A POTENCIÁLSZÓRÁS ALAPFELADATA*

DOLINSZKY TAMÁS

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

A kvantummechanika megalkotásának első éveiben az érdeklődés előterében a kötött állapotok vizsgálata állott. Mivel a kvantummechanikai rendszereknek általában végesszámú kötött állapotuk van, az ilymódon szerezhető információ csak korlátozott felvilágosítást nyújthat a rendszeren belül uralkodó törvényekről. Ezért tolódott át a kutatások súlypontja a szórási állapotok kísérleti vizsgálatára. Szórási kísérletek segítségével kötött állapotokkal egyáltalán nem rendelkező rendszerek elemei között ható kölcsönhatásról is nyerhetők adatok, így pl. a $p-p$, $p-\pi$ kölcsönhatásra vonatkozóan. Ha viszont van a rendszernek kötött állapota, szóratással olyan paraméterek is nyerhetők, amelyekről a rendszer diszkrét állapotainak vizsgálata nem mondhat semmit. Így pl. a hidrogénatom nívószerkezetéből nem tudunk következtetni a proton elektromágneses alakfaktorára, míg a proton-elektron szóráskísérletekből — igen.

Az anyag viselkedését legpontosabban a kvantumtérelmélet formalizmusa keretében tudjuk ma leírni. A térelmélet értelmében az anyag legkisebb részének is végtelen nagy szabadsági foka van és ez konkrét problémákra való alkalmazása során leküzdhetetlen matematikai nehézségeket idéz elő. Szerencsére, ez a helyzet hasonló ahhoz, mint ami előáll a klasszikus mechanikában a kontinuumok tárgyalása esetében. Amint az eldobott gumilabda mozgását nagy vonásokban jó közelítéssel adja meg a merev testek mechanikája, úgy redukálódik — bizonyos feltételek mellett — a végtelen szabadsági-fokú rendszer közelítő kvantumelmélete néhány szabadsági fokra. Az a tapasztalat, hogy kölcsönható részrendszerek relatív mozgási energiájának $E \to 0$ csökkentése során a probléma egyre jobb közelítéssel tekinthető két tömegpont egy $V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, s_1, s_2)$ potenciállal leírható kvantummechanikai mozgásának. Ez utóbbi viszont matematikailag ekvivalens egy $3+1$ szabadsági fokú részecskének egy fix, egyrészecske-potenciálon való nem-relativisztikus (rugalmas) szóródásával. Ez a jelenség az ún. potenciálszórás, amely aránylag egyszerűen tárgyalható. A potenciálszórás addig jelent jó közelítést a valóságos folyamat leírásában, amíg, az E bombázó energia alacsony értéke miatt, a kölcsönhatás után lehetséges részrendszerek még nem jöhetnek létre gerjesztett állapotban; ilyenkor a valóságban is csak rugalmas szórás léphet fel. A bombázó energia növelésével egyre újabb csatornák nyílnak, egyre több szabadsági fok gerjesztődik, de a potenciálszórás elmélete nagy vonásokban, közelítőleg még itt is megőrzi használhatóságát. Hasonlóan ahhoz, ahogy a tömegpont vagy merev testek mechanikájának törvényei nagyjából eligazítanak a deformálható testek mozgásának leírásánál.

* *Marx György*nek a III. Magyar Elméleti Fizikai Nyári Iskolán tartott előadása alapján.

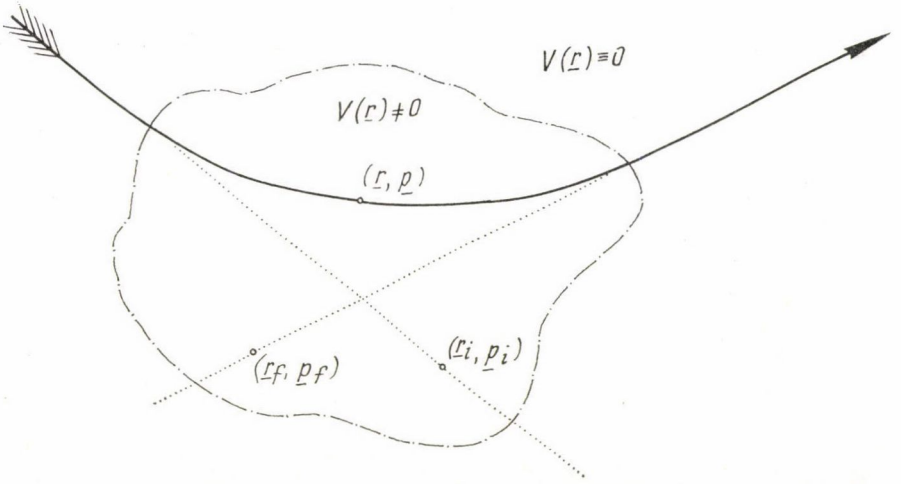
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA KÖNYVTÁRA

A szórásprobléma a klasszikus mechanikában

Tekintsünk az m-tömegű anyagi pont szóródását a $V(r)$ potenciállal leírt, a tér egy korlátos tartományában ható, erőtéren (lásd 1. ábrát). A mozgást az $\mathbf{r}=\mathbf{r}(t)$, $\mathbf{p}=\mathbf{p}(t)\equiv m\dot{\mathbf{r}}(t)$ formában az

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\operatorname{grad} V(\mathbf{r})$$

differenciálegyenlet írja le a $t=0$ időponthoz tartozó $\mathbf{r}(0)\equiv\mathbf{r}$, $\mathbf{p}(0)\equiv\mathbf{p}$ határfeltételek segítségével. Az $\mathbf{r}(t)$ görbének az időparaméter $t=\pm\infty$-re extrapolált értékei



1. ábra. A klasszikus mozgás a véges hatótávolságú szórótér elérése előtt és elhagyása után — szabadmozgás. A kezdő- és végállapot e két szabadmozgás folytatása az egész térre.

mellett — a kölcsönhatási térrész korlátossága miatt, a feltételesen periodikus mozgások kizárása esetén — egyenes aszimptotái vannak. Az $\mathbf{r}(t)$ állapot aszimptotikája nagy $|t|$ időkre:

$$\mathbf{r}(t)\sim\mathbf{r}_i+\frac{1}{m}\mathbf{p}_i t, \qquad t\to-\infty$$

$$\mathbf{r}(t)\sim\mathbf{r}_f+\frac{1}{m}\mathbf{p}_f t, \qquad t\to+\infty.$$

Az adott $\mathbf{r}(t)$ fizikai állapothoz kölcsönösen egyértelműen tartozik a $t=0$-beli $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ vektorpár. Utolsó két egyenletünkkel ugyanezen fizikai állapothoz újabb két vektorpárt, az $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ és $(\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$-t rendeltük hozzá. Ezek segítségével definiálhatjuk az

$$\mathbf{r}_i(t)\equiv\mathbf{r}_i+\frac{1}{m}\mathbf{p}_i t \qquad \text{minden } t\text{-re},$$

$$\mathbf{r}_f(t)\equiv\mathbf{r}_f+\frac{1}{m}\mathbf{p}_f t \qquad \text{minden } t\text{-re},$$

szabadállapotokat. Heisenberg terminológiáját használva, az $\mathbf{r}_i(t)$ szabadállapotot az $\mathbf{r}(t)$ fizikai állapot „kezdőállapotának", az $\mathbf{r}_f(t)$ szabadállapotot az $\mathbf{r}(t)$ fizikai állapot „végállapotának" nevezzük.

A fizikai állapotot, a kezdő állapotot és a végállapotot egyértelműen meghatározza a három mozgást a $t=0$ időpontban leíró három vektorpár: rendre az $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, az $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$, ill. az $(\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$. Adott $V(\mathbf{r})$ kölcsönhatás esetén, a vektorpárok bármelyike egyértelműen meghatározza a másik kettőt. Ha történetesen $V(\mathbf{r}) \equiv 0$ volna, azaz nem lenne szórótér, úgy

$$(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) = (\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$$

lenne. A $V(\mathbf{r})$ szórópotenciál jelenlétében a 3 vektorpár különbözik egymástól. Az $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$, az $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ és az $(\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$ vektorpárok, illetőleg az általuk reprezentált kezdő, fizikai, és végállapot kapcsolatát a következő sémával definiált S', Ω_+, Ω_- operátorokkal írhatjuk le:

$$\begin{tikzcd} (\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) \arrow[rr, "S'"] \arrow[dr, "\Omega_+"'] & & (\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f) \arrow[dl, "\Omega_-"] \\ & (\mathbf{r}, \mathbf{p}) & \end{tikzcd}$$

Az aszimptotatétel

A klasszikus fizikában, mint láttuk, véges hatótávolságú erőtér esetén minden $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ fizikai szórásállapothoz egyértelműen tartozik egy $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ szabad kezdő- és egy $(\mathbf{r}_f, \mathbf{p}_f)$ szabad végállapot. Megfordítva, minden szabad kezdőállapothoz (végállapothoz) megadhatjuk a hozzájuk tartozó fizikai szórás-állapotot.

E tételek kvantummechanikai megfelelője az ún. aszimptotatétel. Eszerint a Coulomb-potenciálnál gyorsabban eltűnő potenciál esetén az állapotegyenlet minden olyan négyzetesen-integrálható $\psi(\mathbf{r}, t)$ megoldásához, amely ortogonális a probléma kötött állapotainak $\mathscr{H}_d$ terére, található a szabadmozgás állapotegyenletének olyan két $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ és $\varphi_f(\mathbf{r}, t)$ megoldása, amelyekhez a $\psi(\mathbf{r}, t)$ állapotfüggvény nagy negatív ill. pozitív időpontokra erősen konvergál. Azaz, a

$$\frac{1}{i}\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + H\psi = 0;$$

$$H \equiv -\frac{1}{2m}\Delta + V \equiv H_0 + V;$$

$$r^{1+\varepsilon}V(\mathbf{r}) \to 0, \qquad r \to \infty, \quad \varepsilon > 0;$$

$$\int \psi^2(\mathbf{r}, t)\, d^3\mathbf{r} < \infty;$$

$$\psi(\mathbf{r}, t) \in \mathscr{H}_c,$$

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_d \oplus \mathscr{H}_c$$

feltételekből, ahol $\mathscr{H}$ a Hilbert-tér, $\mathscr{H}_d$ az exponenciálisan lecsengő kötött állapotok által kifeszített altér, következik olyan $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ és $\varphi_f(\mathbf{r}, t)$ függvények létezése, ame-

lyekre fennállnak az

$$\frac{1}{i}\frac{\partial\varphi_i(\mathbf{r},t)}{\partial t}+H_0\varphi_i=0, \qquad \frac{1}{i}\frac{\partial\varphi_f(\mathbf{r},t)}{\partial t}+H_0\varphi_f=0,$$

$$|\psi(\mathbf{r},t)-\varphi_i(\mathbf{r},t)|\Rightarrow 0, \qquad \text{ha} \quad t\to-\infty,$$

és

$$|\psi(r,t)-\varphi_f(\mathbf{r},t)|\Rightarrow 0, \qquad \text{ha} \quad t\to+\infty$$

egyenletek. Az aszimptotatétel igazolására csak egy következő előadásban kerül majd sor, itt csak szemléletessé tesszük jelentését a következő észrevétellel. Míg a kötött állapotok alterének elemei exponenciális lecsengésük miatt minden időpontban a szórócentrum közelében koncentrált valószínűségi eloszlásra vezetnek, addig a kontinuum-altérben definiált szórási állapotfüggvény eloszlásának súlypontja nagy $|t|$ időpontokra minden határon túl eltávolodik, előbb-utóbb kikerül a gyorsan lecsengő erőtér hatása alól és szabad hullámcsomagként folytatja mozgását.

Az aszimptotatételekben szereplő „erős-konvergencia" tipikusan Hilbert-térbeli fogalom. A függvénytér egy t paraméter szerint rendezett elemeinek sorozatának az erős ($\Rightarrow$) és gyenge ($\to$) konvergenciáját a következőképp definiáljuk:

$$\Phi_t\Rightarrow\Phi, \quad \text{ha} \quad \lim_{t\to\infty}\|\Phi_t-\Phi\|=0;$$

$$\Phi_t\to\Phi, \quad \text{ha} \quad \lim_{t\to\infty}(\psi,\Phi-\Phi_t)=0,$$

ahol ψ a Hilbert-tér egy tetszőleges eleme és $\|\ \|$ a norma jele. Operátor-sorozatok erős és gyenge konvergenciája fogalmát a függvénysorozatok konvergenciájára vezetjük vissza:

$$U_t\Rightarrow U, \quad \text{ha} \quad U_t\psi\Rightarrow U\psi,$$

$$U_t\to U, \quad \text{ha} \quad U_t\psi\to U\psi,$$

ahol ψ a Hilbert-tér bármely fix eleme.

A Møller-féle hullámoperátorok

A $\varphi_i(\mathbf{r},t)$ kezdőállapot, a $\psi(\mathbf{r},t)$ fizikai állapot és a $\varphi_f(\mathbf{r},t)$ végállapot mindegyike egyértelműen jellemezhető $t=0$-beli $\varphi_i(\mathbf{r})$, $\psi(\mathbf{r})$, $\varphi_f(\mathbf{r})$ alakjukkal, amelyeket

$$\varphi_i(\mathbf{r},t)\equiv e^{-iH_0t}\varphi_i(\mathbf{r}),$$

$$\psi(\mathbf{r},t)\equiv e^{-iHt}\psi(\mathbf{r}),$$

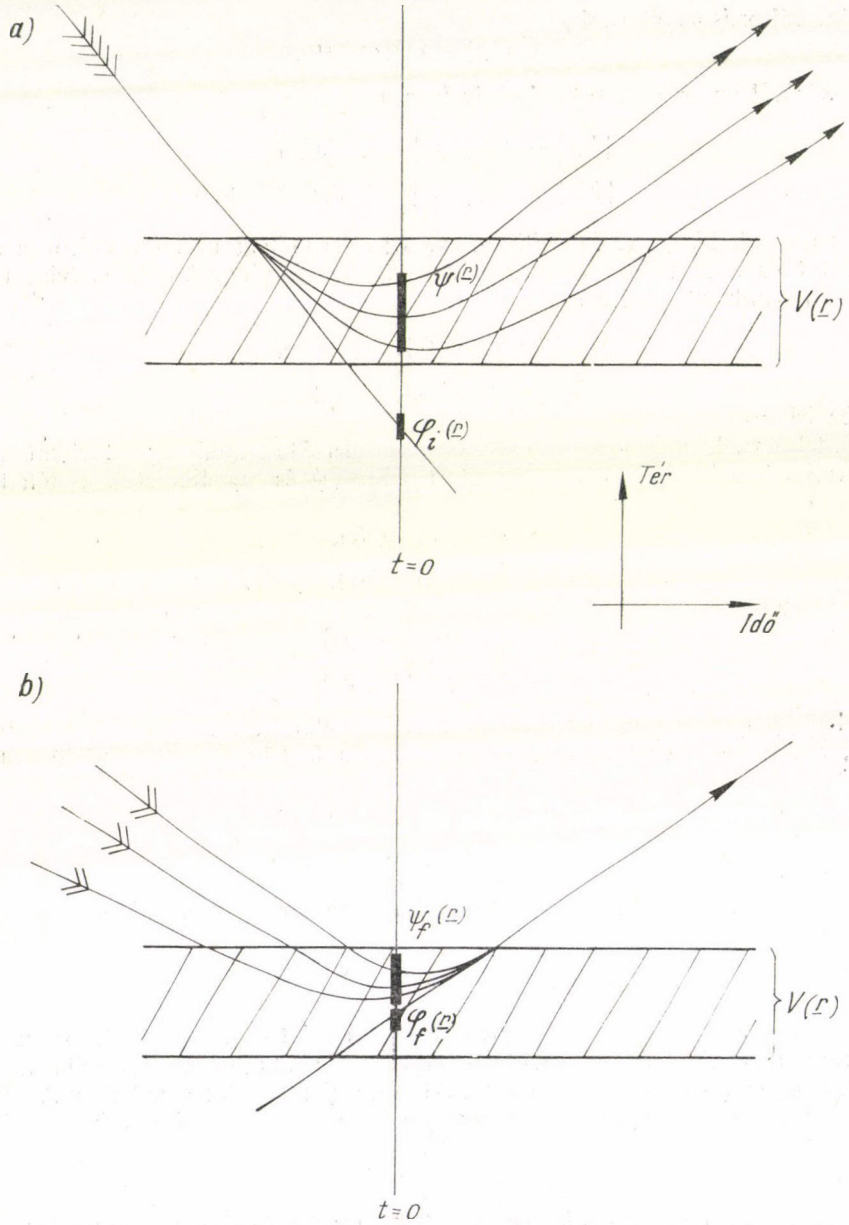
$$\varphi_f(\mathbf{r},t)\equiv e^{-iH_0t}\varphi_f(\mathbf{r})$$

egyenletek, mint a megfelelő állapotegyenletek megoldásai, egyértelműen definiálnak.

Az aszimptotatétel értelmében

$$|e^{-iHt}\psi(\mathbf{r})-e^{-iH_0t}\varphi_i(\mathbf{r})|\Rightarrow 0, \quad \text{ha} \quad t\to-\infty;$$

$$|e^{-iHt}\psi(\mathbf{r})-e^{-iH_0t}\varphi_f(\mathbf{r})|\Rightarrow 0, \quad \text{ha} \quad t\to+\infty.$$



2. ábra. A kvantummechanikai mozgás.

a) A térben jól-koncentrált („egyszerű") $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ kezdőállapot szabadmozgás esetén a $t=0$-kor alig szélesedik ki: $[\varphi_i(\mathbf{r})]$. A $V(\mathbf{r})$ szórótér hatására a $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ kezdőállapotból kifejlődő $\psi(\mathbf{r}, t)$ fizikai állapot $t=0$-ra jelentősen szétfolyik: $[\psi(\mathbf{r})]$.

b) A térben jól-koncentrált $\varphi_f(\mathbf{r}, t)$ („egyszerű") végállapot $t=0$-kor kevéssé, a $\varphi_f(\mathbf{r}, t)$-t generáló $\psi(\mathbf{r}, t)$ fizikai állapot ugyancsak $t=0$-kor térbelileg lényegesen kiterjedt.

Az ún. változásoperátornak,

$$U(t) \equiv e^{iHt} e^{-iH_0 t}$$

bevezetésével az aszimptotatétel ekvivalens a

$$|\psi(\mathbf{r}) - U(t)\varphi_i(\mathbf{r})| \Rightarrow 0, \quad \text{ha} \quad t \to -\infty,$$

$$|\psi(r) - U(t)\varphi_f(\mathbf{r})| \Rightarrow 0, \quad \text{ha} \quad t \to +\infty$$

egyenletpárral, hiszen H hermitikus, exp $(+iHt)$ unitér; unitér operátor a skalár szorzatot és a normát s vele az erős konvergenciát invariánsan hagyja. Utolsó egyenletpárunk alternatíve az

$$U(t)\varphi_i(\mathbf{r}) \Rightarrow \psi(\mathbf{r}), \quad t \to -\infty,$$

$$U(t)\varphi_f(\mathbf{r}) \Rightarrow \psi(\mathbf{r}), \quad t \to +\infty$$

alakba írható.

Értelmezzük mármost az Ω_+, Ω_-, Møller-féle hullámoperátorokat (1945) a következő módon. Adott és összetartozó φ_i, ψ és φ_f állapotok esetén legyen (2. ábra)

$$\Omega_+ \varphi_i(\mathbf{r}) \equiv \psi(\mathbf{r}),$$

$$\Omega_- \varphi_f(\mathbf{r}) \equiv \psi(\mathbf{r}).$$

Ezek szerint

$$U(t)\varphi_i(\mathbf{r}) \Rightarrow \Omega_+ \varphi_i(\mathbf{r}),$$

$$U(t)\varphi_f(\mathbf{r}) \Rightarrow \Omega_- \varphi_f(\mathbf{r}).$$

Mivel a $\varphi_i(\mathbf{r})$ és a $\varphi_f(\mathbf{r})$ függvények sokasága külön-külön is kifeszítik a Hilbert-teret, ezért az operátorok erős konvergenciájának fent bevezetett definíciója alapján írhatjuk:

$$U(t) \Rightarrow \Omega_+, \quad \text{ha} \quad t \to -\infty,$$

$$U(t) \Rightarrow \Omega_-, \quad \text{ha} \quad t \to +\infty.$$

Az aszimptotatétel éppen a hullámoperátorok egzisztenciáját mondja ki.

A hullámoperátorok tulajdonságai

Az Ω_+ és Ω_- operátorok — értelmezésük szerint — a kezdő, ill. végállapotok sokaságát a belőlük kifejlődő ill. őket generáló fizikai állapotok sokaságába viszik át. Mivel a φ_i és φ_f állapotok az egész $\mathscr{H}$-teret, a ψ állapotok annak csak $\mathscr{H}_c$ alterét feszítik ki, mind az Ω_+, mind Ω_- a teljes Hilbert-teret annak kontinuum-alterére képezik le:

$$\Omega_\pm \mathscr{H} = \mathscr{H}_c.$$

Eszerint a hullámoperátorok nem unitérek. Mégis, Ω_+ és Ω_- rendelkeznek az unitér operátorok egyik tulajdonságával, a skalár szorzat invarianciájával, az ún. izometriával. A hullámoperátorok izometriája öröklődik az $U(t)$ unitér operátoroktól, amelyek sorozata $t \to \mp\infty$-re erősen konvergál $\Omega_\pm$-hoz. Nevezetesen, az

$$U(t) = e^{iHt} e^{-iH_0 t}$$

változásoperátor a H és H_0 Hamilton-operátorok hermiticitása révén unitér. Eszerint

$$(U(t)\varphi, U(t)\varphi') = (\varphi, \varphi').$$

Másrészt kimutatható, hogy a

$$\xi(t) \Rightarrow \xi_0, \quad \eta(t) \Rightarrow \eta_0$$

feltételek mellett általánosan fennáll skalár szorzatuk sorozatára

$$\lim_{t \to \pm\infty} (\xi(t), \eta(t)) = (\xi_0, \eta_0).$$

Ennek a segédtételnek felhasználásával most már látható az izometria:

$$(\Omega_\pm \varphi, \Omega_\pm \varphi') = (\varphi, \varphi').$$

Eszerint

$$\Omega_\pm^+ \Omega_\pm = 1,$$

de az unitér operátorok másik jellemzője nem teljesül:

$$\Omega_\pm \Omega_\pm^+ \neq 1,$$

amint azonnal kimutatjuk.

Unitaritás és izometria a függvénytérben

A nem-unitér izometria fogalmának megvilágítása céljából tekintsük először az unitér operátor fogalmát.

Tekintsük az A és B nem kommutáló operátorok $|a\rangle$, ill. $|b\rangle$ sajátfüggvényeinek egy-egy teljes, ortonormált rendszerét, $\{\{|a\rangle\}\}$ ill. $\{\{|b\rangle\}\}$-t. Minden elemére fennáll

$$A|a\rangle = a|a\rangle, \quad B|b\rangle = b|b\rangle.$$

Tekintsük most a két, egymástól szükségképpen különböző bázisrendszert egymásba transzformáló U operátort, amelynek definíciója legyen

$$|a_i\rangle \equiv U|b_i\rangle.$$

Innen az U operátor projekciós előállítása

$$U = \sum_l |a_l\rangle\langle b_l|, \qquad U^+ = \sum_l |b_l\rangle\langle a_l|.$$

Az U operátor mátrixelemei a $|b\rangle$ bázisrendszeren:

$$U_{li} \equiv \langle b_l|U|b_i\rangle = \langle b_l|a_i\rangle.$$

Innen

$$|a_i\rangle = \sum_l |b_l\rangle\langle b_l|a_i\rangle = \sum_l U_{li}\,|b_l\rangle.$$

Az U operátor unitér, hiszen

$$U^+U = \sum_l \sum_j |b_l\rangle\langle a_l|a_j\rangle\langle b_j| = \sum_l |b_l\rangle\langle b_l| = 1;$$

$$UU^+ = \sum_l \sum_j |a_j\rangle\langle b_j|b_l\rangle\langle a_l| = \sum_l |a_l\rangle\langle a| = 1.$$

Az unitaritás felhasználásával az $|a\rangle$ bázison képzett mátrixelemre fennáll:

$$\langle a_l|U|a_i\rangle = \langle U^{-1}a_l|a_i\rangle = \langle b_l|a_i\rangle = \langle b_l|U|b_i\rangle.$$

Az U operátor mátrixelemei eszerint a két bázison megegyeznek.

Az unitaritás fogalmától különbözik az izometria fogalma: a $\mathscr{H}$ Hilbert-tér mértéktartó leképezése egy valódi alterére. Más szóval, az izometria egy teljes bázisrendszer mértéktartó leképezése bázisfüggvények egy nem-teljes rendszerére. Az I izometrikus operátorra fennáll:

$$(\varphi, \psi) = (I\varphi, I\psi)$$

minden φ és minden ψ mellett. Innen azonnal következik:

$$I^+ I = 1.$$

Ugyanakkor

$$II^+ \neq 1,$$

hiszen az

$$II^+ = I,$$

$$(II^+ - 1)I = 0$$

egyenletből az

$$II^+ - 1 = 0$$

összefüggés csak az $I\mathscr{H}$ altérben következik.

A geometriában véges egyenesszakaszt nem képezhetünk le mértéktartóan egy részére; a végtelen féltengelyt azonban egy végtelen részintervallumára — igen. Ennek analógiájaképpen, a függvényterek esetében sem lehet egy végesdimenziójú Hilbert-teret mértéktartóan leképezni egy valódi alterére; végtelen dimenziójú teret már igen. Tekintsük e célból a végtelen dimenziójú függvényteret kifeszítő két bázisrendszert, $\{|a_n\rangle\}$ és $\{|b_n\rangle\}$-et. Adjuk meg az r pozitív egész számot, akkor az

$$\begin{array}{cc} & |a_1\rangle, \quad |a_2\rangle, \quad \ldots, |a_n\rangle, \quad \ldots \\ & \downarrow \qquad \downarrow \qquad\qquad \downarrow \\ \underbrace{|b_1\rangle, |b_2\rangle, \ldots, |b_r\rangle,}_{1 - I\mathscr{H} = \mathscr{H}_1} & \underbrace{|b_{r+1}\rangle, |b_{r+2}\rangle, \ldots, |b_{r+n}\rangle, \ldots}_{I\mathscr{H} = \mathscr{H}_2} \end{array}$$

sémával megadtuk a végtelen-dimenziós $\mathscr{H}$-térnek az $I\mathscr{H} = \mathscr{H}_2$ alterére való leképzését. A leképzést létesítő I operátor és adjungáltja az ismert módon felírható:

$$I = \sum_{n=1}^{\infty} |b_{r+n}\rangle\langle a_n|, \qquad I^+ = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n\rangle\langle b_{r+n}|.$$

Innen az unitaritás szempontjából döntő szorzatoperátorok:

$$I^+ I = \sum_n \sum_m |a_n\rangle\langle b_{r+n}|b_{r+m}\rangle\langle a_m| = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = 1,$$

de már

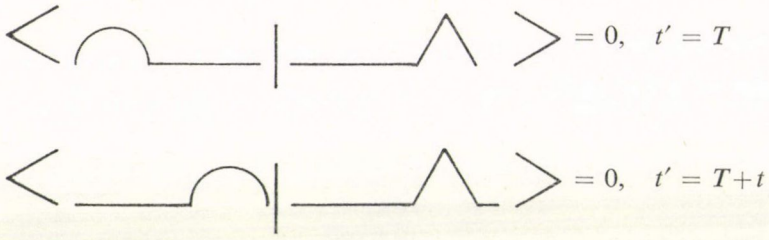
$$II^+ = \sum_n \sum_m |b_{r+n}\rangle\langle a_n|a_m\rangle\langle b_{r+m}| = \sum_n |b_{r+n}\rangle\langle b_{r+n}| = P(\mathscr{H}_2).$$

Eszerint az II^+ szorzat az $I\mathscr{H} = \mathscr{H}_2$ valódi altérbe vetítő projekciós operátort adja meg, ami nem az azonosság.

Azt a kérdést, hogy az Ω_+, Ω_- hullámoperátorok csupán izometrikusak, vagy esetleg unitérek is, csak az aszimptotatétel megfordítása útján válaszolhatjuk meg.

Az aszimptotatétel megfordítása

Bebizonyítható, hogy a kölcsönhatásmentes H_0 operátor minden négyzetesen integrálható $\varphi(t)$ megoldásához tartozik a H operátor egy olyan $\psi_{\text{in}}(\varphi)$ és egy olyan $\psi_{\text{out}}(\varphi)$ négyzetesen integrálható megoldása, amelyekkel a $\varphi(t)$ függvény a $t \to -\infty$, ill. $t \to +\infty$ időkre az erős konvergencia értelmében aszimptotikusan megegyezik; ezek a $\psi_{\text{in}}(\varphi)$, $\psi_{\text{out}}(\varphi)$ megoldások ortogonálisak a H-probléma kötött állapotaira.



3. ábra. A szórási hullámcsomag nagy negatív időpontokban az átfedés hiánya miatt ortogonális kötött állapotokra. Ez az ortogonalitás a $\rightleftarrows$ állapotegyenlet szerkezete folytán az átfedés idejére is átöröklődik

Szemléletessé tehető a tétel második állítása, ha meggondoljuk, hogy a $\psi(\mathbf{r}, t)$ hullámcsomag bármely nagy negatív, de véges időpontban, igen jó közelítéssel, ortogonális az exponenciálisan lecsengő kötött állapotokra (lásd a 3. ábrát), és ez az ortogonalitás a

$$\psi(\mathbf{r}, T+t) = e^{-iHt}\psi(\mathbf{r}, T) =$$

$$= e^{-iHt} \sum_c a_c \psi_c(\mathbf{r}) =$$

$$= \sum_c e^{-i\mathscr{E}_c t} a_c \psi_c(\mathbf{r}) \qquad (c = \text{index } \mathscr{H}_c\text{-ben})$$

időbeli viselkedés miatt végig megmarad. Eszerint, hiába „jön be" a hullámcsomag a szórócentrum térségébe, itt is ortogonális lesz a kötött állapotok alterére.

Korábban igazoltuk az $\Omega_\pm$ operátorok izometriáját. Később láttuk, hogy $II^+ = P(\mathscr{H}_2)$, azaz az izometrikus operátorok akkor és csak akkor unitérek is egyúttal, ha a Hilbert-teret önmagára képezik le. Éppen most mondottuk ki, hogy az $\Omega_\pm$ a Hilbert-teret a H-probléma $\mathscr{H}_c \equiv \mathscr{H} - \mathscr{H}_d$ kontinuum-alterébe viszik át. Ha a H-rendszernek van kötött állapota, akkor a $\mathscr{H}_c$ altér valódi altér, és az Ω_+, Ω_- nem unitérek. Ha a rendszernek nincs kötött állapota, akkor az $\Omega_\pm$ operátorok nemcsak izometrikusak, de unitérek is. Szélsőséges példa a végtelen sok kötött állapot kivételes jelensége: a proton-elektron kölcsönhatás. Ebben az esetben a kölcsönhatásmentes állapotok az elektron-proton relatív szabad mozgásának síkhullámai; a rendszer kötött állapotait a hidrogén-atom nívói; az elektron-proton szórási állapotfüggvény a hidrogén-atom kötött állapotaira ortogonális altérbe esik. Ilyenkor természetesen a $\Omega_\pm$ operátorok nem unitérek.

A hullámoperátorok „csererelációi"

Az $U(t) \Rightarrow \Omega_+$ $(t \to -\infty)$ következtében minden véges időpontra azonosan igaz a következő egyenlet:

$$e^{iH\tau}\,\Omega_-\,e^{-iH_0\tau} = e^{iH\tau}\lim_{t=\infty}[e^{iHt}\,e^{-iH_0t}]e^{-iH_0\tau} =$$

$$= \lim_{t+\tau=\infty}[e^{iH(\tau+t)}\,e^{-iH_0(\tau+t)}] =$$

$$= \lim_{t=\infty} U(t) =$$

$$= \Omega_-,$$

függetlenül τ értékétől. Ezért a τ-szerinti differenciálás a $\tau = 0$ időben

$$i(H\Omega_- - \Omega_- H_0) = 0$$

eredményt ad. Hasonló reláció vezethető le Ω_+-ra is; összefoglalva:

$$H\Omega_\pm = \Omega_\pm H_0,$$

azaz, a Møller-operátort a Hamilton-operátorral felcserélve, utóbbiból eltűnik a kölcsönhatás. Ez igen fontos tulajdonságuk a hullámoperátoroknak.

A szórásoperátor

Tekintsünk egy $\{\varphi_n\}$ teljes ortonormált függvényrendszert a Hilbert-térben. Kimutatjuk, hogy a $\{\psi_n\} = \Omega_+\{\varphi_n\}$ függvényrendszer a $\mathscr{H}_c$-ben szintén teljes és ortonormált. Az ortonormáltság közvetlen következménye az Ω_+ izometriájának. A teljesség igazolása a kontinuum-altérbe vetítő $P(\mathscr{H}_c)$ operátornak az Ω_+ hullámoperátorral való kapcsolatából adódik a következőképpen: A $\{\varphi_n\}$ rendszer teljessége miatt a Hilbert-tér bármely ψ elemére fennáll:

$$\Omega_+^+\psi \equiv \varphi = \sum_n a_n\,\varphi_n.$$

Másrészt az $\Omega_+\Omega_+^+ = P(\mathscr{H}_c)$ segítségével

$$P(\mathscr{H}_c)\psi = \sum_n \alpha_n\,\Omega_\pm\,\varphi_n = \sum_n \alpha_n\,\psi_n;$$

azaz tetszőleges függvény kontinuum-altérbeli vetülete kifejthető a $\{\psi_n\}$ bázison.

A φ függvényhez mint kezdőállapothoz tartozó fizikai állapotot $\psi_{\text{in}}(\varphi)$-vel, a φ-hez mint végállapothoz tartozó fizikai állapotot $\psi_{\text{out}}(\varphi)$-vel jelölve, előző tételünk alapján kimondhatjuk, hogy a

$$\{\psi_{\text{in}}(\varphi_n)\} \quad \text{és a} \quad \{\psi_{\text{out}}(\varphi_n)\}$$

függvényrendszerek mindegyike ortonormált és a $\mathscr{H}_c$ altérben teljes. A teljesség és az ortonormalitás következménye az, hogy a

$$\psi_{\text{in}}(\varphi_n) = \Omega_+\varphi_n,$$
$$\psi_{\text{out}}(\varphi_n) = \Omega_-\varphi_n$$

definíciós egyenletek alapján a hullámoperátorok előállítása a következő:

$$\Omega_+ = \sum_n |\psi_{\text{in}}(\varphi_n)\rangle\langle\varphi_n|,$$

$$\Omega_- = \sum_n |\psi_{\text{out}}(\varphi_n)\rangle\langle\varphi_n|.$$

A fenti teljességi tételünkből következik az is, hogy a

$$\{\psi_{\text{in}}(\varphi_n), \psi_d\} \quad \text{és a} \quad \{\psi_{\text{out}}(\varphi_n), \psi_d\}$$

bázisrendszerek mindegyike most már az egész Hilbert-térben külön-külön teljes rendszer lesz.

A $\mathscr{H}_c$ altérben értelmezett $\{\psi_{\text{in}}(\varphi_n)\}$ és $\{\psi_{\text{out}}(\varphi_n)\}$ két teljes ortonormált függvényrendszer az altéren belül értelmez egy transzformációs S operátort, amely szükségképpen unitér. Az S operátor neve *szórásoperátor*, definíciója a $\mathscr{H}_c$ altérben:

$$\psi_{\text{in}}(\varphi_n) \equiv S\psi_{\text{out}}(\varphi_n).$$

A szórásoperátor projekciós előállítása így

$$S = \sum_n |\psi_{\text{in}}(\varphi_n)\rangle\langle\psi_{\text{out}}(\varphi_n)|$$

lesz, amelyet összehasonlíthatunk a hullámoperátorok

$$\Omega_+ = \sum_n |\psi_{\text{in}}(\varphi_n)\rangle\langle\varphi_n|$$

$$\Omega_- = \sum_n |\psi_{\text{out}}(\varphi_n)\rangle\langle\varphi_n|$$

előállításával (lásd a 4. ábrát).

A szórásoperátor fogalmát Wheeler (1937) és Heisenberg (1943) vezették be a fizikába.

Fizikai jelentése jobban kidomborodik, ha megvizsgáljuk az egyelőre definícióképpen S_{mn}-vel jelölt

$$S_{mn} \equiv \langle\psi_{\text{out}}(\varphi_m)|\psi_{\text{in}}(\varphi_n)\rangle$$

mátrixelem értelmezését. $|S_{mn}|^2$, definíciója értelmében megadja, hogy a φ_n kezdőállapotból kifejlődő $\psi_{\text{in}}(\varphi_n)$ fizikai állapotban milyen valószínűséggel van jelen a φ_m végállapotra vezető $\psi_{\text{out}}(\varphi_m)$ fizikai állapot. (Lásd a 2. ábrát). Ez azonban pontosan egyenlő annak a valószínűségével, hogy a rendszer a φ_n kezdőállapotból a kölcsönhatás eredményeképp éppen a φ_m végállapotba jut.

Mi a kapcsolata az S_{mn} mátrixelemnek a mérésekkel? A fizikában elvégzett szóráskísérleteink detektorai olyan műszerek, amelyek meghatározott egyszerű szabadállapotokra meghatározott módon szólalnak meg. Segítségükkel a fizikai állapot a detektor felállításának helyén az egyszerű szabadállapotok szuperpozíciójaként analizálható. A szórócentrumtól aránylag igen nagy távolságban elhelyezett detektor a fizikai hullámcsomagot a $t = 0$-beli kölcsönhatás után aránylag igen nagy pozitív időpontban analizálja. Így mérésünk igen jó közelítéssel a végállapotot bontja fel az egyszerű szabadállapotok szuperpozíciójára. Ez azt jelenti, hogy a mérés éppen az $|S_{mn}|^2$ értékeket szolgáltatja.

Most bebizonyítjuk, hogy az S_{mn} elemekből felépített mátrix az S szórásoperátort reprezentálja akár a $\{\psi_{\text{in}}(\varphi_n)\}$, akár a $\{\psi_{\text{out}}(\varphi_n)\}$ bázison. Ugyanis

$$\begin{aligned} S_{mn} &\equiv \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle = \\ &= \langle S^{-1}\psi_{\text{in}}(\varphi_m) | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle \\ &= \langle \psi_{\text{in}}(\varphi_m) | S | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle \\ &= \psi_{\text{out}}\langle (\varphi_m) | S | \psi_{\text{out}}(\varphi_n) \rangle . \end{aligned}$$

A bizonyításnál felhasználtuk S unitaritását. Az S szórásoperátor kapcsolatát az $\Omega_\pm$ hullámoperátorokkal egyszerű kimutatni:

$$\begin{aligned} S_{mn} &\equiv \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle = \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \Omega_+ \varphi_n \rangle = \\ &= \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \Omega_+ \Omega_-^+ | \psi_{\text{out}}(\varphi_n) \rangle . \end{aligned}$$

Innen azonnal kapjuk a nevezetes összefüggést:

$$S = \Omega_+ \Omega_-^+ .$$

Az S és az $\Omega_\pm$ operátorok kapcsolatából új szemszögből láthatjuk S unitaritását a $\mathscr{H}_c$ altérben:

$$\begin{aligned} S^+ S &= \Omega_- \Omega_+^+ \Omega_+ \Omega_-^+ = \Omega_- \Omega_-^+ = P(\mathscr{H}_c), \\ S S^+ &= \Omega_+ \Omega_-^+ \Omega_- \Omega_+^+ = \Omega_+ \Omega_+^+ = P(\mathscr{H}_c). \end{aligned}$$

Ezek szerint az S operátor értelmezési tartományán, a $\mathscr{H}_c$ altéren belül, ahol $P(\mathscr{H}_c) = 1$, unitér.

Az S' szórásoperátor

Míg S operátor két fizikai állapotsokaság között létesített kapcsolatot, a most definiálandó S' a kezdő és végállapotok teljes rendszerét köti össze. Alakítsuk át e célból az ismert S_{mn} mátrixelemet.

$$\begin{aligned} S_{mn} &= \langle \psi_{\text{out}}(\varphi_m) | \psi_{\text{in}}(\varphi_n) \rangle = \langle \Omega_- \varphi_m | \Omega_+ \varphi_n \rangle = \\ &= \langle \varphi_m | \Omega_-^+ \Omega_+ | \varphi_n \rangle \equiv \langle \varphi_m | S' | \varphi_n \rangle , \end{aligned}$$

ahol

$$S' \equiv \Omega_-^+ \Omega_+$$

definiálja az S' szórásoperátort. S' ezek szerint bármely kezdőállapotot átvisz a belőle kifejlődő végállapotba — és így azonos a perturbációszámításos gyakorlatban elterjedt szórásoperátor-fogalommal. S' az egész Hilbert-térben értelmezve van, és itt unitér, mert

$$\begin{aligned} S'^+ S' &= \Omega_+^+ \Omega_- \Omega_-^+ \Omega_+ = \Omega_+^+ \big(1 - P(\mathscr{H}_d)\big) \Omega_+ = 1, \\ S' S'^+ &= \Omega_-^+ \Omega_+ \Omega_+^+ \Omega_- = \Omega_-^+ \big(1 - P(\mathscr{H}_d)\big) \Omega_- = 1. \end{aligned}$$

Itt felhasználtuk, hogy az $\Omega_\pm$ operátorok a $\mathscr{H}$-teret a $\mathscr{H}_c$ altérbe viszik át; így $P(\mathscr{H}_d)\Omega_\pm = 0$.

Végül kimutatjuk azt a meglepő csererelációt, hogy míg az S operátor a teljes Hamilton operátorral kommutál, addig az S' operátor a kölcsönhatásmentes Hamilton-operátorral

$$HS = H\Omega_+\Omega_-^+ = \Omega_+ H_0 \Omega_-^+ = \Omega_+(\Omega_- H_0)^+ = \Omega_+(H\Omega_-)^+ = SH,$$

$$H_0 S' = H_0 \Omega_-^+ \Omega_+ = (\Omega_- H_0)^+ \Omega_+ = (H\Omega_-)^+ \Omega_+ = \Omega_-^+ H \Omega_+ =$$

$$= \Omega_-^+ \Omega_+ H_0 = S' H_0 .$$

Összehasonlítva a hullámoperátorokat és a szórásoperátorokat, mondhatjuk: (lásd a 4. és 5. ábrát)

$$\begin{tikzcd} \psi_{in}(\varphi) & & \psi_{out}(\varphi) \arrow[ll, "S"'] \\ & \varphi \arrow[ul, "\Omega_+"] \arrow[ur, "\Omega_-"'] & \end{tikzcd}$$

4. ábra. Az adott φ szabad állapothoz egyszer mint kezdő-, egyszer mint végállapothoz két különböző jellegű fizikai állapot, $\psi_{\text{in}}(\varphi)$ és $\psi_{\text{out}}(\varphi)$ tartozik.

$$\begin{tikzcd} \varphi_i(\psi) \arrow[rr, "S'"] \arrow[dr, "\Omega_+"'] & & \varphi_f(\psi) \arrow[dl, "\Omega_-"] \\ & \psi & \end{tikzcd}$$

5. ábra. Adott ψ fizikai állapot kapcsolata a hozzátartozó $\varphi_i(\psi)$ kezdő- és $\varphi_f(\psi)$ végállapottal.

Az Ω_+ ill. Ω_- operátorok a φ_n kezdő ill. végállapotokat viszik át a belőlük kifejlődő $\psi_{\text{in}}(\varphi_n)$, ill. őket generáló $\psi_{\text{out}}(\varphi_n)$ fizikai állapotokba. $\Omega_\pm$ az egész $\mathscr{H}$-térben értelmezve vannak, $\mathscr{H}$-ban izometrikusak és $\mathscr{H}_c$-ben uniterek. Az S operátor a φ_n végállapotot generáló $\psi_{\text{out}}(\varphi_n)$ fizikai állapotot viszi át az ugyanezen φ_n-ből, mint kezdőállapotból kifejlődő $\psi_{\text{in}}(\varphi_n)$ fizikai állapotba. Csak a $\mathscr{H}_c$ altérben van értelmezve és itt unitér. Az S' operátor a φ_n kezdőállapotot viszi át a belőle kifejlődő végállapotba; az egész $\mathscr{H}$-térben értelmezve van és $\mathscr{H}$-ban unitér. S-nek egy in- és egy out-állapot között képzett mátrixeleme megegyezik S'-nek a megfelelő kezdő és végállapotok közötti mátrixelemével; modulusuk négyzete megadja, hogy a φ_n kezdőállapotból kifejlődő végállapotban milyen valószínűséggel található meg a φ_m egyszerű végállapot.

Az S' szórásoperátor előállítása idő-integrál formájában

Az alábbiakban levezetjük az S' egy integrálelőállítását, amely inkább elvi jelentősége, mint gyakorlati használhatósága miatt érdekes. E célból definiáljuk a kétváltozós $U(t, t_0)$ operátort az

$$U(t, t_0) = U^+(t) U(t_0)$$

egyenlettel, ahol $U(t)$ a már ismert egyváltozós változásoperátor:

$$U(t) \equiv e^{iHt} e^{-iH_0 t} .$$

Eszerint

$$U(t, t_0) = e^{-iHt} e^{-iH_0(t-t_0)} e^{+iH_0 t_0} .$$

Nyilvánvalóan fennáll a következő határfeltétel:

$$U(t_0, t_0) = 1.$$

Az új operátor számára levezethető egy integrálegyenlet. Időderiválás útján kapjuk a definíciós egyenletekből:

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = e^{iH_0 t} iH_0 e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0} - e^{-iH_0 t} iH e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t} =$$

$$= -ie^{iH_0 t}(H-H_0)e^{-iH_0 t} U(t, t_0) = -iV(t)U(t, t_0),$$

ahol bevezettük a

$$V(t) \equiv e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}$$

jelölést.

A keresett integrálegyenlet a fenti kezdőfeltétel figyelembevételével

$$U(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^{t} V(t') U(t', t_0)\, dt'.$$

Megoldása nyilvánvalóan iterációs módszerrel közelíthető meg:

$$U(t, t_0) = \lim_{n=\infty} U_n(t, t_0),$$

ahol

$$U_{n+1}(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^{t} V(t') U_n(t', t_0)\, dt';$$

$$U_\infty(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^{t} V(t_1)\, dt_1 + (-i)^2 \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1} V(t_2) V(t_1)\, dt_2\, dt_1 + \ldots =$$

$$= \sum_r (-i)^r \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1} \ldots \int_{t_0}^{t_{r-1}} V(t_r) \ldots V(t_2) V(t_1)\, dt_1\, dt_2 \ldots dt_r =$$

$$= T \exp\left[(-i) \int_{t_0}^{t} V(t')\, dt'\right].$$

Itt T a Dyson-féle időrendező operátor.

Az $U(t, t_0)$ operátor ismeretében közvetlenül nyerhetők volnának az eddig bevezetett szóráselméleti operátorok, hiszen

$$U(0, t) = U(t), \quad U(0, -\infty) = \Omega_+,$$

$$U(t, 0) = U^+(t), \quad U(\infty, 0) = \Omega_-^+,$$

$$U(\infty, -\infty) = U^+(\infty) U(-\infty) = \Omega_-^+ \Omega_+ = S'.$$

Az $U(t, t_0)$ integrálegyenleteknek segítségével integrálegyenletet kaphatunk a hullámoperátorok számára is. A definíciós egyenlet és a csererelláció egybevetéséből:

$$U(t, -\infty) = U^+(t)\Omega_+ = e^{+iH_0 t} e^{-iHt} \Omega_+ = e^{+iH_0 t} \Omega_+ e^{-iH_0 t}.$$

Másrészt $U(t, t_0)$ egyik fenti előállítása alapján

$$U(t, -\infty) = 1 - i \int_{-\infty}^{t} V(t') U(t', -\infty)\, dt'.$$

A két utolsó egyenlet összevetéséből

$$e^{iH_0 t} \Omega_+ e^{-iH_0 t} = 1 - i \int_{-\infty}^{t} e^{iH_0 t'} V e^{-iH_0 t'} e^{+iH_0 t'} \Omega_+ e^{-iH_0 t'} dt'.$$

Egyszerű transzformálás után kapjuk:

$$\Omega_+ = 1 - i \int_{-\infty}^{t} e^{-iH_0(t-t')} V \Omega_+ e^{iH_0(t-t')} dt'$$

A $t' - t \equiv \tau$ új integrációs változó bevezetése után

$$\Omega_+ = 1 - i \int_{-\infty}^{0} e^{-iH_0 \tau} V \Omega_+ e^{iH_0 \tau} d\tau.$$

Ez az egyszerű szerkezetű integrálegyenlet az Ω_+ meghatározására gyakorlatilag azért nem használható fel, mert az $\exp(\pm iH_0\tau)$ operátor szimbolikus írásmódja mögött kezelhetetlen, végtelen operátorhatványsor rejlik. Hasonlóan inkább elvi érdekességű a szórásoperátornak a fentiek alapján történő előállítása:

$$S' = U(+\infty, -\infty) = \lim_{t \to \infty} [e^{iH_0 t} \Omega_+ e^{-iH_0 t}].$$

A stacionér tárgyalás bevezetése

Az átmeneti valószínűségek számításához ismernünk kell az S' operátort, vagy közvetlenül annak S_{mn} mátrixelemeit. Az S' kiszámítása az előző módszerrel reménytelennek látszik. Az S_{mn} mátrixelem esetében azonban a végtelen operátorhatványsor problémája elesik, hiszen

$$S_{mn} = \langle \varphi_m | S' | \varphi_n \rangle$$

értelmében az exponenciális operátor a

$$\frac{1}{i} \frac{\partial \varphi_n}{\partial t} + H_0 \varphi_n = 0$$

állapotegyenlet φ_n megoldására hat; nevezetesen

$$e^{\pm iH_0 t} \varphi_n = e^{\mp t \frac{\partial}{\partial t}} \varphi_n$$

eredménnyel. Az operátor így az integrál alól eltüntethető. Mégsem jelent megoldást ez a módszer sem, mert hullámcsomag esetén $\partial \varphi_n / \partial t$ helyfüggése bonyolult és az S_{mn} integrál nem számítható. Ha pedig φ_n-en energiasajátfüggvényt értenénk, az nem volna négyzetesen integrálható, nem tartoznék a $\mathscr{H}$-térhez és eddigi meggondolásaink nem volnának rá érvényesek, hiszen eddig olyan hullámcsomagokkal dolgoz-

tunk, amelyek korlátos t időpontban a tér véges tartományára korlátozódó normált állapotfüggvények voltak.

Nincs-e áthidaló megoldás? Az energiasajátfüggvények bevezetését fizikai és matematikai szempontból még egyszer kritika alá vesszük. Kísérleti berendezéseink valóban hullámcsomaggal reprezentált bombázó részeket állítanak elő, de ezek a hullámcsomagok mégis közelítőleg jól definiált impulzussal rendelkeznek, és a hullámcsomag térbeli kiterjedése sok-sok nagyságrenddel nagyobb az atom (atommag) méreteinél. Tapasztalat az is, hogy a kísérletek eredménye nem függ a hullámcsomag alakjától; ha az impulzusszórás kicsi, azaz $\Delta p \ll \langle p \rangle$ és így a Δx helyhatározatlanság elég nagy. Ezért beszélünk mindig síkhullámról, mint a relatív mozgás állapotáról szóráskísérletekben. Ezek alkalmasan „normált" állapotfüggvénye koordinátareprezentációban

$$\varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}'\mathbf{r}},$$

impulzusreprezentációban

$$\varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}) = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}').$$

Az impulzussajátfüggvények nem-normálhatóak, hiszen normájuk

$$(\varphi_{\mathbf{p}}|\varphi_{\mathbf{p}'}) = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$$

és

$$\int \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})\varphi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{x}')\, d^3\mathbf{p} = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

értelmében egyik változóban sem korlátos. Hasonló viselkedést mutatnak a H teljes Hamilton-operátor $\mathscr{H}_c$-be eső sajátfüggvényei is. Az energiasajátfüggények sem normálhatóak, nem tekinthetők fizikai állapotfüggvényeknek és rájuk az aszimptotatétel és egyéb eredményeink nem vihetők át minden további nélkül. Az energiasajátfüggvények függvénytani szempontból a függvényfogalom egyik általánosításának, ún. disztribúciónak tekintendők. Az eljárásunk elve a továbbiakban az lesz, hogy stacionér felfogásban, azaz energiasajátfüggvényekkel, mint disztribúciókkal számolunk a disztribúcióelmélet törvényei szerint. Fizikai értelme a képleteknek ekkor még nincs. A végső eredményt úgy kapjuk, hogy egy, a hullámcsomag felépítését jellemző $c(\mathbf{p}')$ spektrálfüggvénnyel szorzunk és energiára vagy impulzusra integrálunk; ezzel normálható függvényekre, azaz fizikai állapotfüggvényekre vonatkozó megállapításokra jutunk a

$$\varphi_n(\mathbf{x}) = \int c(\mathbf{p}')\varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x})\, d^3\mathbf{p}'$$

hullámcsomag felépítése által megszabott módon.

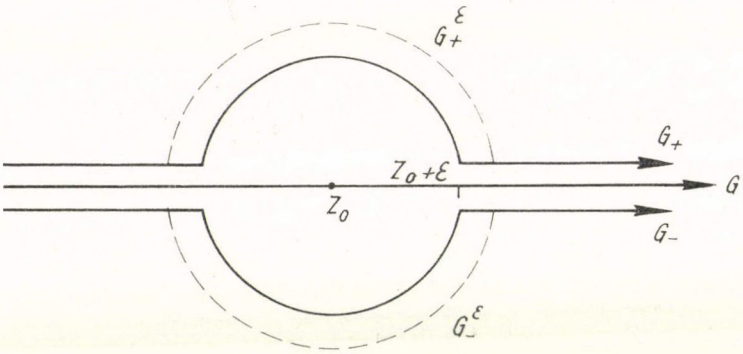
Disztribúcióelméleti segédtételek

A továbbiak folyamán több disztribúcióelméleti összefüggésre is szükségünk lesz; ezek levezetését most megadjuk.

Az első a komplex függvénytan határértéktétele; a fizikában való első alkalmazása Dirac (1947) nevéhez fűződik és szimbolikusan így írható fel:

$$\frac{1}{z \pm i\varepsilon} = \frac{P}{z} \mp i\pi\delta(z), \qquad \varepsilon \to +0.$$

Itt P a főértékképzés operátora. Az operátoregyenlet értelmet egy $f(z)$ függvénnyel való szorzás és a $z=(-\infty, +\infty)$ intervallumban való integrálás útján nyer. Levezetése a Cauchy-formulán alapszik és a következő gondolatmenettel adható meg.



6. ábra. Integrációs kontúrok a disztribúciós segédtételek levezetéséhez.

Legyen $f(z)$ analitikus függvény a $z=z_0$ pont ε-sugarú környezetében. (Lásd a 6. ábrát). A Cauchy-formula és a δ-disztribúció értelmezésének segítségével az $f(z_0)$ értéket megkaphatjuk az $f(z)$ függvény értékkészletéből $z=z_0$ körül. Nevezetesen

$$f(z_0) = \int_{\mathscr{G}} f(z)\,\delta(z-z_0)\,dz = \frac{1}{2\pi i}\oint_{\varepsilon} \frac{f(z)\,dz}{z-z_0} =$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\left[\int_{\mathscr{G}_-} - \int_{\mathscr{G}_+}\right] \frac{f(z)\,dz}{z-z_0}\,.$$

Ismét áttérhetünk a $\mathscr{G}$ egyenes-menti integrálásra, hiszen $f(z)$ analitikus és a nevezőben jelöljük az integrandus megváltozását.

$$f(z_0) = \lim_{\varepsilon=+0} \frac{1}{2\pi i}\int_{\mathscr{G}} \left[\frac{1}{z-z_0-i\varepsilon} - \frac{1}{z-z_0+i\varepsilon}\right] f(z)\,dz =$$

$$= \lim_{\varepsilon=+0} \frac{1}{2\pi i}\int_{\mathscr{G}} \frac{2i\varepsilon f(z)\,dz}{(z-z_0)^2+\varepsilon^2}\,.$$

Eszerint mellékeredményként megkaptuk a δ-disztribúció egy előállítását:

$$\delta(z-z_0) = \lim_{\varepsilon=+0} \frac{1}{\pi}\,\frac{\varepsilon}{(z-z_0)^2+\varepsilon^2}\,.$$

Vezessük most be a következő jelöléseket:

$$\delta_\pm(z-z_0) \equiv \mp\frac{1}{2\pi i}\lim_{\varepsilon=+0}\frac{1}{(z-z_0)\pm i\varepsilon}; \qquad \delta(z) = \delta_+(z)+\delta_-(z).$$

Eszerint, azonos átalakítás után kapjuk:

$$\delta_+(z) = -\frac{1}{2\pi i}\lim_{\varepsilon=+0}\frac{1}{z+i\varepsilon} = \lim_{\varepsilon=+0}\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty e^{i\omega(z+i\varepsilon)}\,d\omega,$$

$$\delta_-(z) = +\frac{1}{2\pi i}\lim_{\varepsilon=+0}\frac{1}{z-i\varepsilon} = \lim_{\varepsilon=+0}\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty e^{i\omega(z-i\varepsilon)}\,d\omega,$$

ahonnan

$$\delta(z) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega z-\varepsilon|\omega|}\,d\omega, \qquad \varepsilon>0,$$

a δ-disztribúció egyik integrálelőállítása.

A disztribúciós egyenletekben az $\varepsilon\to 0$ határátmenet közvetlen elvégzése határozatlan kifejezésekre vezetne. Az ε-mennyiséget tartalmazó disztribúciókkal úgy dolgozunk, hogy először *véges* $\varepsilon>0$ érték mellett számolunk: azaz megszorozzuk a disztribúciót a feladat szerinti szorzójával és integrálunk. Véges $\varepsilon>0$ mellett ezek a műveletek matematikailag egyértelműek, de fizikai jelentése a kapott eredménynek nincs. Fizikailag értelmes végeredményt az integrálás *után* elvégzett $\varepsilon\to 0$ határátmenettel kapunk. Ebben a stádiumban a határátmenet már matematikailag is egyértelmű eredményre vezet.

A bebizonyítandó határértéktételünkben szereplő másik kifejezést, a

$$P\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(z)\,dz}{z-z_0} \equiv \lim_{\varepsilon=0}\left[\int_{-\infty}^{z_0-\varepsilon} + \int_{z_0+\varepsilon}^{\infty}\right]\frac{f(z)\,dz}{z-z_0}$$

integrál-főértéket is disztribúciós alakban állítjuk elő:

$$P\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(z)\,dz}{z-z_0} = \lim_{\varepsilon=0}\frac{1}{2}\left[\int_{\mathcal{G}_+} + \int_{\mathcal{G}_-} - \frac{1}{2}\int_{\mathcal{G}_+^\varepsilon} + \frac{1}{2}\int_{\mathcal{G}_-^\varepsilon}\right]\frac{f(z)\,dz}{z-z_0}.$$

A Cauchy-formula felhasználásával tudunk tovább jutni:

$$\int_{\mathcal{G}_+^\varepsilon}\frac{f(z)\,dz}{z-z_0} = f(z_0)\int_0^\pi\frac{ire^{i\varphi}\,d\varphi}{re^{i\varphi}} = if(z_0),$$

$$\int_{\mathcal{G}_-^\varepsilon}\frac{f(z)\,dz}{z-z_0} = f(z_0)\int_{-\pi}^0\frac{ire^{i\varphi}\,d\varphi}{re^{i\varphi}} = -i\pi f(z_0).$$

Így a főértékre nézve kapjuk az új $\mathscr{G}$ integrációs út bevezetésével:

$$P\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(z)\,dz}{z-z_0}=\frac{1}{2}\int_{\mathscr{G}}\frac{f(z)\,dz}{z-z_0+i\varepsilon}+\frac{1}{2}\int_{\mathscr{G}}\frac{f(z)\,dz}{z-z_0-i\varepsilon},\qquad \varepsilon>0.$$

A δ-disztribúció és a főértékoperátor összevethető kifejezései:

$$\delta(z-z_0)=\delta_+(z-z_0)+\delta_-(z-z_0)=-\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{z-z_0+i\varepsilon}+\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{z-z_0-i\varepsilon},$$

$$\frac{1}{2\pi}\frac{P}{z-z_0}=-\delta_+(z-z_0)+\delta_-(z-z_0)=+\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{z-z_0+i\varepsilon}+\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{z-z_0-i\varepsilon}.$$

Az innen kapott

$$\delta_\pm(z)=\mp\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{z-z_0\pm i\varepsilon}=\pm\frac{i}{2\pi}\frac{P}{z-z_0}+\frac{1}{2}\delta(z-z_0)$$

egyenletpár már azonos a bevezetendő szimbolikus operátoregyenlettel, amelyet most nem-disztribúciós alakban is felírunk:

$$\lim_{\varepsilon=+0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(z)\,dz}{z-z_0\pm i\varepsilon}=\mp i\pi f(z_0)+P\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(z)\,dz}{z-z_0}.$$

A másik disztribúcióelméleti tétel-párunk, amelyre szükségünk lesz:

$$\lim_{\varepsilon=+0}\lim_{t=+\infty}\frac{e^{i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}=0,$$

$$\lim_{\varepsilon=+0}\lim_{t=-\infty}\frac{e^{i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}=\delta(\omega).$$

Maga a tétel is igen meglepő, hiszen a két kifejezés abszolút értéke minden véges t-re megegyezik egymással. Látható, hogy a fellépő oszcilláció miatt, közönséges értelemben vett határértéke $t\to\pm\infty$-re egyik kifejezésnek sincs, sem véges, sem infinitezimális ε mellett.

A levezetéshez segítségül vesszük a következő definíciót:

$$\lim_{t\to\infty}g(t)\equiv\lim_{\varepsilon=+0}\left[\varepsilon\int_0^\infty e^{-\varepsilon t'}g(t')\,dt'\right].$$

Ez a reláció, mint alább igazoljuk, egyszerű azonosságot jelent, ha az egyenlet bal oldalán álló határérték létezik. Az előállítás jelentősége abban áll, hogy értelmet ad a baloldali határértéknek abban az esetben is, ha a $g(t)$ függvény vagy korlátos a végtelenben, de nincs határértéke, pl. oszcillál, vagy legfeljebb exponenciálisan divergál. Más szóval, a jobboldali kifejezés reprodukálja a $g(t)$ függvény határértékét, ha az létezik, és definiálja, ha az nem létezik. Bizonyítása: parciális integ-

rálással kapjuk a jobboldalra vonatkozóan:

$$\varepsilon \int_0^\infty e^{-\varepsilon t} g(t)\, dt = [e^{-\varepsilon t} g(t)]_0^\infty + \int_0^\infty e^{-\varepsilon t} g'(t)\, dt = g(0) + \int_0^\infty e^{-\varepsilon t} g'(t)\, dt,$$

minden véges ε-ra. Ha most speciálisan az $\varepsilon \to 0$ határesetet nézzük, úgy

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left[\varepsilon \int_0^\infty e^{-\varepsilon t} g(t)\, dt\right] = g(0) - g(0) + g(\infty) = g(\infty),$$

ha a $g(t \to \infty)$ határérték létezik. Utolsó egyenletünk baloldala azonban e határérték lététől függetlenül, az exponenciálisan levágó szelídítőfaktor hatására, egyértelmű. Ezt a számot fogjuk érteni ezután a $\lim\limits_{t \to \infty} g(t)$ határértéken. Ez az eljárás pl. az e^{ikr} $(k \neq 0)$ kifejezés $r \to \infty$ határértékéül zérust definiál, mert

$$\lim_{r \to \infty} e^{ikr} \equiv \lim_{\varepsilon = 0} \left[\varepsilon \int_0^\infty e^{ikr} e^{-\varepsilon r}\, dr\right] = 0.$$

A végtelenbeli határérték fenti definíciója mellett igazolhatjuk tételeinket:

$$\lim_{\varepsilon = 0} \lim_{t = \infty} \left[-\frac{1}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\varepsilon}\right] = \lim_{\varepsilon = 0} \frac{-\varepsilon}{2\pi i} \frac{1}{\omega + i\varepsilon} = \int_0^\infty e^{-i(\omega - i\varepsilon)t}\, dt =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon = 0} \frac{\varepsilon}{\omega^2 + \varepsilon^2} = \delta(\omega).$$

Ezzel szemben:

$$\lim_{\varepsilon = 0} \lim_{t = \infty} \left[-\frac{1}{2\pi i} \frac{e^{i\omega t}}{\omega + i\varepsilon}\right] = \lim_{\varepsilon = 0} \frac{-\varepsilon}{2\pi i} \frac{1}{\omega + i\varepsilon} \int_0^\infty e^{i(\omega + i\varepsilon)t}\, dt = 0.$$

Hasonló eljárással további relációkat kaphatunk:

$$\lim_{\varepsilon = 0} \lim_{t = \infty} \frac{1}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - i\varepsilon} = 0,$$

$$\lim_{\varepsilon = 0} \lim_{t = \infty} \frac{1}{2\pi i} \frac{e^{+i\omega t}}{\omega - i\varepsilon} = \delta(\omega),$$

ha a $t \to \infty$ határértéket a fenti integrállal definiáljuk. A levezetett összefüggések lehetővé teszik, hogy a disztribúciókkal (síkhullámokkal) úgy számoljunk, mint a Hilbert-tér elemeivel, a négyzetesen integrálható függvényekkel (hullámcsomagokkal) számolunk. A fenti egyenlőségek alkalmazásakor a disztribúciók ε-t tartalmazó kifejezésekbe mennek át. Véges $\varepsilon > 0$-val számolva a felírt kifejezések matematikailag léteznek. De reális fizikai értelmet csak ezt követően, a hullámcsomagot jellemző spektrálfüggvénnyel való szorzás, energiaintegrálás és ezt követően $\varepsilon \to 0$ határátmenet útján kapunk.

A tranzitoperátor

Eddigi fogalmainkat most disztribúciókra vonatkozóan újra felírjuk. Így az in- és out-állapotokat a $|\mathbf{p}\rangle$ síkhullám kezdő- ill. végállapotból így kapjuk: (l. a 2. ábrát)

$$|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = \Omega_+ |\mathbf{p}\rangle,$$

$$|\mathbf{p}_{\text{out}}\rangle = \Omega_- |\mathbf{p}\rangle,$$

ahol

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{pr}}.$$

Kimutatjuk, a hullámoperátorokkal a síkhullámból generált in- és out-állapotok most is sajátfüggvényei a Hamilton-operátornak. Ugyanis

$$H|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = H\Omega_+ |\mathbf{p}\rangle = \Omega_+ H_0 |\mathbf{p}\rangle = \Omega_+ \frac{p^2}{2m} |\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle,$$

amivel állításunkat igazoltuk és sajátérték gyanánt $E = p^2/2m$-et kaptunk.

További ismert mennyiségek, a hullámoperátor és a szórásoperátor mátrixelemei most mind disztribúciók lesznek. Így az Ω_+ operátor mátrixeleme impulzus- ill. koordinátareprezentációban

$$\langle \mathbf{p}|\Omega_+|\mathbf{p}'\rangle = \langle \mathbf{p}|\mathbf{p}'_{\text{in}}\rangle$$

és

$$\langle \mathbf{r}|\Omega_+|\mathbf{p}'\rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}'_{\text{in}}\rangle.$$

A szórási mátrixelem disztribúciók között képezve

$$S(\mathbf{p} \to \mathbf{p}') = \langle \mathbf{p}'_{\text{out}}|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = \langle \mathbf{p}'_{\text{in}}|S|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = \langle \mathbf{p}'|S'|\mathbf{p}\rangle.$$

Az itt szereplő függvények mind disztribúciók, de dolgozhatunk velük annak tudatában, hogy megfelelő spektrálfüggvénnyel szorozva és integrálva, hullámcsomagok leírására jutunk, fizikai és egyértelmű matematikai jelentéssel.

Definiáljuk a T tranzitoperátort. Potenciálszórás esetében legyen

$$T \equiv V\Omega_+.$$

A tranzitoperátorban szereplő Ω_+ operátor egy disztribúcióelméleti $e^{-\varepsilon t}$ szelídítőfaktor beépítésével így írható:

$$\Omega_+ = 1 - i \int_0^\infty e^{+iH_0 t} V\Omega_+ e^{-iH_0 t} e^{-\varepsilon t} dt.$$

Ezt hullámcsomagokra alkalmazva $\varepsilon > 0$, $\varepsilon = 0$ esetén egyaránt matematikailag létező kifejezéseket nyerünk. Síkhullámokra alkalmazva $\varepsilon > 0$ esetén adódik egyértelmű kifejezés, mert ekkor disztribúciókkal állunk szemben. Mivel tudjuk, hogy síkhullámokból hullámcsomagokat felépítve egyértelmű eredményt kell kapnunk, ez a „megszelídítés" az egyértelműséget nem ronthatja el. A mátrixelem képzésénél a H_0 hermiticitását és $|\mathbf{p}\rangle$, $|\mathbf{p}'\rangle$ sajátfüggvény-jellegét figyelembe véve

kapjuk:

$$\langle \mathbf{p}' | \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle - i \int_{-\infty}^{0} e^{iE't} \langle \mathbf{p}' | V\Omega_+ | \mathbf{p} \rangle e^{iEt} e^{-\varepsilon t} \, dt =$$

$$= \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \frac{\langle \mathbf{p}' | V\Omega_+ | \mathbf{p} \rangle}{E' - E - i\varepsilon} =$$

$$= \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \frac{\langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle}{E' - E - i\varepsilon} .$$

Egyenletünk összekapcsolja az Ω_+ és a T operátorok mátrixelemeit. Hasonló jellegű kapcsolatot létesíthetünk az S és T operátorok mátrixelemei között:

$$S = U(+\infty, -\infty);$$

$$\langle \mathbf{p}' | S | \mathbf{p} \rangle = \lim_{t \to \infty} e^{iE't} \langle \mathbf{p}' | \Omega_+ | p \rangle e^{-iEt} =$$

$$= \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \langle \mathbf{p}' | T | p \rangle \lim_{t = \infty} \frac{e^{i(E'-E)t}}{E' - E + i\varepsilon} ,$$

$$\langle \mathbf{p}' | S | \mathbf{p} \rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - 2\pi i \langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle \delta(E - E').$$

Eszerint a tranzitoperátor értéke az energiahéjon meghatározza a szórásoperátort.

A Lippmann—Schwinger egyenlet

Kapcsolatot akarunk létesíteni integrálegyenlet formájában a $|\mathbf{p}\rangle$ és a $|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle$ disztribúciók között, azaz a beeső síkhullám és a belőle kifejlődő fizikai állapotfüggvény között. A kapcsolat természetesen az Ω_+ operátor levezetett reprezentációján alapszik. Így

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle = \langle \mathbf{r} | \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle = \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \Omega_+ | \mathbf{p} \rangle \, d^3\mathbf{k},$$

ahol egy $\mathbf{k}$-térbeli teljes függvényrendszert építettünk be a

$$\sum |\mathbf{k}\rangle\langle \mathbf{k}| = 1$$

azonosság alapján. Az Ω_+ és a T operátorok mátrixelemeinek kapcsolata értelmében

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle = \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \left[\langle \mathbf{k} | \mathbf{p} \rangle - \frac{\langle \mathbf{k} | T | \mathbf{p} \rangle}{E_k - E_p - i\varepsilon} \right] d^3\mathbf{k} =$$

$$= \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle - \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \frac{1}{E_k - E_p - i\varepsilon} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle \langle r' | T | p \rangle \, d^3\mathbf{k} \, d^3\mathbf{r}',$$

ahol most egy $\mathbf{r}$-térbeli teljességi összefüggést vezettünk be: $\int |\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}| d^3\mathbf{r} = 1$. Most definiáljuk a szabadmozgás kifutójellegű Green-függvényét, mint egy $\mathscr{G}_0^+$ operátor koordinátareprezentációját:

$$\langle \mathbf{r} | \mathscr{G}_+^0 | \mathbf{r}' \rangle \equiv \int \langle \mathbf{r}' | \mathbf{k} \rangle \frac{1}{E_p - E_k - i\varepsilon} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle \, d^3\mathbf{k}.$$

Segítségével a $|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle$ állapot a koordinátatérben

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle - \int \langle \mathbf{r}|\,\mathcal{G}^0_+\,|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|\,T\,|\mathbf{p}\rangle\, d^3\mathbf{r}'.$$

Most már csak a T operátor mátrixelemét kell kifejezni a V kölcsönhatási operátor segítségével a $T = V\Omega_+$ reláció révén:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}'|\,T\,|\mathbf{p}\rangle &= \langle \mathbf{r}'|\,V\Omega_+\,|\mathbf{p}\rangle = \int \langle \mathbf{r}'|\,V\,|\mathbf{r}''\rangle\langle \mathbf{r}''|\,\Omega_+\,|\mathbf{p}\rangle\, d^3\mathbf{r}'' \\ &= \int \langle \mathbf{r}'|\,V\,|\mathbf{r}''\rangle\langle \mathbf{r}''|\,\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle\, d^3\mathbf{r}'' = \\ &= \int V(\mathbf{r}')\,\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\,\langle \mathbf{r}''|\,\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle\, d^3\mathbf{r}'' = \\ &= V(\mathbf{r}')\,\langle \mathbf{r}'|\,\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle.\end{aligned}$$

Hullámfüggvény-jelöléssel a síkhullámból kifejlődő állapot integrálegyenlete

$$\psi_{\mathbf{p}_{\text{in}}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) + \int \mathcal{G}^0_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)\, V(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{p}_{\text{in}}}(\mathbf{r}')\, d^3\mathbf{r}'.$$

Ez a Lippmann—Schwinger-egyenlet (1950). Kiszámíthatjuk a szabadmozgás Green-függvényének explicit alakját is:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^0_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p) &= \int \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}\,\frac{1}{\dfrac{p^2}{2m} - \dfrac{k^2}{2m} + i\varepsilon}\,\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}}\, d^3\mathbf{k} = \\ &= \frac{2m}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\, d^3\mathbf{k}}{p^2 - k^2 - 2mi\varepsilon}.\end{aligned}$$

Ismert eljárás szerint ebből megkaphatjuk a szabadmozgás Green-függvényének végleges kifejezését:

$$\mathcal{G}^0_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p) = -\frac{m}{2\pi}\,\frac{e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Bevezetve a Green-függvény explicit alakját, a dinamika integrálegyenletének végleges alakját nyerjük:

$$\langle \mathbf{r}|\,\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = \langle \mathbf{r}|\,\mathbf{p}\rangle - \frac{m}{2\pi}\int \frac{e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\, V\langle \mathbf{r}'|\,\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle\, d^3\mathbf{r}'.$$

A szabad Green-függvény explicit alakjából a hullámfüggvény aszimptotikáját vezethetjük le abban az esetben, ha a kölcsönhatás véges hatótávolságú. Ekkor $r \to \infty$, $r' \ll r$ mellett

$$\begin{aligned}p|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| &= p[r^2 - r'^2 - 2rr'\cos(\mathbf{r}\mathbf{r}')]^{1/2} = \\ &= pr\left[1 - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r^2} + \ldots\right] = \\ &\sim pr - \mathbf{p}'\mathbf{r}', \quad \text{ahol} \quad \mathbf{p}' \equiv \frac{p}{r}\,\mathbf{r}\end{aligned}$$

a szórócentrumtól az $\mathbf{r}$ megfigyelési pont felé mutató, p nagyságú impulzusvektor, tehát a szórt és detektált részecske impulzusa. Az in-állapot aszimptotikája nagy távolságban, koordinátareprezentációban

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{pr}} - \frac{m}{2\pi} \int \frac{e^{ipr}}{r} e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}'} \langle \mathbf{r}' | T | \mathbf{p} \rangle \, d^3\mathbf{r}',$$

vagy bevezetve a T operátor impulzusreprezentációját:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{pr}} - 4\pi^2 m \frac{e^{ipr}}{r} \langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle.$$

A teljes hullámkép eszerint a beeső síkhullámból és olyan szórt hullámból áll, amely aszimptotikusan, legalábbis véges hatótávolságú erőcentrumon való szóródás esetén, tiszta kifutó gömbhullám. A szórt hullámban az e^{ipr}/r gömbhullám $f(\theta)$ együtthatóját a H probléma szórási amplitúdójának nevezzük; ez arányos a T tranzitoperátor impulzus-reprezentációbeli mátrixelemével

$$f(\theta) = -4\pi^2 m \langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle.$$

A hullámfüggvény aszimptotikája a szórási amplitúdóval kifejezve

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_{\text{in}} \rangle \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{pr}} + f(\theta) \frac{e^{ipr}}{r}.$$

A $\sigma(\theta)$ differenciális hatáskeresztmetszet, definíciója szerint, adott szórócentrumra vonatkozóan a centrumra illeszkedő egységnyi térszögbe szórt részek számának aránya az egységnyi felületen át beeső részekéhez. A hullámfüggvény aszimptotikus alakjából a fluxusok hányadosa meghatározható; az eredmény

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = 16\pi^4 m^2 |\langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle|^2.$$

A tranzitoperátor explicit kifejezése

A Lippmann—Schwinger egyenlet

$$|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \mathcal{G}^0_+ V |\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle$$

koordinátareprezentációban

$$\psi_{\mathbf{p}_{\text{in}}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) + \int \mathcal{G}^0_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p) V(r') \psi_{\mathbf{p}_{\text{in}}}(\mathbf{r}') \, d^3\mathbf{r}'.$$

A $\mathcal{G}^0_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p)$ szabad Green-függvényt tekintsük most egy operátor magjának és keressük ezt az operátort. A Green-függvény ekkor az operátor koordináta-reprezentációbeli mátrixeleme:

$$\langle \mathbf{r} | \mathcal{G}^0_+ | \mathbf{r}' \rangle = \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \frac{1}{E - \dfrac{k^2}{2m} + i\varepsilon} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle \, d^3\mathbf{k}.$$

A szabad Green-operátor impulzusreprezentációban tehát

$$\langle \mathbf{k} | \mathscr{G}_+^0 | \mathbf{k}' \rangle = \frac{\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}{E - \frac{k^2}{2m} + i\varepsilon}.$$

Megegyezésben maradunk a fenti mátrixelemekkel, ha a szabad Green-operátor gyanánt a

$$\mathscr{G}_+^0(E) \equiv \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}$$

operátort tekintjük, hiszen ennek magfüggvénye

$$\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \mathscr{G}_+^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', p)$$

visszaadja a Green-függvényt. Az új felfogásban a Lippmann—Schwinger egyenlet

$$|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}\, V |\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle$$

alakú.

A Lippmann—Schwinger-egyenlet formális megoldása

A hullámoperátorokra vonatkozó integrálegyenletet a Lippmann—Schwinger-egyenletből $|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle = \Omega_+ \mathbf{p}_-$ behelyettesítéssel azonnal megkapjuk:

$$\Omega_+ = 1 + \mathscr{G}_0^+ V \Omega_+.$$

Megoldása Ω_+-ra iterációval adódik

$$\Omega_+ = \sum_{n=0}^{\infty} (\mathscr{G}_+^0 V)^n.$$

Innen a tranzitoperátor explicit kifejezés:

$$T \equiv V\Omega_+ = V \sum_{n=0}^{\infty} (\mathscr{G}_+^0 V)^n.$$

A tranzitoperátor kielégíti a következő integrálegyenletet:

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}\, T.$$

Impulzusreprezentációban, jobb oldalon a $T \equiv V\Omega_+$, $|\mathbf{k}_{\text{in}}\rangle \equiv \Omega_+ |\mathbf{k}\rangle$ azonosság figyelembevételével:

$$\langle \mathbf{p}' | T | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{p}' | V | \mathbf{p} \rangle + \int \frac{\langle \mathbf{p}' | V | \mathbf{k}_{\text{in}} \rangle}{E - \frac{k^2}{2m} + i\varepsilon}\, d^3\mathbf{k}.$$

A T-re vonatkozó integrálegyenletet megoldhatjuk, ha a Lippmann—Schwinger-egyenletet a szabad Green-operátor inverzével balról megszorozzuk:

$$(E-H_0+i\varepsilon)|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle=(E-H_0+i\varepsilon)|\mathbf{p}\rangle+V|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle.$$

Átrendezés után

$$(E-H+i\varepsilon)|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle=(E-H+i\varepsilon)|\mathbf{p}\rangle+V|\mathbf{p}\rangle.$$

Most balról szorzunk a H-probléma kifutójellegű Green-operátorával, a teljes Green-operátorral:

$$|\mathbf{p}_{\text{in}}\rangle=|\mathbf{p}\rangle+\mathscr{G}_+V|\mathbf{p}\rangle,$$

ahol a teljes kifutó Green-operátor

$$\mathscr{G}_+\equiv\frac{1}{E-H+i\varepsilon}.$$

Az Ω_+ és a T operátorok explicit kifejezése a V potenciállal eszerint (Chew és Goldberger, 1952)

$$\Omega_+=1+\frac{1}{E-H+i\varepsilon}V,$$

$$T=V+V\frac{1}{E-H+i\varepsilon}V.$$

A hullámoperátor, ill. a tranzitoperátor ezen előállítását nevezzük a Lippmann—Schwinger-egyenlet formális megoldásának.