangle^{(\infty)} = A_m | -k, m\rangle^{(\infty)} + B_m | +k, m\rangle^{(\infty)} \quad (4.29)$$

donde

$$|\pm k, m\rangle^{(\infty)} = e^{\pm ik\rho} e^{im\phi} \quad (4.30)$$

forman una base de autoestados de $e(2)$. La acción de los generadores euclídeos sobre esta base está dada por [3], [24]:

$$\begin{aligned} P_{\pm}^{(\infty)} |k, m\rangle^{(\infty)} &= k |k, m \pm 1\rangle^{(\infty)} \\ P_{\pm}^{(\infty)} | -k, m\rangle^{(\infty)} &= -k | -k, m \pm 1\rangle^{(\infty)} \\ \mathbf{P}^2 |\pm k, m\rangle^{(\infty)} &= k^2 |\pm k, m\rangle^{(\infty)} \end{aligned} \quad (4.31)$$

4.2.3 Fórmula de Conexión

Como hemos visto, se pueden escribir los estados asintóticos (4.29) en términos de estados $\{|\pm k, m\rangle^{(\infty)}\}$ (4.30) que forman una representación del grupo euclídeo. Como se mencionó anteriormente, se está interesado en estudiar el problema de scattering usando generadores asintóticos que preserven el álgebra de los generadores con los que se estudian los estados ligados. Así, pues, cabe la pregunta si dados unos generadores $\{J_{\pm}, J_z\}$, que cierran un álgebra $so(2, 1)$, se pueden escribir los correspondientes generadores asintóticos $\{J_{\pm}^{(\infty)}, J_z^{(\infty)}\}$ como una expansión del grupo euclídeo. Es decir, si usando el conjunto de operadores $\{P_{\pm}^{(\infty)}, (P_{\pm}^{(\infty)})^2, L_z^{(\infty)}, (L_z^{(\infty)})^2, L_z^{(\infty)} P_{\pm}^{(\infty)}, P_{\pm}^{(\infty)} L_z^{(\infty)}\}$ [3] se puede expandir $J_{\pm}^{(\infty)}$.

Dado que se está interesado en representaciones unitarias [10], [24], [59], se tiene que [3]:

$$\begin{aligned} J_0^{(\infty)} &= L_z^{(\infty)} \\ J_-^{(\infty)} &= J_+^{(\infty)\dagger} \end{aligned} \quad (4.32)$$

De las relaciones de conmutación

$$[J_0^{(\infty)}, J_{\pm}^{(\infty)}] = \pm J_{\pm}^{(\infty)}$$

el conjunto de operadores de $e(2)$ que se pueden emplear queda reducido y se tiene que:

$$\begin{aligned}
J_+ &= \alpha P_+^{(\infty)} + \beta L_z^{(\infty)} P_+^{(\infty)} \\
J_- &= \alpha^* P_-^{(\infty)} + \beta^* P_-^{(\infty)} L_z^{(\infty)}
\end{aligned} \tag{4.33}$$

donde se ha hecho uso de (4.32). Las cantidades α y β en (4.33) son los coeficientes constantes de la expansión y son cantidades complejas.

Para cerrar un álgebra $so(2,1)$ con estos operadores falta probar el conmutador

$$[J_+^{(\infty)}, J_-^{(\infty)}] = -2J_0^{(\infty)}$$

Empleando las relaciones de conmutación (4.23) y la acción de los generadores (4.31) sobre la representación (4.30), se obtiene que α y β cumplen:

$$\begin{aligned}
\beta\beta^* &= \frac{1}{k^2} \\
\alpha^*\beta + \beta^*\alpha + \beta^*\beta &= 0
\end{aligned} \tag{4.34}$$

de donde es inmediato ver que:

$$\begin{aligned}
\beta &= \pm \frac{e^{i\gamma}}{k} \\
\alpha &= \beta \left(-\frac{1}{2} + i\delta \right)
\end{aligned} \tag{4.35}$$

con la restricción que γ y δ son reales. Dado que los generadores $\{J_{\pm}^{(\infty)}, J_z^{(\infty)}\}$ cierran un álgebra $so(2,1)$, usando (4.33) y (4.34) el autovalor del Casimir $Q^{(\infty)}$ del álgebra asintótica $so(2,1)$ puede expresarse en términos de δ por [3]:

$$\begin{aligned}
Q^{(\infty)} &= J_0^{(\infty)} - (J_0^{(\infty)})^2 - J_+^{(\infty)} J_-^{(\infty)} \\
q^{(\infty)} &= -\frac{1}{4} - \delta^2
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Recordando que los estados de scattering pertenecen a la representación continua $\mathcal{C}_j^{1/2}$ [3], [59], donde el j del autovalor del Casimir Q cumple [3]

$$j = -\frac{1}{2} + i f(k) \tag{4.37}$$

se tiene que

$$\begin{aligned} q^{(\infty)} &= j(j+1) \\ &= -\frac{1}{4} - f^2(k) \end{aligned} \quad (4.38)$$

de donde inmediatamente resulta que:

$$\delta = \pm f(k) \quad (4.39)$$

Cabe destacar que se ha seguido la notación empleada por Alhassid et al. en [3]. El $f(k)$ mencionado en las expresiones anteriores no debe ser confundido con la amplitud de scattering $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ (B.19) discutida en el anexo B.

Tomando en cuenta las dos representaciones con las que se está trabajando $\{|\pm k, m\rangle^{(\infty)}\}$ se escribe la expresión más general para $J_+^{(\infty)}$ en término de generadores de $e(2)$ [3]

$$J_+^{(\infty)}(\pm k) = \frac{e^{i\gamma_{\pm}(k)}}{\pm k} \left[\left(-\frac{1}{2} \mp if(k) \right) P_+^{(\infty)} + L_z^{(\infty)} P_+^{(\infty)} \right] \quad (4.40)$$

donde se hace la distinción que $J_+^{(\infty)}(+k)$ actúa sobre los estados $\{|+k, m\rangle^{(\infty)}\}$ mientras que $J_+^{(\infty)}(-k)$ lo hace sobre $\{|-k, m\rangle^{(\infty)}\}$. En esta expresión, $\gamma_{\pm}(k)$ son dos funciones reales arbitrarias de k , mientras que $f(k)$ está determinada por [3]

$$k^2 = h(-f^2(k)) \quad (4.41)$$

donde $h(\eta)$ es la función que conecta el Casimir con el Hamiltoniano o, equivalentemente, que conecta el autovalor del Casimir con el espectro de energía de los estados ligados

$$E_j = h \left[\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 \right] \quad (4.42)$$

4.2.4 Expresión General de $R_m(k)$

Ya se tiene una expresión general para $J_+^{(\infty)}$ (4.40) y se conoce la base del álgebra asintótica $so(2, 1)$ en término de representaciones de $e(2)$ (4.29). Es claro que se puede hallar una expresión general para R_m que corresponda al caso general de problemas con simetría $su(1, 1) \sim so(2, 1)$. Para ello se procede de forma análoga a Frank y Wolf [20].

Dado que los estados asintóticos (4.29) forman una representación de $so(2, 1)$, se conoce la acción {ver apéndice **A**, ecuación (A.16)} del operador $J_+^{(\infty)}$ (4.40), dada por

$$\begin{aligned} J_{\pm}^{\infty} |j, m\rangle^{\infty} &= \sqrt{(m \mp j)(m \pm j \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle^{\infty} \\ J_0^{\infty} |j, m\rangle^{\infty} &= m |j, m\rangle^{\infty} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Empleando estas expresiones y haciendo actuar (4.40) sobre (4.29) se tienen relaciones de recurrencia para los coeficientes A_m y B_m , de forma análoga a como se hizo en (4.16). Resolviendo por inducción se llegan a expresiones para A_m y B_m con los cuales se calcula $R_m = B_m/A_m$:

$$R_m(k) = e^{im[\gamma_+ + \gamma_-]} \frac{\Gamma \left[m + \frac{1}{2} - if(k) \right]}{\Gamma \left[m + \frac{1}{2} + if(k) \right]} \Delta(k) \quad (4.44)$$

donde $\Delta(k)$ es un factor a determinar. El carácter analítico de la matriz S indica que los polos de la expresión (4.44)

$$f(k) = -i \left(m + \frac{1}{2} + n \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.45)$$

deben corresponder a energías de los estados ligados [55]. De la ecuación (4.41), se sabe que las energías de los estados ligados se encuentran en

$$f(k) = -i \left(j + \frac{1}{2} \right) \quad (4.46)$$

por lo que los polos de (4.44) están localizados correctamente para $n = 0, 1, \dots, m - m_0$. Sin embargo, para $n > m - m_0$ también se tienen polos, que deben ser cancelados. Esto se logra reescribiendo (4.44):

$$R_m(k) = e^{im[\gamma_+ + \gamma_-]} \frac{\Gamma \left[m + \frac{1}{2} - if(k) \right]}{\Gamma \left[m + \frac{1}{2} + if(k) \right]} \frac{\Gamma \left[m_0 + \frac{1}{2} + if(k) \right]}{\Gamma \left[m_0 + \frac{1}{2} - if(k) \right]} R_{m_0}(k) \quad (4.47)$$

donde $R_{m_0}(k)$ es un factor constante y m_0 está relacionada con la representación proyectiva continua [3] y cumple $m_0 \in [0, 1)$, al ser la parte fraccionaria del j correspondiente a $D^{(+)}$.

Hemos conseguido con éxito una expresión general para el coeficiente de reflexión $R_m(k)$ de sistemas cuyo Hamiltoniano puede escribirse como una función del Casimir de un álgebra $so(2, 1)$. Para emplear la fórmula (4.47) basta conseguir los parámetros $\gamma_{\pm}(k)$ y $f(k)$. Los $\gamma_{\pm}(k)$ salen inmediatamente de comparar la acción de los generadores asintóticos con los de la expansión (4.40). El parámetro $f(k)$ dependerá de la relación que exista entre el autovalor q del casimir y la energía de los estados ligados. El valor de m_0

está determinado por q , dado que es la parte entera del j de los estados ligados. En [3] los autores no discuten el cálculo del factor $R_{m_0}(k)$. Basta con decir que es una constante que depende sólo de la energía y que debe ser determinado para el caso particular que se esté estudiando.

4.3 Scattering Potencial de los PNH usando $SO(2, 2)$

El problema de scattering algebraico de los PNH ya había sido tratado por Alhassid, et al. [5], empleando a $SO(2, 2)$ como grupo potencial. El resultado obtenido por ellos es comparado directamente con el de Natanzon [41], siendo el coeficiente de reflexión:

$$\mathfrak{R}_{(Alhassid)} = \left(\frac{\rho}{4}\right)^{\lambda_1} \frac{\Gamma\left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1 + 1 + \mu}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1 + 1 - \mu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\lambda_0 - \lambda_1 + 1 + \mu}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\lambda_0 - \lambda_1 + 1 - \mu}{2}\right)} \Delta(k) \quad (4.48)$$

con:

$$\Delta(k) = \frac{\Gamma\left(i k \sqrt{c_1}\right)}{\Gamma\left(-i k \sqrt{c_1}\right)} 4^{-i k \sqrt{c_1}} \quad (4.49)$$

Los parámetros λ_0 , λ_1 y μ se relacionan con los correspondientes a las funciones hipergeométricas ${}_2F_1(a, b; c; r)$ por

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= c - 1 \\ \lambda_1 &= a + b - c \\ \mu &= b - a \end{aligned} \quad (4.50)$$

que recuerda a las expresiones en (3.24). Esto será discutido con mayor detalle en el próximo capítulo, donde se resuelve el problema de scattering de los PNH empleando $SO(2, 1)$.

Capítulo 5

Scattering de los PNH

Dado que en el formalismo presentado por Cordero y Salamó [13] se encontró una realización de $so(2,1)$ con la cual (Capítulo 3) se puede determinar el espectro de estados ligados de los PNH , es natural extender dichos resultados para los estados de scattering siguiendo los procedimientos discutidos en el capítulo anterior.

Se inicia el capítulo con una discusión de las propiedades de la función $z(r)$ que resultarán indispensables en la discusión del álgebra asintótica que se deriva de la empleada en [13]. La presentación del formalismo de la *Conexión Euclídea* [3] se inicia con un ejemplo particular: el *PTP*. Luego de trabajar detalladamente dicho potencial, se procede a extender el tratamiento al caso general de los PNH . Los Potenciales de *Rosen-Morse* y de *Hulthén* sirven de ejemplos para cerrar el capítulo.

5.1 La función $z(r)$

Los potenciales de Natanzon dependen de seis parámetros, de los cuales tres están directamente relacionados con la función $z(r)$: a , c_0 y c_1 . Como ya se discutió en el capítulo 2, la función $z(r)$ es en principio arbitraria, mas no del todo. Ciertas condiciones le deben ser impuestas para que el potencial $V(r)$ sea finito en el intervalo $r \in [0, \infty)$ [40]. Esto equivale a pedir que el polinomio $R(r)$ (2.3) no tenga ceros en el intervalo $z \in [0, 1]$. Sobre los parámetros de $z(r)$ se imponen las condiciones:

$$\begin{aligned} R(r) &= az(r)^2 + (c_1 - c_0 - a)z(r) + c_0 \\ &\Downarrow \\ c_0 &\geq 0 \\ c_1 &\geq 0 \\ a &< (\sqrt{c_1} + \sqrt{c_0}) \end{aligned} \tag{5.1}$$

En [41], Natanzon discute de forma más clara el comportamiento asintótico de $z(r)$ empleando la transformación inversa, $r(z)$ [40], asumiendo que cuando $z = 1$ se tiene que

$r \rightarrow \infty$. Esta condición supone que $c_1 > 0$. La derivada de Schwartz de z respecto a r , definida como:

$$\{z, r\} \equiv \frac{z''}{z'} \left[\frac{z'''}{z''} - \frac{3}{2} \frac{z'''}{z'} \right] \quad (5.2)$$

está dada por:

$$\begin{aligned} \{z, r\} = & -\frac{4z^6 a^2 + 12az^5 \tau + (-12\tau a + 3\tau^2 + 24c_0 a)z^4}{2(a(z)^2 + \tau z + c_0)^3} \\ & -\frac{[3(5a - c_1)(a - c_1) + 3c_0(14a + c_0) - 6c_1 c_0]z^3}{2(a(z)^2 + \tau z + c_0)^3} \\ & -\frac{[3c_0(5c_0 + 14a - 6c_1) + 3(a - c_1)^2]z^2 + 12\tau z c_0 + 4c_0^2}{2(a(z)^2 + \tau z + c_0)^3} \end{aligned} \quad (5.3)$$

donde se ha hecho uso de (2.6):

$$\frac{dz}{dr} = z' = \frac{2z[z-1]}{\sqrt{R(z)}}$$

Si se toma el límite $r \rightarrow \infty$ de (5.3), se cumple que:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \{z, r\} = -\frac{2}{c_1} \quad (5.4)$$

Igualmente, en [41], Natanzon argumenta que cuando $r \rightarrow \infty$ que el comportamiento de $1 - z$ está dado por:

$$1 - z \sim \rho e^{-2r/\sqrt{c_1}} \equiv e^{-2(r+r^+)/\sqrt{c_1}} \quad (5.5)$$

donde ρ y r^+ son parámetros que dependen de la transformación $r(z)$ [40].

5.2 Scattering del PTP

El *Potencial de Pöschl-Teller* (2.8), especialmente en su versión reducida (2.9), ha sido ampliamente estudiado por varios autores [2], [3], [5], [20], [31] y representa el ejemplo clásico para introducir los métodos algebraicos para la descripción conjunta de estados ligados y de scattering [26]. En particular, lo hemos empleado en el capítulo anterior para discutir conceptos básicos de scattering algebraico. Es por ello que se trabajará este potencial a manera de *preludio* al caso general de los PNH.

5.2.1 Realización de $so(2, 1)$ y Álgebra Asintótica

Como se vió en el capítulo 2, los parámetros de Natanzon para este potencial son (2.10):

$$\begin{aligned}
 z(r) &= \tanh(\alpha r)^2 \\
 f &= \frac{(2A - \alpha)(2A + 3\alpha)}{4\alpha^2} \\
 h_0 &= \frac{(2B + \alpha)(2B - 3\alpha)}{4\alpha^2} \\
 h_1 &= \frac{(A - B + \alpha)(A - B - \alpha)}{\alpha^2} \\
 a &= 0 \\
 c_0 &= 0 \\
 c_1 &= \frac{1}{\alpha^2}
 \end{aligned}$$

La realización (3.14) y (3.15), estudiada en el capítulo 3, quedará como:

$$\begin{aligned}
 J_0 &= -i\partial_\phi \\
 J_\pm &= -e^{\pm i\phi} \left\{ \pm \frac{1}{2\alpha} \partial_r + \frac{i [1 + \tanh^2(\alpha r)]}{2 \tanh(\alpha r)} \partial_\phi \right\} \\
 &\quad + \frac{1}{2} e^{\pm i\phi} \left[\tanh(\alpha r) \left(p \pm \frac{1}{2} \right) - \frac{\left(p \mp \frac{1}{2} \right)}{\tanh(\alpha r)} \right]
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

que cierra un álgebra $so(2, 1)$. Tomando los límites $z \rightarrow 1$, se tienen los generadores del álgebra asíntótica son:

$$\begin{aligned}
 J_0^{(\infty)} &= -i\partial_\phi \\
 J_\pm^{(\infty)} &= -e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{1}{2\alpha} \partial_r + i\partial_\phi \pm \frac{1}{2} \right) \\
 Q^{(\infty)} &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\alpha^2} \partial_r^2 - 1 \right)
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

Resulta interesante que los operadores asíntóticos obtenidos en (5.7) mantienen un álgebra $so(2, 1)$. Así, con esta realización podemos usar el formalismo de la *Conexión Euclídea* para $so(2, 1)$.

5.2.2 Conexión Euclídea para el *PTP*

De lo estudiado en el capítulo anterior, estos generadores pueden expandirse como funciones de los generadores del grupo euclídeo $E(2)$ [3]. Dado que se tiene una expresión

general de J_{\pm} en término de dichos generadores (4.40), basta conseguir los parámetros de la expansión $f(k)$ y $\gamma_{\pm}(k)$. Esto se hace estudiando la acción de la expresión (4.40) sobre un estado asintótico tipo $e^{im\phi}u(r)$ e igualándola con la del generador asintótico calculado anteriormente (5.7). Es decir,

$$\begin{aligned} J_{+E(2)}^{(\infty)}(k)|k, m\rangle^{\infty} &= \frac{e^{i\gamma_+(k)}}{k} \left[\left(-\frac{1}{2} - if(k) \right) P_+^{(\infty)} + L_z^{(\infty)} P_+^{(\infty)} \right] |k, m\rangle^{\infty} \\ &= -\frac{1}{2k} e^{i(\gamma_+(k)+\phi)} \{ [i - 2f(k)] \partial_r + 2 \partial_r \partial_{\phi} \} e^{im\phi} u(r) \end{aligned} \quad (5.8)$$

debe ser igual a

$$J_+^{(\infty)}|k, m\rangle^{\infty} = -e^{i\phi} \left(\frac{1}{2\alpha} \partial_r + i\partial_{\phi} + \frac{1}{2} \right) e^{im\phi} u(r) \quad (5.9)$$

donde se ha hecho uso de la realización dada en (4.28).

En general, se debe cumplir que

$$J_{+E(2)}^{(\infty)}(\pm k)|\pm k, m\rangle^{\infty} = J_+^{(\infty)}|\pm k, m\rangle^{\infty} \quad (5.10)$$

Cabe destacar que en esta igualdad queda fijo el valor de m , lo cual no representa en ningún modo que la expresión (4.40) esté restringida a un caso particular.

De (5.10) se tiene que:

$$\begin{aligned} \gamma_{\pm}(k) &= 0 \\ f(k) &= \frac{k}{2\alpha} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Dado que $f(k)$ debe cumplir con (4.41), entonces:

$$\begin{aligned} k^2 &= h \left[-f(k)^2 \right] \\ &\Downarrow \\ h(\eta) &= -\frac{4}{c_1} \eta \\ &= -4\alpha^2 \eta \end{aligned} \quad (5.12)$$

Del capítulo sabemos que estamos estudiando casos en los que

$$\begin{aligned}
H &= h' \left[Q + \frac{1}{4} \right] \\
&\Downarrow \\
E_j &= h' \left[q + \frac{1}{4} \right]
\end{aligned} \tag{5.13}$$

donde la función $h'(\eta)$ viene dada por las relaciones estudiadas en el capítulo **3**:

$$\begin{aligned}
\delta_\nu = \sqrt{-c_1 E_j + h_1 + 1} &= \sqrt{4q + 1} \\
&\Downarrow \\
E_j &= -\frac{4q - h_1}{c_1} \\
&= -\frac{4}{c_1} \left(q + \frac{1}{4} \right) + \frac{h_1 + 1}{c_1} \\
&= -4\alpha^2 \left(q + \frac{1}{4} \right) + \alpha^2 (h_1 + 1)
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Así, se tiene que

$$\begin{aligned}
h'(\eta) &= -\frac{4}{c_1} \eta + \frac{h_1 + 1}{c_1} \\
&\Downarrow \\
h'(\eta) &= -4\alpha^2 \eta + \alpha^2 (h_1 + 1)
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Así, para poder usar el formalismo de la *Conexión Euclídea*, se debe cumplir que

$$h'(\eta) = h(\eta) \tag{5.16}$$

de donde resulta evidente que debe fijarse el valor de h_1 . Dado que h_1 tiene que ver sólo con el valor asintótico que toma el potencial¹

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V_{PNH}(r) = \frac{1 + h_1}{c_1} \tag{5.17}$$

el hecho que $h_1 = -1$ no representa una limitante en la aplicabilidad de la *Conexión Euclídea* a los PNH, ya que (5.17) puede ser fijado libremente. Si se escribe el PTP (2.8) como:

¹Esta expresión se consigue directamente al tomar el límite cuando $z \rightarrow 1$ de (2.2).

$$V_{PT}(r) = S_1 + S_2 \operatorname{sech}(\alpha r)^2 + S_3 \operatorname{csch}(\alpha r)^2 \quad (5.18)$$

donde cada uno de los S_i está directamente relacionado con uno de los parámetros h_0 , h_1 y f según:

$$\begin{aligned} f &= -\frac{3}{4} + \frac{S_2}{\alpha^2} \\ h_0 &= -\frac{3}{4} + \frac{S_3}{\alpha^2} \\ h_1 &= -1 + \frac{S_1}{\alpha^2} \end{aligned} \quad (5.19)$$

De la expresión (5.18), puede notarse que $V(r \rightarrow \infty) = S_1$. Así, pues, el tomar $h_1 = -1$ corresponde a $S_1 = 0$, quedando libres los parámetros S_2 y S_3 . El *Potencial de Pöschl-Teller* (2.8) quedará reescrito como:

$$V_{PT} = -A(A + \alpha) \operatorname{sech}(\alpha r)^2 + B(B - \alpha) \operatorname{csch}(\alpha r)^2 \quad (5.20)$$

Se mantiene la notación con los A y B por comodidad de cálculo.

5.2.3 Coeficiente de Reflexión para el *PTP*

Obtenidos $f(k)$ y $\gamma_{\pm}(k)$, puede emplearse directamente la expresión de R_m general (4.47), discutida en el capítulo anterior, de donde se tiene que el coeficiente $R_m^{PTP}(k)$ será

$$R_m^{PTP}(k) = \frac{\Gamma\left(m + \frac{1}{2} - \frac{ik}{\alpha}\right) \Gamma\left(m_0 + \frac{1}{2} + \frac{ik}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(m + \frac{1}{2} + \frac{ik}{\alpha}\right) \Gamma\left(m_0 + \frac{1}{2} - \frac{ik}{\alpha}\right)} R_{m_0}(k) \quad (5.21)$$

Como se discutió con detalle en el Capítulo 4, la expresión (5.21) tiene los polos ubicados correctamente (4.45):

$$f(k) = -i \left(m + \frac{1}{2} + n \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

ya que los polos que representaban estados no-físicos fueron eliminados (Capítulo 4). El m en (5.21) pertenece a las representaciones proyectivas continuas (A.23) y no debe ser confundido con el empleado en el caso de estados ligados (3.17)

$$m = \nu + \frac{1}{2} + \sqrt{q + \frac{1}{4}}$$

donde $\nu = 0, 1, 2, \dots, \nu_{max}$. La cantidad m_0 en (5.21) es la parte fraccionaria de j . De las expresiones (3.31), dadas en el capítulo 3, se tiene que:

$$\begin{aligned}
 q_\nu^{(PTP)} &= \frac{1}{4} \frac{(A - B - 2\alpha\nu)^2 - \alpha^2}{\alpha^2} \\
 &= j_\nu^{(PTP)} [j_\nu^{(PTP)} + 1] \\
 &\Downarrow \\
 j_\nu^{(PTP)} &= \pm\nu \mp \frac{1}{2} \pm \frac{B - A}{2\alpha}
 \end{aligned} \tag{5.22}$$

El coeficiente $R_{m_0}(k)$ es una constante a determinar, que para el *PTP* queda dada por:

$$R_{m_0}(k) = \left(\frac{\rho}{64}\right)^{\frac{ik}{\alpha}} \frac{\Gamma\left(p + \frac{ik}{2\alpha} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(p - \frac{ik}{2\alpha} + \frac{1}{2}\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{ik}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(-\frac{ik}{\alpha}\right)} \tag{5.23}$$

donde p , el parámetro grupal [13] está dado por (3.21):

$$\begin{aligned}
 p &= \frac{1}{2}(\alpha_\nu + \beta_\nu) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{-ak^2 + f + 1} + \sqrt{-c_0k^2 + h_0 + 1} \right) \\
 &= \frac{A + B}{2\alpha}
 \end{aligned} \tag{5.24}$$

Las expresiones (5.23) y (5.24) quedarán plenamente justificadas cuando se estudie el caso general de los *PNH*.

5.3 Caso General de los *PNH*

Ya establecida la aplicabilidad del tratamiento de la *Conexión Euclídea* al *PTP* en el formalismo del $so(2, 1)$ de Cordero y Salamó [13], se puede proceder de forma más clara al caso general.

5.3.1 El Algebra Asintótica

En el capítulo 3 hemos discutido la realización de $so(2, 1)$ empleada por Cordero y Salamó en su algebrización de los estados ligados de los *PNH* [13].

$$\begin{aligned}
J_0 &= -i \frac{\partial}{\partial \phi} \\
J_{\pm} &= e^{\pm i \phi} \left\{ \pm \frac{\sqrt{z}(z-1)}{z'} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{2} \frac{i(z+1)}{\sqrt{z}} \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} \\
&\quad \pm e^{\pm i \phi} \left\{ \frac{1}{2}(z-1) \left[\frac{1 \mp p}{\sqrt{z}} - \frac{z'' \sqrt{z}}{z'^2} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{5.25}$$

El álgebra asintótica $\{J_0^\infty, J_\pm^\infty\}$ que surge de tomar los límites $r \rightarrow \infty$, o equivalentemente $z \rightarrow 1$, en (5.25) es:

$$\begin{aligned}
J_0^\infty &= -i \frac{\partial}{\partial \phi} \\
J_\pm^\infty &= e^{\pm i \phi} \left[\mp \frac{\sqrt{c_1}}{2} \frac{\partial}{\partial r} - i \frac{\partial}{\partial \phi} \pm \frac{1}{2} \right] \\
Q^\infty &= \frac{1}{4} (c_1 \partial_r^2 - 1)
\end{aligned} \tag{5.26}$$

Estos tres generadores siguen cerrando un álgebra $so(2, 1)$. Puede notarse en (5.26) que el parámetro p (5.25) del grupo ha desaparecido. Esto será particularmente importante cuando se comparen nuestros resultados con los obtenidos por Natanzon [41].

5.3.2 Conexión Euclídea para los PNH

Al igual que para el caso del *PTP*, se emplea (5.26) en (5.7) y se iguala a (5.8), obteniéndose:

$$\begin{aligned}
\gamma_\pm(k) &= 0 \\
h(\eta) &= -\frac{4}{c_1} \eta \\
f(k) &= \frac{k \sqrt{c_1}}{2}
\end{aligned} \tag{5.27}$$

Se tiene que para el caso general de los *PNH*, se cumple:

$$\begin{aligned}
\delta_\nu = \sqrt{-c_1 E + h_1 + 1} &= \sqrt{4q + 1} \\
&\quad \Downarrow \\
E_j &= -\frac{4q - h_1}{c_1}
\end{aligned} \tag{5.28}$$

Así

$$\begin{aligned}
E_j &= h' \left[q + \frac{1}{4} \right] \\
&\Downarrow \\
h'(\eta) &= -\frac{4}{c_1} \eta + \frac{h_1 + 1}{c_1}
\end{aligned} \tag{5.29}$$

donde nuevamente queda determinado el valor de h_1 , que sólo depende del valor asintótico que toma el potencial

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V_{PNH}(r) = \frac{1 + h_1}{c_1}$$

Así, pues, el hecho que $h_1 = -1$ no representa una limitante en la aplicabilidad de la *Conexión Euclídea* a los PNH, ya que (5.17) puede ser fijado libremente.

5.3.3 Coeficiente de Reflexión para los PNH

Sustituyendo las expresiones (5.27) en $R_m(k)$ (4.47) se obtiene:

$$R_m(k) = \frac{\Gamma\left(m + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} ik\sqrt{c_1}\right) \Gamma\left(m_0 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} ik\sqrt{c_1}\right)}{\Gamma\left(m + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} ik\sqrt{c_1}\right) \Gamma\left(m_0 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} ik\sqrt{c_1}\right)} R_{m_0}(k) \tag{5.30}$$

Dado el carácter analítico de la matriz S [55], los polos [6] de esta expresión deben coincidir con el espectro de energía de los estados ligados de los PNH, obtenido empleando $so(2, 1)$ [13].

Al igual que para el *PTP*, puede verse que los polos de (5.30) están ubicados en (4.45)::

$$f(k) = -i \left(m + \frac{1}{2} + n \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

ya que los polos que representaban estados no-físicos fueron eliminados (Capítulo 4). El m en (5.30) pertenece a las representaciones proyectivas continuas (A.23) y no debe ser confundido con el empleado en el caso de estados ligados (3.17)

$$m = \nu + \frac{1}{2} + \sqrt{q + \frac{1}{4}}$$

donde $\nu = 0, 1, 2, \dots, \nu_{max}$. La cantidad m_0 en es la parte fraccionaria de j .

Para lograr un resultado completo, falta mostrar la equivalencia entre la expresión (5.30) y la obtenida por Natanzon (4.48). Como se mencionó en el capítulo anterior, las expresiones (4.50) recuerdan a las obtenidas en el capítulo 3 (3.24). Identificando

$$\begin{aligned}
\mu &= \alpha_\nu \\
\lambda_0 &= \beta_\nu \\
\lambda_1 &= \delta_\nu
\end{aligned} \tag{5.31}$$

y sustituyendo $\delta_\nu = i f(k)$, se tiene que

$$R_{m_0}(k) = \left(\frac{\rho}{16}\right)^{ik\sqrt{c_1}} \frac{\Gamma\left(p + \frac{1}{2}ik\sqrt{c_1} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(p - \frac{1}{2}ik\sqrt{c_1} + \frac{1}{2}\right)} \frac{\Gamma\left(ik\sqrt{c_1}\right)}{\Gamma\left(-ik\sqrt{c_1}\right)} \tag{5.32}$$

De las mismas ecuaciones (3.24), se tiene que el parámetro p depende directamente de la energía del sistema:

$$\begin{aligned}
p_\nu^{(PNH)} &= p_\nu(E) \\
&= \frac{1}{2}(\alpha_\nu + \beta_\nu) \\
&= \frac{1}{2}\left(\sqrt{-aE_\nu + f + 1} + \sqrt{-c_0E_\nu + h_0 + 1}\right)
\end{aligned} \tag{5.33}$$

La expresión (5.33) se corresponde al caso de estados ligados, pero al igual que en (4.41), se puede extender al caso de scattering al tomar $E = k^2$, quedando así

$$\begin{aligned}
p_\nu^{(PNH)} &\rightarrow p_k^{(PNH)} \\
p_k^{(PNH)} &\equiv \frac{1}{2}\left(\sqrt{-ak^2 + f + 1} + \sqrt{-c_0k^2 + h_0 + 1}\right)
\end{aligned} \tag{5.34}$$

Como se discute al inicio del anexo **A**, en un experimento de scattering la energía del haz incidente (k^2) es determinada *a priori*, por lo que $R_{m_0}(k)$ sólo dependerá de parámetros conocidos al sustituir p por $p_k^{(PNH)}$ en (5.32).

5.4 Ejemplos

Como casos adicionales al *PTP*, discutido en la sección **7.2**, se presentarán otros ejemplos de scattering de los *PNH*. Se utilizarán directamente los resultados obtenidos en la sección anterior para el caso general, como se hizo en el capítulo **3** para los estados ligados.

5.4.1 Potencial de Rosen-Morse

Como se vió en el capítulo 2, los parámetros de Natanzon para el *Potencial de Rosen-Morse* son (2.12):

$$\begin{aligned}
V_{RM} &= A^2 + \frac{B^2}{A^2} - A(A + \alpha) \operatorname{sech}(\alpha r)^2 + 2B \tanh(\alpha r) \\
z(r) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh(\alpha r) \\
f &= 4A \frac{A + \alpha}{\alpha^2} \\
h_0 &= \frac{(B - A^2 + A\alpha)(B - A^2 - A\alpha)}{(A\alpha^2)} \\
h_1 &= \frac{(B + A^2 + A\alpha)(B + A^2 - A\alpha)}{(A\alpha)^2} \\
a &= 0 \\
c_0 &= \frac{1}{\alpha^2} \\
c_1 &= \frac{1}{\alpha^2}
\end{aligned}$$

Los parámetros de la expansión serán (5.27):

$$\begin{aligned}
\gamma_{\pm}^{(RMP)}(k) &= 0 \\
f^{(RMP)}(k) &= \frac{k}{2\alpha}
\end{aligned} \tag{5.35}$$

Obtenidos $f(k)$ y $\gamma_{\pm}(k)$, puede emplearse directamente la expresión de R_m general (4.47), discutida en el capítulo anterior, de donde se tiene que el coeficiente $R_m^{RMP}(k)$ será

$$R_m^{RMP}(k) = \frac{\Gamma\left(m + \frac{1}{2} - \frac{ik}{4\alpha}\right) \Gamma\left(m_0 + \frac{1}{2} + \frac{ik}{4\alpha}\right)}{\Gamma\left(m + \frac{1}{2} + \frac{ik}{4\alpha}\right) \Gamma\left(m_0 + \frac{1}{2} - \frac{ik}{4\alpha}\right)} R_{m_0}(k) \tag{5.36}$$

donde $R_{m_0}(k)$ viene dado por (5.32), con p dado por:

$$p_k^{(RMP)} = \frac{1}{2} \left[\frac{\alpha + 2A}{\alpha} + \sqrt{-c_0 k^2 + \frac{(-B + A^2)^2}{\alpha^2 A^2}} \right] \tag{5.37}$$

Como se discutió con detalle en el Capítulo 4, la expresión (5.36) tiene los polos ubicados correctamente (4.45):

$$f(k) = -i \left(m + \frac{1}{2} + n \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

ya que los polos que representaban estados no-físicos fueron eliminados (Capítulo 4). La cantidad m_0 en es la parte fraccionaria de j . De las expresiones (3.36), dadas en el capítulo 3, se tiene que:

$$\begin{aligned} q_\nu^{(RMP)} &= \left(B + \alpha A + A^2 - \alpha^2 \nu - 2 \nu \alpha A + \nu^2 \alpha^2 \right) \\ &\quad \times \frac{(B - \alpha A + A^2 + \alpha^2 \nu - 2 \nu \alpha A + \nu^2 \alpha^2)}{4(-A + \nu \alpha)^2 \alpha^2} \\ &= j_\nu^{(RMP)} [j_\nu^{(RMP)} + 1] \\ &\quad \Downarrow \\ j_\nu^{(RMP)} &= \pm \frac{\nu^2 \alpha^2 + (-\alpha^2 - 2 \alpha A) \nu + B + A^2 + \alpha A}{2 \alpha (-A + \nu \alpha)} \end{aligned} \quad (5.38)$$

5.4.2 Caso Especial del Potencial de Eckart: Potencial de Hulthén

Los parámetros de Natanzon para el *Potencial de Hulthén* son (2.12):

$$\begin{aligned} V_{Hulthen} &= -V_0 \left(\frac{e^{2\alpha r}}{1 - e^{2\alpha r}} + 1 \right) \\ z(r) &= 1 - e^{-2\alpha r} \\ a &= \frac{1}{\alpha^2} \\ c_0 &= 0 \\ c_1 &= \frac{1}{\alpha^2} \\ f &= -1 \\ h_0 &= 0 \\ h_1 &= -1 + \frac{V_0}{\alpha^2} \end{aligned}$$

Los parámetros de la expansión serán (5.27):

$$\begin{aligned} \gamma_\pm^{(Hulthen)}(k) &= 0 \\ f^{(Hulthen)}(k) &= \frac{k}{2\alpha} \end{aligned} \quad (5.39)$$

Obtenidos $f(k)$ y $\gamma_\pm(k)$, puede emplearse directamente la expresión de R_m general

(4.47), discutida en el capítulo anterior, de donde se tiene que el coeficiente $R_m^{Hulthen}(k)$ será

$$R_m^{Hulthen}(k) = \frac{\Gamma\left(m + \frac{1}{2} - \frac{ik}{2\alpha}\right) \Gamma\left(m_0 + \frac{1}{2} + \frac{ik}{2\alpha}\right)}{\Gamma\left(m + \frac{1}{2} + \frac{ik}{2\alpha}\right) \Gamma\left(m_0 + \frac{1}{2} - \frac{ik}{2\alpha}\right)} R_{m_0}(k) \quad (5.40)$$

donde $R_{m_0}(k)$ viene dado por (5.32), con p dado por:

$$p_k^{(Hulthen)} = \frac{ik}{2\alpha} + \frac{1}{2} \quad (5.41)$$

Como se discutió con detalle en el Capítulo 4, la expresión (5.40) tiene los polos ubicados correctamente (4.45):

$$f(k) = -i \left(m + \frac{1}{2} + n \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

ya que los polos que representaban estados no-físicos fueron eliminados (Capítulo 4). La cantidad m_0 en es la parte fraccionaria de j . De las expresiones (3.41), dadas en el capítulo 3, se tiene que:

$$\begin{aligned} q_\nu^{(Hulthén)} &= \frac{16 \nu^3 \alpha^4 (\nu + 4) + 8 \alpha^2 (10 \alpha^2 + V_0) \nu^2}{64 \alpha^4 (\nu + 1)^2} \\ &= j_\nu^{(Hulthén)} [j_\nu^{(Hulthén)} + 1] \\ &\Downarrow \\ j_\nu^{(Hulthén)} &= \pm \frac{1}{8} \frac{V_0 + 4 \alpha^2 (\nu + 1) \xi_\pm}{\alpha^2 (\nu + 1)} \\ \xi_+ &= \nu \\ \xi_- &= (\nu + 2) \end{aligned} \quad (5.42)$$

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se ha logrado una extensión del tratamiento algebraico desarrollado por Cordero y Salamó [13] para los estados ligados de los PNH al estudio de los estados de scattering con el cálculo de la matriz S para dichos potenciales. Conviene resaltar que tanto para el sector ligado como para el de scattering se emplea un álgebra $so(2, 1)$. Por lo tanto, se tiene que el álgebra lleva consigo toda la información del sistema, tanto para estados ligados como para scattering. En un caso se emplea la representación discreta $\mathcal{D}^{(+)}$ y en la otra la continua \mathcal{C} , respectivamente.

La extensión fue realizada siguiendo el formalismo de la *Conexión Euclídea* para $so(2, 1)$. Tomando la representación en coordenadas dada en [13], se estudió su comportamiento asintótico, obteniéndose la misma álgebra. Se realizó una expansión de dichos generadores en función del grupo euclídeo $E(2)$. Empleando los resultados de [3], se calcula una expresión de $R_m(k)$ para el caso general de un PNH .

El resultado obtenido de esta forma se ha comparado con los obtenidos por Natanzon [41] y Alhassid, et al. [5]. Una completa concordancia entre ambas expresiones se logra fijando el factor $R_{m_0}(k)$, en principio arbitrario. Los polos del $R_m(k)$ obtenido reproducen el espectro de energía de los estados ligados [13], como es de esperarse [55].

Como ejemplos de PNH se estudiaron los Potenciales de *Pöschl-Teller*, *Rosen-Morse* y un caso especial del *Eckart*, el potencial de *Hulthén*.

Cabe destacar que los resultados obtenidos en esta tesis se han podido calcular sin el uso del formalismo de la *Conexión Euclídea*. Siguiendo el procedimiento empleado por Frank [20], es posible el cálculo de la matriz S con el uso de los operadores asintóticos (5.26) y la expresión general para los estados asintóticos (4.5). Sin embargo, la *Conexión Euclídea* presenta cierta elegancia matemática que la hace más atractiva para presentar los resultados de nuestro trabajo.

Es importante destacar las ventajas que se obtienen de este trabajo respecto al tratamiento algebraico presentado por Alhassid, et al. en [5] para el caso general de los PNH . Como se puede apreciar de lo discutido en el capítulo 3, el espectro de energía de los estados ligados se obtiene de forma sencilla, partiendo de la realización obtenida en [13], deducida en la sección 3.2. Análogamente, el cálculo de la matriz S resulta directo, bien sea empleando la *Conexión Euclídea* o la metodología de Frank y Wolf [20], lo cual está en proceso de publicación [1].

Ante los resultados obtenidos, se presentan como futuros proyectos la extensión del tratamiento algebraico de los *PNC* realizado por Cordero y Salamó en [14]. Dado que en dicho tratamiento se emplea igualmente un álgebra $so(2, 1)$ para los estados ligados, puede estudiarse la aplicabilidad de la *Conexión Euclídea* para $so(2, 1)$ para los *PNC*. Notamos que los dos casos para los cuales la función $h(r)$ es invertible corresponden a los potenciales de Coulomb y de Morse. Excluimos el caso del oscilador armónico por razones evidentes. Como se ha mencionado en este trabajo, estos casos se han estudiado utilizando diversas álgebras, en particular $so(3, 1)$ y $so(2, 1)$.

Igualmente resulta de interés mostrar la equivalencia entre el tratamiento de Alhassid, et al. [58] donde se emplea un álgebra $so(2, 2)$ en su representación simétrica con la realización de $so(2, 1)$ usada por Cordero y Salamó en [13].

Finalmente, creemos que la algebrización de sistemas obtenidos mediante *Transformaciones de Darboux* de segundo orden [47] [51] pueden ser realizadas utilizando las técnicas empleadas para los potenciales de Natanzon.

Apéndice A

Teoría de Grupos

A.1 Grupos de Lie de Tres Parámetros

Los grupos de Lie de tres parámetros y sus respectivas álgebras tienen una importancia fundamental en la física teórica contemporánea [24]. Las formas reales de estas álgebras se pueden dividir en las tres álgebras de Lie compactas isomorfas

$$so(3) \sim su(2) \sim sp(2)$$

y las cuatro álgebras de Lie no-compactas isomorfas

$$so(2, 1) \sim su(1, 1) \sim sl(2, \mathfrak{R}) \sim sp(2, \mathfrak{R})$$

El grupo compacto $SO(3)$ es el grupo de transformaciones en un espacio euclídeo 3D que deja invariante la forma

$$\begin{aligned} x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 &= g^{\mu\nu} x_\mu x_\nu \\ g_{\mu\nu} &= \delta_{\mu\nu} \end{aligned} \tag{A.1}$$

mientras que el grupo no-compacto $SO(2, 1)$ es el grupo de transformaciones que deja invariante la forma indefinida

$$\begin{aligned} x_1^2 + x_2^2 - x_3^2 &= g^{\mu\nu} x_\mu x_\nu \\ g_{11} = g_{22} &= -g_{33} = 1 \end{aligned} \tag{A.2}$$

A.1.1 Conmutadores

Si los generadores de las álgebras de Lie se escriben como J_{12} , J_{23} y J_{13} , con $J_{\mu\nu} = -J_{\nu\mu}$, entonces las relaciones de conmutación para ambas álgebras de Lie pueden escribirse de la forma:

$$[J_{\mu\nu}, J_{\mu\lambda}] = i g_{\mu\nu} J_{\lambda\nu} \quad (\text{A.3})$$

Definiendo los operadores de subida y bajada como:

$$J_{\pm} = \frac{\sqrt{g_{33}}}{\sqrt{2}} (J_{13} \pm i J_{23}) \quad (\text{A.4})$$

por lo que

$$[J_{\mu\nu}, J_{\mu\lambda}] = i g_{\mu\nu} J_{\lambda\nu} \quad (\text{A.5})$$

donde

$$\begin{aligned} g_{33} &= +1 \quad \text{para } so(3) \sim su(2) \sim sp(2) \\ g_{33} &= -1 \quad \text{para } so(2,1) \sim su(1,1) \sim sl(2, \mathfrak{R}) \sim sp(2, \mathfrak{R}) \\ g_{33} &= 0 \quad \text{para } E(2) \end{aligned}$$

Si se hace la siguiente identificación para los generadores de $SO(3)$

$$\begin{aligned} J_{12}^{SO(3)} &= \mathcal{J}_1 \\ J_{23}^{SO(3)} &= \mathcal{J}_2 \\ J_{13}^{SO(3)} &= \mathcal{J}_3 \end{aligned}$$

se tiene para las álgebras $so(3) \sim su(2) \sim sp(2)$ las relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2] &= i \mathcal{J}_3 \\ [\mathcal{J}_2, \mathcal{J}_3] &= i \mathcal{J}_1 \\ [\mathcal{J}_3, \mathcal{J}_1] &= i \mathcal{J}_2 \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Identificando los generadores de $SO(2,1)$ de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
 J_{12}^{SO(2,1)} &= J_1 \\
 J_{23}^{SO(2,1)} &= J_2 \\
 J_{13}^{SO(2,1)} &= J_3
 \end{aligned}$$

se tiene para las álgebras $so(2,1) \sim su(1,1) \sim sl(2, \mathfrak{R}) \sim sp(2, \mathfrak{R})$ las relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned}
 [J_1, J_2] &= -i J_3 \\
 [J_2, J_3] &= i J_1 \\
 [J_3, J_1] &= i J_2
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

Las representaciones de interés para aplicaciones a la física son todas unitarias [24]. Para éstas, se debe tener que [59]:

$$\begin{aligned}
 J_{\mu\nu}^\dagger &= J_{\mu\nu} \\
 J_+^\dagger &= J_-
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

A.1.2 Invariantes de Casimir

Los grupos de tres parámetros son de rango uno [24] y poseen sólo un invariante de Casimir independiente, dado por:

$$\begin{aligned}
 Q &= \mathbf{J}^2 \\
 &= g_{33} J_{12}^2 + J_{13}^2 + J_{23}^2 \\
 &= g_{33} J_{12} (J_{12} + 1) + 2 J_- J_+
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

por lo que

$$\begin{aligned}
 Q &= 2 \mathcal{J}_- \mathcal{J}_+ - \mathcal{J}_3 (\mathcal{J}_3 + 1) \quad [so(3) \sim su(2) \sim sp(2)] \\
 Q &= 2 J_- J_+ - J_3 (J_3 + 1) \quad [so(2,1) \sim su(1,1) \sim sl(2, \mathfrak{R}) \sim sp(2, \mathfrak{R})] \\
 \mathbf{P}^2 &= 2 P_- P_+ \quad [E(2)]
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

A.2 Representaciones Unitarias de $SO(2, 1)$

Las representaciones unitarias de $SO(2, 1)$ pueden clasificarse en término del espectro de autovalores de su operador de Casimir Q y el generador J_0 del subgrupo compacto $SO(2)$. Los generadores de $SO(2, 1)$ cumplen las relaciones de conmutación (A.7).

El *Invariante de Casimir* para $SO(2, 1)$ está dado por:

$$\begin{aligned} Q &= J_1^2 + J_2^2 - J_0^2 \\ &= 2 J_+ J_- - J_3 (J_3 + \mathbf{1}) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

donde se ha hecho uso de la definición de J_{\pm} (A.4) y su conmutador (A.5). Cabe notar que, a diferencia del caso compacto, el Casimir Q no es más que la suma de operadores Hermíticos definidos positivos, por lo que sus autovalores pueden variar en el dominio de los números reales y negativos.

Una base de autoestados de $\{Q, J_3\}$ se denotará por $\{|q, m\rangle\}$, donde:

$$\begin{aligned} Q|q, m\rangle &= q|q, m\rangle \quad q \in \mathfrak{R} \\ J_3|q, m\rangle &= m|q, m\rangle; \quad m \in \mathfrak{R} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

De la ecuación (A.11), la acción de los operadores escalera puede escribirse en término del Casimir Q y del generador compacto J_3 según:

$$2 J_+ J_- = J_3 (J_3 + \mathbf{1}) - Q \quad (\text{A.13})$$

de donde es inmediato ver que se cumple:

$$\begin{aligned} 2 J_- J_+ |q, m\rangle &= [q - m(m + 1)] |q, m\rangle \\ 2 J_+ J_- |q, m\rangle &= [q - m(m - 1)] |q, m\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Dado que para representaciones unitarias de $SO(2, 1)$ es necesario que se cumpla

$$J_+^\dagger = J_-$$

se tiene que los autovalores de $J_+ J_-$ deben ser reales y definidos negativos, por lo que de la ecuación (A.11)

$$\begin{aligned} Q|q, m\rangle &= [-2J_+J_- - J_3(J_3 + \mathbf{1})]|q, m\rangle \\ q|q, m\rangle &= -2\mathcal{A}|q, m\rangle - m(m+1)|q, m\rangle \end{aligned}$$

donde \mathcal{A} será el autovalor de J_+J_- , de donde resulta que es necesario que [59]

$$q + m(m \pm 1) \geq 0 \tag{A.15}$$

La acción de los operadores escalera puede deducirse directamente de la expresión (A.14), para dar:

$$J_{\pm}|q, m\rangle = \sqrt{q - m(m \pm 1)}|q, m \pm 1\rangle \tag{A.16}$$

Así, pues, se obtiene una completa clasificación de las representaciones unitarias de $SO(2, 1)$ en término de los autovalores de Q y J_3 al determinar los valores de q y m que satisfacen (A.15), recordando que valores sucesivos de m deben diferir en una unidad. Estas representaciones pueden dividirse en dos clases [59]: las *series continuas* C , asociadas con los autovalores continuos de Q , y las *series discretas* D , asociadas con autovalores discretos de Q . El contenido del subgrupo $SO(2)$ en estas representaciones se obtiene directamente [59] de considerar la ecuación (A.15), para dar:

1. Series Continuas:

- $0 < q < \infty$: Se tiene $q + m(m \pm 1) \geq 0$ para todo

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \tag{A.17}$$

y las representaciones C_q^0 no tienen cota superior ni inferior.

- $\frac{1}{4} < q < \infty$: Se tiene $q + m(m \pm 1) \geq 0$ para todo

$$m = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \tag{A.18}$$

y las representaciones $C_q^{\frac{1}{2}}$ no tienen cota superior ni inferior.

- ### 2. Series Discretas:
- En este caso, los autovalores q pueden escribirse todos de la forma $j(1 - j)$ [59], donde j es un entero positivo o semi-entero positivo. De la ecuación (A.15) se tiene que m puede tener cota superior y no una inferior o cota inferior y no una superior.

- D_j^+ : Se tiene $q = j(1 - j)$ con

$$\begin{aligned} j &= \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ m &= j, j + 1, j + 2, \dots \end{aligned} \tag{A.19}$$

- D_j^- : Se tiene $q = j(1 - j)$ con

$$\begin{aligned} j &= \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ m &= -j, -(j + 1), -(j + 2), \dots \end{aligned} \tag{A.20}$$

A diferencia de las representaciones unitarias irreducibles de $SO(3)$, que son etiquetadas biyectivamente por los autovalores del operador de Casimir, en el caso de $SO(2, 1)$ diferentes representaciones unitarias irreducibles pueden poseer el mismo autovalor del operador de Casimir [59]. Estas representaciones se distinguen por sus diferentes espectros de autovalores de J_3 . De la dimensionalidad de las representaciones de $SO(2, 1)$ se puede decir que todas las representaciones unitarias de $SO(2, 1)$ son de dimensión infinita, mientras que las representaciones finitas son todas no-unitarias [59].

Finalmente, se puede notar que en la derivación de las representaciones de $SO(2, 1)$ se ha escogido la diagonalización del generador compacto J_3 . De haberse escogido otro, la base conseguida sería continua [59].

A.2.1 Representaciones Projectivas

Las *Representaciones Projectivas*¹ [3] de $su(1, 1) \sim so(2, 1)$ son generalizaciones de las representaciones estudiadas anteriormente y se pueden dividir de forma similar en dos clases. Este tipo de representaciones resultan de especial interés para el formalismo algebraico de la Conexión Euclídea [3].

1. **Representaciones Projectivas Discretas:** j es cualquier numero real negativo ($j < 0$) y

$$m = -j, -j + 1, -j + 2, \dots \tag{A.21}$$

2. **Representaciones Projectivas Continuas:** Están caracterizadas por dos numeros:

$$\begin{aligned} j &= -\frac{1}{2} + i\delta \quad \delta = real > 0 \\ m_0 &= real \quad 0 \leq m_0 < 1 \end{aligned} \tag{A.22}$$

¹El nombre REPRESENTACIONES PROYECTIVAS se toma de [3] y no se conoce otra fuente donde se haga uso de este nombre.

En una representación de este tipo, el espectro de J_z estará dado por:

$$m = m_0, m_0 \pm 1, m_0 \pm 2, \dots \quad (\text{A.23})$$

Las representaciones proyectivas no tienen una base de funciones periódicas [3], como ocurre en las anteriores. En cambio, estas satisfacen:

$$\Psi(\rho, \phi + 2\pi) = e^{2\pi i m_0} \Psi(\rho, \phi) \quad (\text{A.24})$$

donde para (1), m_0 es la parte fraccionaria de j .

A.3 Grupo Euclídeo $E(2)$

El grupo de todas las isometrías de un espacio euclídeo de dimensión 2 (\mathbf{E}^2) se conoce como el **Grupo Euclídeo**. Puede descomponerse en el grupo de Traslaciones en el plano \mathbf{T}^2 y el grupo de rotaciones en 2 dimensiones $SO(2)$:

$$\mathbf{E}(2) = \mathbf{T}^2 \otimes SO(2) \quad (\text{A.25})$$

Su álgebra viene dada por las relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [L_z, P_x] &= iP_y \\ [L_z, P_y] &= -iP_x \\ [P_x, P_y] &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Los operadores escalera para $E(2)$ se definen por:

$$P_{\pm} \equiv P_x \pm iP_y \quad (\text{A.27})$$

por lo que podemos reescribir (A.26) como:

$$\begin{aligned} [L_z, P_{\pm}] &= \pm P_{\pm} \\ [P_+, P_-] &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

El Casimir \mathbf{P}^2 está dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^2 &= P_x^2 + P_y^2 \\ &= P_+ P_- \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

pudiendo comprobarse del hecho que conmuta con todos los generadores $\{P_{\pm}, L_z\}$:

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}^2, L_z] &= 0 \\ [\mathbf{P}^2, P_{\pm}] &= 0 \end{aligned} \tag{A.30}$$

Dado que hemos definido a $E(2)$ según (A.25) podemos pensar en una realización en coordenadas cartesianas. Así, obtenemos:

$$\begin{aligned} P_x &= -i\partial_x \\ P_y &= -i\partial_y \\ L_z &= -i(x\partial_y - y\partial_x) \end{aligned} \tag{A.31}$$

Las representaciones de $E(2)$ se etiquetan generalmente con los autovalores del Casimir \mathbf{P}^2 y del generador L_z

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^2|k, m\rangle &= k^2|k, m\rangle \\ L_z|k, m\rangle &= m|k, m\rangle \end{aligned} \tag{A.32}$$

Los estados $\{|k, m\rangle\}$ están relacionados con las funciones de Bessel [6], citeGilmore.

Apéndice B

Scattering: Conceptos Básicos

Mucho de lo que se conoce acerca de las fuerzas de interacción en átomos y núcleos lo hemos aprendido de experimentos de scattering, en los que se bombardean los átomos de un blanco con haces de partículas. Generalmente, la naturaleza, energía e incluso la polarización de las partículas usadas como proyectiles son conocidas. Estas partículas son dispersadas por los átomos del blanco y son subsecuentemente detectadas por instrumentos que pueden darnos la intensidad en función del ángulo de dispersión y, de tratarse de una colisión inelástica, la energía de las partículas dispersadas.

Así, los nucleones dispersados de núcleos a distintas energías brindan información sobre las fuerzas nucleares al igual que sobre la estructura misma del núcleo. Se emplean electrones y proyectiles más pesados de baja energía para colisionar con átomos y así obtener data que sirva para el cálculo de procesos cinéticos en gases donde predominan las colisiones de baja energía. Igualmente, mesones y otras partículas elementales son empleadas en experimentos de colisión con protones para estudiar las interacciones fundamentales de las cuales no poseemos otra información directa.

En el presente anexo se hará una revisión de la teoría formal de scattering como se estudia en un curso de pregrado de mecánica cuántica. Principalmente se ha seguido el tratamiento de Sakurai [50], dado su estudio de la ecuación de Lippmann-Schwinger. Igualmente resultan relevantes las referencias [11], [23], [38] y [55]. El lector ya familiarizado con esta formulación del scattering en mecánica cuántica podrá saltarse las primeras partes para dirigirse a la sección donde se discuten los estados de scattering, que luego son empleados en nuestro formalismo algebraico.

B.1 Introducción

Desde un punto de vista teórico, el aspecto más significativo de los procesos de scattering es que, a diferencia de los estados ligados, estamos estudiando la parte continua del espectro de energía. Estamos en plena libertad de escoger arbitrariamente el valor de la energía de la partícula incidente. A diferencia de los estados ligados, no basta con simplemente resolver la ecuación diferencial para varios potenciales, ya que en las colisiones la energía viene dada por el haz incidente y las cantidades de interés a ser medidas serán las intensidades. A diferencia de lo que se hace con estados ligados, la data obteni-

da en experimentos de colisiones sólo podrá ser comparada con predicciones teóricas si se logran comprender cuidadosamente las distintas etapas de un proceso de scattering. Relacionar las intensidades observadas con las funciones de onda calculadas es, pues, el primer problema de la teoría de scattering.

El aparato matemático para estudiar los procesos de colisiones puede montarse para describir el proceso dependiente del tiempo o de forma atemporal. Siguiendo los intereses y objetivos de nuestro estudio, la revisión del scattering independiente del tiempo resulta suficiente.

B.2 Scattering Independiente del Tiempo

Ya se han discutido brevemente algunos aspectos básicos y generales de los experimentos de colisiones (scattering). A continuación presentaremos una introducción a la formulación matemática del scattering en mecánica cuántica que resulta relevante para las discusiones que se realizaron en el presente trabajo, aún cuando la conexión entre ambas presentaciones pueda parecer confusa.

Cabe destacar que se ha obviado una discusión profunda de la matriz S dada la complejidad del tema. Se han mencionado sólo los aspectos más relevantes relacionados con el tratamiento algebraico a realizar.

Se ha seguido principalmente la referencia [50], completando con [11], [23], [38] y [55].

B.2.1 Ecuación de Lippmann-Schwinger

Asumamos que el Hamiltoniano del sistema puede escribirse como:

$$H = H_0 + V \tag{B.1}$$

donde H_0 es el operador de energía cinética:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{B.2}$$

En ausencia de un centro dispersor, V sería cero y los autoestados de energía serían simplemente un estado de partícula libre $|\mathbf{p}\rangle$. La presencia de V provoca que los autoestados de energía sean diferentes a los de la partícula libre. Sin embargo, si el proceso de scattering es elástico (no hay cambio en la energía), estamos interesados en obtener una solución a la ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano completo (B.1) con el mismo autovalor de energía. Específicamente, sea $|\phi\rangle$ el autovector de H_0 . Así, la ecuación a resolver será:

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{B.3}$$

Tanto H_0 como $H_0 + V$ exhiben un espectro de energía continuo. Se busca una solución

a (B.3) tal que cuando $V \rightarrow 0$, se tenga $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$, donde $|\phi\rangle$ es la solución a la ecuación de Schrödinger para una partícula libre con el mismo autovalor de energía.

Puede argumentarse que la solución deseada es:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle + |\phi\rangle \quad (\text{B.4})$$

apartando las dificultades que surgen debido a la naturaleza singular del operador $1/(E - H_0)$. Esto puede verse del hecho del que al aplicar $(E - H)$ a (B.4) se obtiene la ecuación (B.3). La presencia de $|\phi\rangle$ es razonable, ya que $|\psi\rangle$ debe reducirse a $|\phi\rangle$ al anularse V . Sin embargo, sin tener forma de manejar un operador singular, una ecuación de este tipo carece de sentido.

Análogamente al cambio que se realiza en el estudio de polos de funciones de Green [6] asociados a operadores lineales, se introduce en (B.4) una cantidad infinitesimal, puramente compleja, $i\varepsilon$:

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V |\psi\rangle + |\psi^{(\pm)}\rangle \quad (\text{B.5})$$

donde $\varepsilon > 0$. El factor introducido $\pm i\varepsilon$ asegura la estructura causal de la función de Green asociada.

La relación (B.5) se conoce como la **Ecuación de Lippmann-Schwinger**. El significado del \pm se discutirá al ver el comportamiento de $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$ a grandes distancias.

La ecuación de Lippmann-Schwinger es una ecuación de *kets* independiente de la representación particular que se escoja. Si queremos estudiar esta ecuación en la base de posición, se multiplica ésta por la izquierda por $\langle \mathbf{x} |$, obteniéndose:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle + \int d^3x' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (\text{B.6})$$

Ésta es una ecuación integral del scattering dado que el ket desconocido $|\psi^{(\pm)}\rangle$ aparece dentro de la integral. Si $|\phi\rangle$ representa una onda plana con momentum \mathbf{p} , puede escribirse:

$$\langle \mathbf{x} | \phi \rangle = \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (\text{B.7})$$

Cabe destacar el hecho de que, en contraste con los estados ligados, los estados asociados a ondas planas (B.7) no son normalizables y no son realmente un vector en un espacio de Hilbert. La *normalización* en (B.7) es tal que:

$$\int d^3x \langle \mathbf{p}' | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (\text{B.8})$$

Si en cambio se escribe la ecuación de Lippmann-Schwinger en la representación de momentum, se obtiene:

$$\langle \mathbf{p} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{p} | \phi \rangle + \frac{1}{E - \left(\frac{p^2}{2m}\right) \pm i\varepsilon} \langle \mathbf{p} | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (\text{B.9})$$

Ahora concentrémonos nuevamente en la base de posición y trabajemos con la ecuación (B.6). Para hacer algún progreso debemos evaluar primero el kernel de la ecuación integral, definido por:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \quad (\text{B.10})$$

Puede demostrarse [50] que $G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ está dado por:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \quad (\text{B.11})$$

donde $E \equiv \hbar^2 k^2 / 2m$. Puede reconocerse que $G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ no es más que la función de Green para la ecuación de Helmholtz:

$$\left(\nabla^2 + k^2\right) G_{\pm}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (\text{B.12})$$

Usando la forma explícita de $G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ podemos reescribir la ecuación (B.6), quedando:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (\text{B.13})$$

La función de onda $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$ en presencia del centro dispersor se escribe como la suma de la función de onda de la onda incidente $\langle \mathbf{x} | \phi \rangle$ y un término que representa la influencia de la colisión. Como se verá más adelante, a grandes distancias, la dependencia espacial del segundo término será $e^{\pm ikr}/r$ dado que el potencial tiene rango finito. Esto significa que la solución positiva (negativa) corresponde a una onda plana más una onda esférica saliente (entrante).

Para ver el comportamiento de $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$ más explícitamente, consideremos el caso específico en el que V es un potencial local¹. Si este es el caso, se obtiene [50]:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle &= \int d^3x'' \langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \psi^{(\pm)} \rangle \\ &= V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Usando esta expresión, la ecuación (B.13) se simplifica a:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (\text{B.15})$$

¹Se dice que un potencial V es **local** si puede escribirse como $\langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}'' \rangle = V(\mathbf{x}') \delta^{(3)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')$

Tratemos de entender un poco la física detrás de esta ecuación. El vector \mathbf{x} se entiende como que está dirigido hacia el punto de observación en el cual la función de onda es evaluada. Para un potencial de rango finito, la región que da lugar a una contribución no nula es limitado en el espacio. En los procesos de colisión se está interesado en estudiar los efectos del centro dispersor en un punto muy alejado de la zona de influencia del potencial. Si denotamos por r la distancia entre la región de interacción y el detector, se entiende que nos interesa el caso cuando $r \rightarrow \infty$. Esto está directamente relacionado con el hecho de que no podemos colocar un detector muy cercano al centro dispersor.

A grandes distancias $r \rightarrow \infty$, el comportamiento de $\langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle$ será:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle &\stackrel{r \text{ grande}}{\longrightarrow} \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

donde se ha usado [50]:

$$\frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \stackrel{r \text{ grande}}{\simeq} \frac{e^{\pm ikr}}{r} e^{\mp i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} \quad (\text{B.17})$$

y

$$\mathbf{k} \equiv \frac{\mathbf{p}_i}{\hbar} \quad (\text{B.18})$$

Esta fórmula hace ver claramente que se tiene la onda plana original propagándose en la dirección \mathbf{k} más una onda esférica saliente con amplitud $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ dada por:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &\equiv -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3x' \frac{e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle \\ &= -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

De forma similar puede calcularse a partir de (B.15) y (B.17) una expresión para $\langle \mathbf{x} | \psi^{(-)} \rangle$ [50]:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(-)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{e^{-ikr}}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right] \quad (\text{B.20})$$

B.2.2 Estados de Scattering y Matriz S

La función de onda que hemos asociado con los estados de scattering durante el presente trabajo (4.29) difiere de la estudiada normalmente en los cursos de Mecánica Cuántica (B.16) y requiere ser aclarada. Para ello, pensemos en ondas esféricas, en lugar de ondas planas, dado que los PNH son radiales. Sin interacciones, las funciones de onda asociadas a la ecuación de Schrödinger serán de la forma

$$\langle \mathbf{x} | E, l, m \rangle \propto \frac{1}{r} \hat{j}_l(pr) Y_l^m(\hat{\mathbf{x}}) \quad (\text{B.21})$$

donde $Y_l^m(\hat{\mathbf{x}})$ son los armónicos esféricos y $\hat{j}_l(z)$ son las funciones de *Riccati-Bessel*

$$\hat{j}_l(z) \equiv z j_l(z)$$

con $j_l(z)$ las funciones de Bessel esféricas. Las funciones $\hat{j}_l(z)$ pueden reescribirse si introducimos las funciones de *Riccati-Neumann* $\hat{n}_l(z)$ y *Riccati-Hankel* $\hat{h}_l^\pm(z)$ [55].

$$\begin{aligned} \hat{n}_l(z) &\equiv (-1)^l \left(\frac{\pi z}{2} \right) J_{-l-1/2}(z) \\ \hat{h}_l^\pm(z) &= \hat{n}_l(z) \pm i \hat{j}_l(z) \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

donde $J_\lambda(z)$ son las funciones ordinarias de Bessel. Así, se tiene que se puede escribir:

$$\hat{j}_l(z) = \frac{\hat{h}^+(z) - \hat{h}^-(z)}{2i} \quad (\text{B.23})$$

Definamos un estado de scattering de onda parcial $|E, l, m+\rangle$. Por extensión de (B.21), podemos escribir:

$$\langle \mathbf{x} | E, l, m+\rangle \propto \frac{1}{r} \psi_{l,p}(r) Y_l^m(\hat{\mathbf{x}}) \quad (\text{B.24})$$

donde $\psi_{l,p}(r)$ se debe reducir exactamente a $\hat{j}_l(z)$ en ausencia de interacciones. Definamos el estado de scattering estacionario $|\mathbf{p}+\rangle$, con función de onda $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p}+\rangle$ que asintóticamente se comporta como:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p}+\rangle \rightarrow (2\pi)^{-3/2} \left(e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + f \frac{e^{ipr}}{r} \right) \quad (\text{B.25})$$

Si expandimos los estados $|\mathbf{p}+\rangle$ en función de la base de estados $|E, l, m+\rangle$ [55]:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} + \rangle = (2\pi)^{-3/2} \frac{1}{pr} \sum_l (2l+1) i^l \psi_{l,p}(r) P_l(\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}) \quad (\text{B.26})$$

Comparando el comportamiento asintótico de (B.26) con (B.25) se consigue que

$$\psi_{l,p}(r) \rightarrow \hat{j}_l(pr) + p f_l(p) e^{i(pr-l\pi/2)} \quad (\text{B.27})$$

Dado que el comportamiento asintótico de las funciones de Riccati-Hankel está dado por:

$$\hat{h}_l^\pm(z) \rightarrow e^{\pm i(z-l\pi/2)} \quad (\text{B.28})$$

podemos reescribir (B.27) como:

$$\psi_{l,p}(r) \rightarrow \hat{j}_l(pr) + p f_l(p) \hat{h}_l^+(pr) \quad (\text{B.29})$$

Esta expresión puede ser reescrita empleando (B.23) y el hecho que $p f_l(p) = (S_l - 1)/2i$ [50], quedando:

$$\psi_{l,p}(r) \rightarrow \frac{i}{2} [\hat{h}_l^-(pr) - S_l \hat{h}_l^+(pr)] \quad (\text{B.30})$$

Haciendo uso de las *funciones de Jost* $\mathcal{F}_l(p)$ [55], se puede escribir la matriz S_l como:

$$S_l = \frac{\mathcal{F}_l(p)^*}{\mathcal{F}_l(p)} \quad (\text{B.31})$$

Como puede verse de (B.30) junto con (B.31), una función del tipo $a \hat{h}^+ + b \hat{h}^-$ se consigue multiplicando (B.30) por $\mathcal{F}_l(p)$:

$$\begin{aligned} \phi_{l,p}(r) &= \mathcal{F}_l(p) \psi_{l,p}(r) \\ &\Downarrow \\ \phi_{l,p}(r) &\rightarrow \frac{i}{2} [\mathcal{F}_l(p) \hat{h}_l^-(pr) - \mathcal{F}_l(p)^* \hat{h}_l^+(pr)] \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

La función $\phi_{l,p}(r)$ se conoce como la *Solución Regular*. Una discusión más detallada sobre la solución regular puede hallarse en [55].

Cabe destacar que dado el comportamiento asintótico de las funciones de Riccati-Hankel (B.28) y el hecho que se esté trabajando con $l = 0$, la expresión (4.29) queda plenamente justificada con la introducción de la solución regular (B.32).

Los vectores de estado de scattering $|\Psi^{in}\rangle$, $|\Psi^{out}\rangle$, que están conectados a través de la matriz S , conocido también como *Operador de Scattering*:

$$|\Psi^{out}\rangle = S|\Psi^{in}\rangle \quad (\text{B.33})$$

satisfacen la ecuación de Schrödinger (2.1) libre, con $V(r) = 0$, ambas con la misma energía E . Sin embargo, es más conveniente definir la matriz S en términos de estados exactos en lugar de los estados libres:

$$|\Psi\rangle - = S|\Psi^+\rangle \quad (\text{B.34})$$

donde Ψ^\pm son los autoestados del Hamiltoniano completo. La relación de los estados Ψ^+ y Ψ^- con los estados Ψ^{in} y Ψ^{out} puede entenderse como sigue. Si $\Psi^+(t)$ y $\Psi^-(t)$ son paquetes de onda que están centrados en los estados estacionarios Ψ^+ y Ψ^- , se tiene que:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi^\pm(t) &= \Psi^{in}(t) \\ \lim_{t \rightarrow +\infty} \Psi^-(t) &= \Psi^{out}(t) \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Acá, $\Psi^{in}(t)$ y $\Psi^{out}(t)$ son paquetes de onda construidos a partir de los estados libres. Los estados Ψ^\pm son las soluciones a la ecuación de Lippman-Schwinger (B.5).

Un estudio más profundo del operador de scattering puede hallarse en [55]. En su discusión del carácter analítico de la matriz S , se demuestra que sus polos deben corresponder a las energías de los estados ligados. La demostración hace uso de conceptos cuya discusión diverge del lineamiento del presente trabajo.

Bibliografía

- [1] Albrecht, H., Salamó, S., *por aparecer*, 2001.
- [2] Alhassid, Y., Gürsey, F., Iachello, F. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 873 (1983). *Ann. Phys.* **148**, 346 (1983).
- [3] Alhassid, Y., Gürsey, F., Iachello, F. *Ann. Phys.* **167**, 181 (1986).
- [4] Alhassid, Y., Iachello, F., Wu, J., *Ann. Phys.* **173**, 68 (1987).
- [5] Alhassid, Y., Wu, J., Gürsey, F., *Ann. Phys.*, **196** 163-191 (1989).
- [6] Arfken, G. B. *Mathematical Methods for Physicists*, Cuarta Edición, Academic Press, 1995.
- [7] Barut, A. O., Fronsdal, C. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, **287**, 532 (1965).
- [8] Barut, A. O., Rasmussen, W., *J. Phys. B: Atom. Molec.*, **6**, 1965 (1973); Barut, A. O., Rasmussen, W., Salamó, S., *Phys. Rev. D*, **10**, 622 (1974).
- [9] Barut, A. O., Rasmussen, W., Salamó, S., *Phys. Rev. D*, **10**, 630 (1974).
- [10] Barut, A. O., Raçzka, R. *Group Representations and Applications*, PWN, Warszawa, 1977.
- [11] Cohen-Tannoudji, C., et al., *Quantum Mechanics*, J. Wiley & Sons, Inc., 1977.
- [12] Cooper, F., Khare, A., Sukhatme, U., *Phys. Rep.*, **251**, 267 (1995). hep-th/9405029.
- [13] Cordero, P., Salamó, S., *Found. Phys.*, **23**, 675 (1993). *J. Math. Phys.*, **35**, 3301 (1994).
- [14] Cordero, P., Salamó, S., *J. Phys. A*, **24**, 5299 (1991).
- [15] Cotton, F. A., *Chemical Applications of Group Theory*, Tercera Edición, John Wiley & Sons., 1990.
- [16] Dabrowska, J., Khare, A., Sukhatme, U., *J. Phys. A*, **21**, L501 (1988).
- [17] Darboux, G., *Acad.Sci. (Paris)*, **94**, 1456 (1882).

- [18] Eckart, C., *Phys. Rev.*, **35**, 143 (1930).
- [19] Flüge, S., *Practical Quantum Mechanics*, Segunda Reimpresión, Springer Verlag, Berlin, 1994.
- [20] Frank, A., Wolf, K. B., *Phys. Rev. Lett.*, **52**(20), 1737 (1984).
- [21] Frank, A., Wolf, K. B., *J. Math. Phys.*, **26**(5), 973 (1985). Frank, A., Alhassid, Y., Iachello, F., *Phys. Rev. A*, **34**(1), 677 (1986). Frank, A., Alonso, C.E., Gómez-Camacho, J., *Rev. Mex. Fís.*, **39**(2), 64 (1993).
- [22] Fulton, W., Harris, J., *Representation Theory: A First Course*, Cuarta Reimpresión, Springer Verlag, 1991.
- [23] Galindo, A., Pascual, P. *Mecánica Cuántica*, Edit. Alhambra, Primera Edición, Madrid, 1978.
- [24] Gilmore, R. *Lie Groups, Lie algebras, and some of their applications*, J. Wiley & Sons, Inc., New York, 1974.
- [25] Ghirardi, G.C., *Il Nuovo Cimento A*, **10**, 97 (1972); Ghirardi, G.C., *Fortsch. Phys.*, **21**, 653 (1973).
- [26] Greiner, W. *Quantum Mechanics: Symmetries*, Segunda Edición, Springer Verlag, Heidelberg, 1994.
- [27] Hall, L.H., *Group Theory and Symmetry in Chemistry*, McGraw-Hill, 1969.
- [28] Hornburger, H., Dierksen, G.H.F., *J. Math. Chem.*, **24**, 39 - 60 (1998).
- [29] Iachello, F., *Chem. Phys. Lett.*, **78**, 581 (1981). Iachello, F., Levine, R. D., *J. Chem. Phys.*, **77**, 3046 (1982). van Roosmalen, O.S., Dipierink, A. E. L., Iachello, F., *Chem. Phys. Lett.*, **85**, 32 (1982).
- [30] Infeld, L., Hull, T. D., *Rev. Mod. Phys.*, **23**, 21 (1951).
- [31] Kerimov, G. A., *Phys. Rev. Lett.*, **90**(14), 2976 (1998).
- [32] Killing, W. *Math. Ann.*, **31**, 252-290 (1888). *Math. Ann.*, **33**, 1-48 (1889). *Math. Ann.*, **34**, 57-122 (1889). *Math. Ann.*, **36**, 161-189 (1890), *Math. Ann.*, **36**, 239-254 (1890).
- [33] Kratzer, A. *Z. Phys.*, **3**, 289 (1920).
- [34] Lie, M. S., Engel, F. *Theorie der Transformationsgruppen*, Vol.1 (1888), Vol.2 (1890), Vol.3 (1893), Leipzig. Lie, M. S., Scheffers, G. *Vorlesungen über Kontinuierliche Gruppen*, Leipzig, 1893.

- [35] Maitland, G. C., Rigby, M., Smith, B., Wakeham, W. A., *Intermolecular Forces: Their Origin and Determination*, Oxford University Press, Capítulo 4: *Molecular Collisions*, 1987.
- [36] Makarewicz, *J. Phys. A*, **22**, 4089 (1989). Makarewicz, *J. Phys. B*, **21**, 3633 (1988).
- [37] Manning, M.F., Rosen, N. *Phys. Rev.*, **44**, 953 (1933).
- [38] Merzbacher, E., *Quantum Mechanics*, Segunda Edición, John Wiley & Sons., New York, 1970.
- [39] Myhrman, U., *J. Math. Phys.*, **21**, 1732 (1980).
- [40] Natanzon, G. A., *Vestnik Leningradskogo Universiteta*, **10**, 22-8 (1971). physics/9907032.
- [41] Natanzon, G. A., *Theor. Math. Phys.*, **38**, 146 (1979).
- [42] Pak, Y., Kinsinger, C. and Cramer, C. J., *Theoretical Chemistry Accounts* **105**, 477 (2001).
- [43] Pöschl, G., Teller, E., *Z. Phys.* **83**, 143 (1933).
- [44] Rasmussen, W., Salamó, S., *J. Math. Phys.*, **20**, 1064 (1979).
- [45] Requena, A.; Alacid, M.; Bastida, A.; Zúñiga, J.; *Int. J. Quantum Chem.*, **52**, 165-175 (1994).
- [46] Rosen, N., Morse, P. M., *Phys. Rev.*, **42**, 210 (1932).
- [47] Rosu, H. C., quant-ph/9809056, publicado en *Symmetries in Quantum Mechanics and Quantum Optics*, Herranz, F. J., Ballesteros, A., Nieto, L. M., Pereña, C. M. (Edit.).
- [48] Sage, M. L. *J. Chem. Phys.*, **84**, 1565 (1986).
- [49] Sako, T., Aoki, D., Yamanouchi, K., F. Iachello, *J. Chem. Phys.*, **113**, 6063 (2000).
- [50] Sakurai, S. *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1994.
- [51] Samsonov, B. F., *Phys. Lett. A*, **263**, 274 (1999), quant-ph/9904009.
- [52] Schrödinger, E. *Proc. Irish Acad.*, **A46**, 9 (1940). *Proc. Irish Acad.*, **A46**, 183 (1940). *Proc. Irish Acad.*, **A47**, 53 (1941).
- [53] Seaborn, J. B., *Hypergeometric Functions and their Applications*, Springer Verlag, New York, 1991
- [54] Simmons, G., Parr, R. G., Finlan, J. M. *J. Chem. Phys.*, **59**, 3229 (1973). Simmons, G. *J. Chem. Phys.*, **61**, 369 (1974).

- [55] Taylor, J. R., *Scattering Theory: The Quantum Theory on Nonrelativistic collisions*, John Wiley & Sons., 1972.
- [56] Wei, H., Zhu, Q. *J. Phys. B*, **24**, 137 (1991).
- [57] Wigner, E., *Eugene Paul Wigner's Collected Works: Part 1 A*, Springer Verlag, Heidelberg, 1993.
- [58] Wu, J., Alhassid, Y., *J. Math. Phys.*, **31**(3), 557 (1990).
- [59] Wybourne, B. G., *Classical Groups for Physicists*, John Wiley & Sons. Inc., New York, 1974.
- [60] Zhen, Y., Yi, X., Guan, D. *Int. J. Quant. Chem.*, **76**, 500 (2000).
- [61] Zwanziger, D., *J. Math. Phys.*, **8**, 1858 (1967).