

Elementi della teoria della diffusione

Per ottenere informazioni sulla struttura della materia, dai nuclei ai solidi, si studia la diffusione (scattering) di particelle: elettroni, particelle alfa, protoni, neutroni, fotoni, ecc.. Dallo studio della diffusione di particelle alfa, emesse da sostanze radioattive, su un bersaglio di oro Rutherford fu in grado di scartare il modello atomico di Thompson (nucleo costituito da una distribuzione estesa di carica positiva \mathbf{Ze} contenente all'interno \mathbf{Z} elettroni puntiformi) e di proporre il cosiddetto modello planetario dell'atomo in cui la carica positiva è concentrata all'origine e gli elettroni ruotano intorno.

Uno studio rigoroso dovrebbe considerare il pacchetto d'onda, descrivente la particella incidente, di dimensioni finite e grandi rispetto alle dimensioni della zona in cui gli effetti dell'interazione con il bersaglio sono rilevanti, ma piccole rispetto alle altre dimensioni spaziali (es. la distanza tra bersaglio e rivelatore). Per semplicità studiamo la diffusione considerando gli autostati dell'equazione di Schrödinger per il **potenziale centrale** $V(r)$, limitandoci solo a qualche osservazione sulla trattazione in termini di pacchetti d'onda. Consideriamo solo la diffusione da potenziale centrale $V(r)$ con la condizione all'infinito

$$V(r)_{r \rightarrow \infty} \longrightarrow r^{-1-\varepsilon} \quad \varepsilon > 0 \quad (1)$$

Inoltre richiediamo che l'eventuale singolarità di $V(r)$ all'origine sia del tipo

$$V(r)_{r \rightarrow 0} \longrightarrow r^{-2+\varepsilon} \quad \varepsilon > 0 \quad (2)$$

Abbiamo già visto nello studio degli stati legati dell'atomo di idrogeno come un processo di interazione a due corpi, quindi descritto da un potenziale $V|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ dove \vec{r}_i denota la posizione della i -ma particella di massa m_i ($i = 1, 2$) può essere ricondotto allo studio di una particella di massa ridotta m

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (3)$$

in presenza di un potenziale centrale $V(r)$ con $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

1 Sezione d'urto di diffusione

La **sezione d'urto differenziale** (denotata con $d\sigma/d\Omega \equiv \sigma(\Omega) \equiv \sigma(\theta, \phi)$) è definita come il numero di particelle diffuse, per unità di tempo, nell'elemento di angolo solido $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ nella direzione (θ, ϕ) diviso per il numero di particelle incidenti, per unità di tempo, (N_{in}) per cm^2

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN(\Omega)}{N_{in}d\Omega} \quad (4)$$

dove $dN(\Omega)$ indica il numero di particelle diffuse nell'elemento di angolo solido $d\Omega$.

La **sezione d'urto totale** si ottiene integrando la **sezione d'urto differenziale** su tutto l'angolo solido

$$\sigma_{tot} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sigma(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi \quad (5)$$

La sezione d'urto ha le dimensioni di una superficie e l'unità di misura usata è il **barn**

$$1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2 \quad (6)$$

La sezione d'urto differenziale dipende dal sistema di riferimento in cui si considera il processo di diffusione. Di solito si usano il sistema del laboratorio, $\sigma_{LAB}(\Omega)$, in cui la particella bersaglio è supposta inizialmente ferma. ed il sistema del centro massa, $\sigma_{CM}(\Omega')$, in cui la quantità di moto totale è nulla. La relazione tra le due sezioni d'urto è data da

$$\sigma_{LAB}(\Omega) = \sigma_{CM}(\Omega') \frac{d\Omega'}{d\Omega} \quad (7)$$

$$\frac{d\Omega'}{d\Omega} = \left[\frac{1 + \tau \cos \theta}{(1 + 2\tau \cos \theta + \tau^2)^{3/2}} \right]^{-1} \quad \tau = \frac{m_1}{m_2} \quad (8)$$

Si assume che le seguenti condizioni sono soddisfatte:

1. Le particelle del fascio non interagiscono tra di loro (fasci non intensi).
2. Nella definizione della sezione d'urto abbiamo implicitamente fatto l'ipotesi che una particella incidente sia diffusa da un solo centro diffusore. Questo richiede che la distanza tra i centri diffusori sia maggiore del raggio in cui gli effetti del centro diffusore sulle particelle incidenti sono sensibili e che il bersaglio sia sottile, in modo che la diffusione multipla sia trascurabile.
3. Consideriamo urti elastici che implica conservazione dell'energia cinetica della particella incidente, quindi la collisione non eccita livelli interni nel bersaglio. Comunque il concetto di sezione d'urto non è limitato al caso di urti elastici.
4. La sorgente del fascio incidente ed i rivelatori siano poste a distanza tali che le particelle possono essere considerate libere al momento dell'emissione e della rivelazione.
5. Le particelle incidenti e le particelle del bersaglio non hanno spin. Questa ipotesi semplifica la trattazione, ma non implica che lo spin non sia importante nei processi di diffusione.
6. Gli effetti di coerenza tra le onde delle differenti particelle diffuse sono trascurabili, quindi non consideriamo tutta una classe di fenomeni importanti, quali, per esempio, la diffusione di raggi X da cristalli (diffrazione di Bragg).

2 Onde di diffusione stazionarie

Consideriamo una particella incidente di massa (ridotta) m , energia cinetica $E > 0$ ed impulso $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. La sezione d'urto differenziale può essere calcolata in funzione delle soluzioni $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dell'equazione stazionaria di Schrödinger

$$H \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) \right] \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (9)$$

il cui comportamento all'infinito all'infinito è della forma

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \sim e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f_k(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (10)$$

Non cercheremo di dimostrare la forma dell'eq.(10), che chiameremo **onda stazionaria di diffusione**, ma daremo solo degli argomenti di plausibilità per la forma scelta. Per giustificare l'eq.(10), notiamo che:

- si ha (Δ denota il laplaciano) ($r \neq 0$)

$$[\Delta + k^2] \frac{e^{ikr}}{r} = 0 \quad (11)$$

Siccome la diffusione è in generale anisotropa moltiplichiamo il termine e^{ikr}/r per una funzione dell'angolo $f_k(\Omega) = f_k(\theta, \phi)$. L'eq.(11) diventa

$$[\Delta + k^2] f_k(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} = 0 + O(1/r^3) \quad (12)$$

Ricordiamo che in coordinate sferiche il laplaciano si scrive

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (13)$$

- per l'ipotesi fatta sull'andamento del potenziale all'infinito, l'eq.(9), per r molto grande, si scrive

$$[\Delta + k^2] \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = 0 \quad (14)$$

Quindi l'espressione scritta nell'eq.(10) soddisfa asintoticamente l'eq.(9).

Nell'eq.(10) appaiono due termini: il primo può essere interpretato come l'onda piana incidente ed il secondo rappresenta un'onda sferica di densità $|f_k(\Omega)|^2/r^2$ avente origine all'origine. Dalla definizione generale di corrente di Schrödinger (Im denota la parte immaginaria)

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{i2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{m} Im(\psi^* \nabla \psi) \quad (15)$$

la corrente incidente j_{in} è data da, sostituendo nella definizione eq.(15) il primo termine dell'eq.(10),

$$\begin{aligned} \vec{j}_{in} &= \frac{\hbar}{i2m} (\Psi_0^* \nabla \Psi_0 - \Psi_0 \nabla \Psi_0^*) \\ &= \frac{\hbar}{i2m} (e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}) \\ &= \frac{\hbar \vec{k}}{m} \end{aligned} \quad (16)$$

dove Ψ_0 è la soluzione dell'equazione di Schrödinger libera ed è interpretabile come un fascio di particelle incidente di impulso $\hbar \vec{k}$ e di densità 1.

NOTA - Abbiamo usato

$$\psi_0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (17)$$

ma in effetti Ψ_0 andrebbe rappresentata da un pacchetto d'onda normalizzato

$$\Psi_0(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k' e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} a(\vec{k}') \quad (18)$$

con $a(\vec{k}')$ centrata intorno al valore $\vec{k}' = \vec{k}$.

La densità di corrente dell'onda diffusa j_r nella direzione $\vec{e}_{\vec{r}}$, che si calcola inserendo nella definizione eq.(15) il secondo termine dell'eq.(10), è

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\frac{f_k^*}{r} e^{-ikr} \frac{\partial}{\partial r} \frac{f_k}{r} e^{ikr} \right) \\ &= \frac{\hbar k}{m} \frac{|f_k(\Omega)|^2}{r^2} \end{aligned} \quad (19)$$

ed è interpretabile come il fascio di particelle diffuse radialmente. In accordo con questa interpretazione, esprimendo la sezione d'urto differenziale in termini della **densità di corrente** di Schrödinger si ha, essendo il numero di particelle incidenti per unità di tempo (flusso incidente)

$$N_{in} = j_{in} \cdot e_{\vec{k}} \quad (20)$$

ed il numero di particelle rilevate nell'unità di tempo nella superficie infinitesima $dS = r^2 d\Omega$ nella direzione Ω

$$dN(\Omega) = j_r r^2 d\Omega \quad (21)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma(\Omega) = |f_k(\Omega)|^2 \quad (22)$$

$f(\Omega)$ è chiamata **ampiezza di diffusione**.

Calcolando la corrente della funzione d'onda eq.(10), oltre a i due termini j_{in} e j_r , appare un termine di *interferenza* tra il 1 ($e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$) ed il 2 termine ($f_k(\Omega) e^{ikr}/r$). Abbiamo trascurato questo termine perchè nella trattazione con il pacchetto d'onda le espressioni corrispondenti al pacchetto incidente ed al pacchetto diffuso rilevato sono non nulle in regioni spaziali diverse, se consideriamo i rivelatori posti in una direzione con $\theta > 0$.

Sebbene il secondo termine dell'eq.(10) dipenda anche da (θ, ϕ) , non abbiamo preso in conto le componenti della corrente nelle direzioni \vec{e}_θ e \vec{e}_ϕ perchè sono trascurabili rispetto a j_r , nel limite $r \rightarrow \infty$. Infatti si ha, essendo

$$(\nabla)_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (\nabla)_\phi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} j_\theta &= \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^3} \text{Im} \left(f_k^*(\theta, \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} f_k(\theta, \phi) \right) \\ j_\phi &= \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^3 \sin \theta} \text{Im} \left(f_k^*(\theta, \phi) \frac{\partial}{\partial \phi} f_k(\theta, \phi) \right) \end{aligned} \quad (24)$$

3 Decomposizione in onde parziali

Nel seguito supponiamo che il fascio incidente sia diretto lungo l'asse z , quindi $\vec{k} \cdot \vec{r} = kr \cos \theta$. Con questa ipotesi, essendo il potenziale centrale, il problema della diffusione diventa un problema a simmetria cilindrica (lungo l'asse z) e quindi possiamo eliminare la dipendenza dall'angolo ϕ . Quindi l'ampiezza di diffusione dipende solo dall'angolo θ e da k . Nel seguito non scriviamo esplicitamente la dipendenza da k o da \vec{k} in quanto consideriamo processi di diffusione ad energia fissata. Per la completezza dei polinomi di Legendre si ha

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos \theta) \quad (25)$$

Utilizzando lo sviluppo di un'onda piana in armoniche sferiche, che, per la configurazione scelta, è uno sviluppo in termini dei polinomi di Legendre, vedi Appendice A,

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = e^{ikr \cos \theta} = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (26)$$

l'eq.(10) si scrive

$$\psi(\vec{r}) \sim \sum_{l=0}^{\infty} \left((2l+1) i^l j_l(kr) + f_l \frac{e^{ikr}}{r} \right) P_l(\cos \theta) \quad (27)$$

Inserendo nell'eq.(27) lo sviluppo asintotico delle funzioni di Bessel $j_l(kr)$

$$j_l(kr)_{kr \rightarrow \infty} \sim \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} = \frac{e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)}}{2ikr} = \frac{(-i)^l e^{ikr} - (i)^l e^{-ikr}}{2ikr} \quad (28)$$

dove abbiamo usato

$$e^{\pm il\pi/2} = (\pm i)^l \quad (29)$$

si ha

$$r \psi(\vec{r}) \sim \sum_l \left[(-1)^{l+1} \frac{2l+1}{2ik} e^{-ikr} + \left(\frac{2l+1}{2ik} + f_l \right) e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta) \quad (30)$$

Con la scelta degli assi fatti, possiamo scrivere $\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta)$ ed, espandendo in serie di polinomi di Legendre

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{y_l(r)}{r} P_l(\cos \theta) \quad (31)$$

dove $y_l(r)$ sono le soluzioni che si annullano all'origine ($y_l(r=0) = 0$) dell'equazione radiale di Schrödinger

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\varepsilon - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] y_l(r) = 0 \quad (32)$$

con

$$\varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \quad (33)$$

Per $r \rightarrow \infty$ l'eq.(32) si riduce

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] y_l(r) = 0 \quad (34)$$

La soluzione generale dell'eq.(34) è

$$y_l(r) = a_l \sin(kr - \beta_l) \quad (35)$$

Siccome il comportamento asintotico della soluzione dell'eq.(32) per la particella libera è esprimibile in termini della funzione di Bessel

$$j_l(kr)_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (36)$$

conviene riscrivere l'eq.(59) nella forma

$$y_l(r) = a_l \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) = a_l \frac{e^{i(kr - l\pi/2 + \delta_l)} - e^{-i(kr - l\pi/2 + \delta_l)}}{2i} = a_l \frac{(-i)^l e^{ikr + i\delta_l} - (i)^l e^{-ikr - \delta_l}}{2i} \quad (37)$$

dove δ_l , chiamato **sfasamento** nell'onda di momento angolare l , ha la proprietà: $\delta_l \rightarrow 0$ se $V(r) = 0$. La conoscenza degli sfasamenti permette di calcolare l'ampiezza di diffusione. Infatti, inserendo l'eq.(37) nell'eq.(31), dal confronto con l'eq.(30) si deduce

$$\begin{aligned} a_l &= (i)^l \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \\ f_l &= \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l \end{aligned} \quad (38)$$

L'eq.(38), corrispondente al coefficiente di e^{ikr} nell'eq.(30), si deriva utilizzando la prima espressione dell'eq.(38)

$$\frac{2l+1}{2ik} + f_l = \frac{(-i)^l a_l e^{i\delta_l}}{2i} \rightarrow f_l = \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) \quad (39)$$

Sostituendo l'eq.(38) questa espressione nell'eq.(25) si ottiene

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l (-i)^l P_l(\cos \theta) \quad (40)$$

La sezione d'urto differenziale si trova, vedi eq.(22), calcolando il modulo quadro di $f(\theta)$ data dall'eq.(40)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i\delta_l} e^{-i\delta_{l'}} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \quad (41)$$

Integrando sull'angolo solido, usando le relazioni di ortonormalità dei Polinomi di Legendre, eq.(154) per la sezione d'urto totale si ottiene la seguente espressione

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad (42)$$

dove

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (43)$$

rappresenta il contributo alla sezione d'urto dell'onda di momento angolare l

$$\sin^2 \delta_l \leq 1 \rightarrow \sigma_l \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (44)$$

Il valore massimo di σ_l si ha per

$$\delta_l = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \quad \longrightarrow \quad \sin^2 \delta_l = 1 \quad (45)$$

Nell'eq.(42) la sezione d'urto totale è espressa come una somma infinita di sezioni d'urto parziali σ_l . In pratica la serie si può limitare ad una somma su un numero finito di l perchè le onde parziali con alti valori di l non contribuiscono alla sezione di diffusione non risentendo degli effetti del potenziale. Questo si deduce dall'andamento nelle vicinanze dell'origine, $r = 0$, della densità di probabilità radiale, data r^2 per il modulo quadro della parte radiale della funzione di momento angolare l , cioè $r^2 |j_l(kr)|^2$. In effetti il comportamento all'origine della funzione di Bessel è $((n+1)!! = 1.3. \dots (n+1))$

$$j_l(\rho)_{\rho \rightarrow 0} \sim \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \quad \longrightarrow \quad |r j_l(kr)|_{r \rightarrow 0}^2 \sim r^2 \frac{(kr)^{2l}}{(2l+1)!!^2} \quad (46)$$

quindi la probabilità vicino all'origine decresce al crescere di l . Tale effetto è la traduzione quantistico di un analogo effetto classico. Infatti, se si considera la diffusione classica di una particella di impulso p e parametro d'impatto b (il parametro d'impatto è la distanza minima della particella incidente dal centro diffusore), la particella ha momento angolare $l = pb$. Al crescere del momento angolare la particella si trovano ad una distanza $\geq b$ dal centro diffusore e, quindi, risente di meno o per niente dell'effetto dell'interazione.

Dall'eq.(41) possiamo dedurre l'andamento in θ della sezione d'urto differenziale tipico dell'onda parziale che domina il processo di diffusione. In tal modo si può "fittare" la sezione d'urto sperimentale in funzione di un numero finito di parametri. Si ha

- Se il processo di diffusione è dominato dal termine con $l = 0$ (onda S), cioè $f_l = 0, l \neq 0$,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0 \quad (47)$$

quindi la sezione d'urto non dipende da θ , cioè è isotropa,

- Se il processo di diffusione è dominato dal termine con $l = 1$ (onda P), cioè $f_l = 0, l \neq 1$,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{9}{k^2} \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta \quad (48)$$

quindi la sezione d'urto dipende dal quadrato di θ .

- Se il processo di diffusione è dominato dal termine con $l = 0, 1$ (onda S e P), cioè $f_l = 0, l \neq 0, 1$,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} (A + B \cos \theta + C \cos^2 \theta)$$

$$A = \sin^2 \delta_0 \quad B = 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_0 - \delta_1) \quad C = 9 \sin^2 \delta_1 \quad (49)$$

Se $\delta_1 \sim 0$, sviluppando in serie $\cos \delta_1$ e $\sin \delta_1$ a meno di termini in δ_1^2 si ha

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{1}{k^2} (\sin^2 \delta_0 + 3\delta_1 \sin 2\delta_0 \cos \theta) \quad (50)$$

4 Rappresentazione integrale degli sfasamenti

Consideriamo l'equazione radiale di Schrödinger per due potenziali diversi $V_1(r)$ e $V_2(r)$ relativi a particella di stessa energia

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\varepsilon - U_1(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] y_{1,l}(r) = 0 \quad (51)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\varepsilon - U_2(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] y_{2,l}(r) = 0 \quad (52)$$

Moltiplichiamo l'eq.(51) (l'eq.(52)) per $y_{2,l}(r)$ (rispettivamente per $y_{1,l}(r)$) e sottraendo la seconda equazione dalla prima, si ha, denotando con l'apice la derivata rispetto a r :

$$\frac{d}{dr} [y_{2,l}(r)y_{1,l}(r)' - y_{2,l}(r)'y_{1,l}(r)] = y_{2,l}(r) (U_1(r) - U_2(r)) y_{1,l}(r) \quad (53)$$

Integrando il lato sinistro dell'eq.(53)¹ tra 0 e ∞ ed usando la condizione $y_{i,l}(r=0) = 0, i = 1, 2$, condizione che deve essere soddisfatta in quanto le $y_{i,l}(r)$ sono soluzioni dell'equazione radiale di Schrödinger, e il comportamento asintotico delle funzioni $y_{1,l}(r)$ e $y_{2,l}(r)$, vedi eq.(35), si ottiene

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{d}{dr} [y_{2,l}(r)y_{1,l}(r)' - y_{2,l}(r)'y_{1,l}(r)] dr &= y_{2,l}(r)y_{1,l}(r)' - y_{2,l}(r)'y_{1,l}(r) \Big|_0^\infty \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} k [\sin(kR - l/2\pi + \delta_{2,l}) \cos(kR - l/2\pi + \delta_{1,l}) - \cos(kR - l/2\pi + \delta_{2,l}) \sin(kR - l/2\pi + \delta_{1,l})] \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} k \sin(kR - l/2\pi - kR + l/2\pi + \delta_{2,l} - \delta_{1,l}) = k \sin(\delta_{2,l} - \delta_{1,l}) \end{aligned} \quad (54)$$

Integrando il lato destro dell'eq.(53) ed uguagliando all'eq.(54) si ottiene

$$\sin(\delta_{2,l} - \delta_{1,l}) = -\frac{1}{k} \int_0^\infty y_{2,l}(r) (U_2(r) - U_1(r)) y_{1,l}(r) dr \quad (55)$$

Questa equazione vale qualunque siano i potenziali $V_1(r)$ e $V_2(r)$, purchè soddisfino le condizioni eq.(1) ed eq.(2). In particolare se $V_2(r) = 0$, quindi $\delta_{2,l} = 0$ e $y_{2,l}(r) = kr j_l(kr)$, l'eq.(55) si ottiene l'equazione integrale per lo sfasamento

$$\sin \delta_l = - \int_0^\infty j_l(kr) U(r) y_{1,l}(r) r dr \quad (56)$$

Se assumiamo che $U_2(r) - U_1(r) = \Delta U(r)$ sia piccolo ($\implies \delta_{2,l} - \delta_{1,l} = \Delta \delta_l \ll 1$) e $y_{2,l}(r) \approx y_{1,l}(r) = y_l(r)$, sviluppando $\sin(\delta_{2,l} - \delta_{1,l})$ in serie, l'eq.(55) diventa

$$\Delta \delta_l = -\frac{1}{k} \int_0^\infty \Delta U(r) y_l^2(r) dr \quad (57)$$

Se $\Delta U(r)$ ha lo stesso segno per tutto i valori di r ne segue che la variazione $\Delta \delta_l$ ha il segno opposto. Questo ci permette di rimuovere l'ambiguità nella definizione di δ_l che, come ogni fase, è definita a meno di $2\pi n$. Infatti facendo variare $\Delta U(r)$ con continuità da 0 ad un valore $U(r)$ δ_l varia da 0 ad un certo valore δ_l . Inoltre se $U(r)$ è repulsivo (attrattivo) per ogni valore di r deduciamo che δ_l è, rispettivamente, negativo e positivo.

¹L'espressione in parentesi quadra viene chiamata il Wronskiano di $y_{2,l}(r), y_{1,l}(r)$ ed è, di solito, denotata come $W(y_{2,l}(r), y_{1,l}(r))$.

5 Diffusione da potenziale a range finito

Studiamo in dettaglio il caso di diffusione da potenziale $V(r)$ a range finito

$$V(r) \neq 0 \quad r \leq a \quad V(r) = 0 \quad r > a \quad (58)$$

In questo caso l'equazione radiale di Schrödinger eq.(32) si scrive

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] y_l(r) = 0 \quad r \leq a \quad (59)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] y_l(r) = 0 \quad r > a \quad (60)$$

L'eq.(60) ammette come soluzione

$$y_l(kr) = B_l kr j_l(kr) + C_l kr n_l(kr) \quad (61)$$

dove $j_l(kr)$ e $n_l(kr)$ denotano rispettivamente le funzioni di Bessel di primo e secondo tipo (funzioni di Neumann) il cui comportamento asintotico è dato dall'eq.(36) e da

$$n_l(kr)_{kr \rightarrow \infty} \sim \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (62)$$

L'eq.(61) asintoticamente si scrive

$$y_l(kr)_{kr \rightarrow \infty} \sim \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \quad (63)$$

dove si è posto $a_l = 1$ nell'eq.(35) e $B_l = \cos \delta_l$ e $C_l = \sin \delta_l$ ². Si noti che il comportamento asintotico dell'eq.(61) è tipico del comportamento asintotico della soluzione dell'equazione radiale di Schrödinger, vedi eq.(35). L'eq.(56) in questo caso diventa

$$\sin \delta_l = - \int_0^a j_l(kr) U(r) y_l(r) r dr \quad (64)$$

Nell'eq.(64) appare la funzione incognita $y_l(r)$ soluzione dell'eq.(59). In generale, non siamo in grado di calcolare la soluzione esatta dell'eq.(59), ma possiamo calcolarne una soluzione approssimata, vedi la Sez. 6.

Talvolta è conveniente parametrizzare lo sfasamento in funzione della derivata logaritmica³ della soluzione dell'equazione radiale di Schrödinger. Indichiamo con $y_l^I(r)$ e $y_l^{II}(r)$ rispettivamente la soluzione dell'eq.(59) e dell'eq.(60). Per la continuità della funzione d'onda e della sua derivata le derivate logaritmiche delle due funzioni, calcolate per $r = a$, devono essere uguali (per comodità di calcolo, come si vedrà, si è inserito il fattore costante a)

$$q_l^I(k) \equiv \frac{a y_l^I(a)'}{y_l^I(a)} = \frac{a y_l^{II}(a)'}{y_l^{II}(a)} \equiv q_l^{II}(k) \quad (65)$$

²Il segno di C_l dipende dalla convenzione sul segno della funzione $n_l(kr)$.

³Per derivata logaritmica della funzione $f(x)$ si denota il rapporto $\frac{1}{f(x)} \frac{df(x)}{dx}$

Esempio - Consideriamo il potenziale

$$V(r) = -V_0 \quad r \leq a \quad V(r) = 0 \quad r > a \quad (66)$$

In questo caso il problema è esattamente risolvibile perché l'eq.(59) diventa

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\hat{k}^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] y_l(r) = 0 \quad \hat{k} = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{\varepsilon + U_0} \quad (67)$$

la cui soluzione è

$$y_l(r) = A_l k r j_l(\hat{k}r) \quad r \leq a \quad (68)$$

Facciamo il calcolo in dettaglio per la diffusione in onda S ($l = 0$). Ricordiamo che

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} \quad n_0(\rho) = \frac{\cos \rho}{\rho} \quad (69)$$

Ne segue che ($\rho = \hat{k}r$)

$$q_0^I = \hat{k} a \cot \hat{k} a \quad (70)$$

La soluzione dell'equazione eq.(60) si scrive, usando l'eq.(61) per $l = 0$, e $B_0 = a_0 \cos \delta_0$ e $C_0 = a_0 \sin \delta_0$ per $l = 0$

$$y_{II}(r) = a_0 \sin(kr + \delta_0) \quad (71)$$

Quindi si ha

$$q_0^{II} = ka \cot(ka + \delta_0) \quad (72)$$

Nel caso che stiamo considerando, uguagliando la soluzione e la sua derivata prima nella regione I e nella regione II per $r = a$, la soluzione esatta è, a meno della costante arbitraria a_0 non determinabile non essendo la funzione $y(r)$ normalizzabile,

$$\begin{aligned} y(r) &= a_0 \frac{k}{\sqrt{k^2 + k_0^2 \cos^2 \hat{k} a}} \sin \hat{k} r & r < a \\ y(r) &= a_0 \sin(kr + \delta_0) & r > a \end{aligned} \quad (73)$$

Uguagliando l'eq.(142) e l'eq.(72) si trova

$$\hat{k} a \tan(ka + \delta_0) = ka \tan \hat{k} a \quad (74)$$

Quindi

$$\delta_0 = \arctan \left(\frac{k}{\hat{k}} \tan \hat{k} a \right) - ka \quad (75)$$

Nel limite $k \rightarrow 0 \implies \hat{k} = \sqrt{2mV_0/\hbar^2} = k_0$ e l'eq.(75) diventa

$$\delta_0|_{k \rightarrow 0} \approx k \left(\frac{1}{k_0} \tan k_0 a - a \right) \quad (76)$$

Quindi la sezione d'urto differenziale in onda S diventa

$$\sigma_{(0)} = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0 \approx \frac{1}{k^2} \delta_0^2 = \left(\frac{1}{k_0} \tan k_0 a - a \right)^2 \quad (77)$$

Studiamo in più dettaglio la diffusione a bassa energia. Espandiamo $\tan \widehat{k}a$ in serie di Taylor in k considerando anche il primo termine in k

$$\tan \widehat{k}a = \tan(a\sqrt{k^2 + k_0^2}) = \tan k_0 a + \frac{ak^2}{k_0 \cos^2 k_0 a} + \dots \quad (78)$$

L'eq.(75) diventa, trascurando potenze in k di ordine superiore a k^2 nello sviluppo di \widehat{k} ,

$$\delta_0 \approx \arctan \left\{ \frac{k}{k_0} \left(1 - \frac{k^2}{2k_0^2} \right) \left[\tan k_0 a + \frac{ak^2}{k_0 \cos^2 k_0 a} \right] \right\} - ka \quad (79)$$

Ricordiamo lo sviluppo in serie di

$$\tan x \approx x + \frac{x^3}{3} + \dots \quad (80)$$

$$\arctan x \approx x - \frac{x^3}{3} + \dots \quad (81)$$

Se $k_0 a \ll 1$ possiamo sviluppare $\tan k_0 a$ al primo ordine e l'eq.(79) diventa, trascurando i termini di ordine superiore a k^3 ,

$$\delta_0 \approx \arctan \left[ka - \frac{k^3 a}{2k_0^2} + \frac{ak^3}{k_0^2 \cos^2 k_0 a} \right] - ka \quad (82)$$

Sviluppando arctan ai primi due ordine e conservando solo i termini di ordine k^3 l'eq.(82) diventa

$$\delta_0 \approx k^3 a \left(\frac{1}{k_0^2 \cos^2 k_0 a} - \frac{1}{2k_0^2} - \frac{a^2}{3} \right) \quad (83)$$

Per studiare la variazione dello sfasamento δ_0 in funzione dell'energia della particella incidente, riscriviamo l'eq.(75) usando l'eq.(142)

$$\delta_0 = \arctan \left(\frac{ka}{q_0^I} \right) - ka \quad (84)$$

q_0^I , eq.(142), è una funzione decrescente dell'energia e varia molto velocemente intorno ai valori $\widehat{k}a \approx n\pi$. La differenza di energia ΔE tra due asintoti vicini (o tra due zeri vicini)

'e, supponendo $k^2 \ll k_0^2$,

$$\begin{aligned} n\pi &= ak_0 \sqrt{1 + \left(\frac{k}{k_0} \right)^2} \approx k_0 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k}{k_0} \right)^2 \right] & (n+1)\pi &= ak_0 \sqrt{1 + \left(\frac{k'}{k_0} \right)^2} \approx k_0 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k'}{k_0} \right)^2 \right] \\ \pi &= \frac{a}{2k_0} (k'^2 - k^2) \implies \Delta E \equiv \frac{\hbar^2}{2m} (k'^2 - k^2) \sim \frac{\pi V_0}{k_0 a} \end{aligned} \quad (85)$$

Per studiare la variazione di q_0^I con l'energia con uno sviluppo in serie, calcoliamo la derivata

$$\frac{dq_0^I}{dE} = \frac{ma^2}{\hbar^2} \left(\frac{\cot \hat{k}a}{\hat{k}a} - \frac{1}{\sin^2 \hat{k}a} \right) \quad (86)$$

Dall'eq.(84) si vede che il massimo valore dello sfasamento si ha per $q_0^I \rightarrow 0 \rightarrow \hat{k}a \rightarrow (2n+1)\pi/2$. Definiamo l'energia di risonanza E_r il valore dell'energia E tale che $\hat{k}a \rightarrow (2n+1)\pi/2$. Si ha

$$\begin{aligned} q_0^I \Big|_{E=E_r} &= 0 \\ \frac{dq_0^I}{dE} \Big|_{E=E_r} &= -\frac{ma^2}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (87)$$

Facendo uno sviluppo di Taylor di q_0^I al primo ordine in E intorno a E_r si ha

$$q_0^I \approx -\frac{ma^2}{\hbar^2} (E - E_r) \quad (88)$$

Usando le identità

$$\tan(\alpha + \beta) = \frac{\tan \alpha + \tan \beta}{1 - \tan \alpha \tan \beta} \quad (89)$$

$$e^{i2\delta_0} = \frac{1 + i \tan \delta_0}{1 - i \tan \delta_0} \quad \longrightarrow \quad i \tan \delta_0 = \frac{1 + e^{i2\delta_0}}{e^{i2\delta_0} - 1} \quad (90)$$

e la definizione

$$i \tan ka = \frac{1 + e^{-i2\xi}}{e^{-i2\xi} - 1} \quad (91)$$

l'eq.(74) assume la forma

$$e^{i2\delta_0} = e^{i2\xi} \frac{q_0^I + ika}{q_0^I - ika} \quad \longrightarrow_{E \sim E_r} \quad e^{i2\xi} \frac{E - E_r - i\Gamma}{E - E_r + i\Gamma} \quad (92)$$

dove

$$\Gamma = -\frac{k\hbar^2}{ma} \quad (93)$$

In un esempio specifico, abbiamo visto le caratteristiche della diffusione di risonanza ed introdotto la parametrizzazione alla Breit-Wigner.

Per particelle quantistiche e potenziali che vanno a zero per $r \rightarrow \infty$ come r^{-n} ($n > 2$) possiamo determinare un valore di $r = a$ tale che il potenziale può essere considerato nullo per valori $r > a$. Infatti se consideriamo una particella descritta da un pacchetto d'onda di indeterminazione Δr localizzata nel punto r , dobbiamo richiedere $\Delta r \ll r$. Le relazioni di indeterminazione tra Δr e Δp_r sono $\Delta r \Delta p_r \geq \hbar/2$. L'energia cinetica della particella soddisfa le seguenti disuguaglianze

$$E_{cin} \geq \frac{\Delta^2 p_r}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta^2 r} \gg \frac{\hbar^2}{mr^2} = \hat{E} \quad (94)$$

Se consideriamo un potenziale $V(r) = C r^{-n}$, esiste un punto a tale che

$$V(a) = \hat{E} \quad \Longrightarrow \quad \frac{C}{a^n} = \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad \longrightarrow \quad a = \left(\frac{Cm}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{n-2}} \quad (95)$$

Per $r > a$ l'energia cinetica della particella è sicuramente molto maggiore dell'energia potenziale ($E_{cin} \gg V(r)$) e quindi possiamo considerare trascurabile l'effetto del potenziale.

6 Approssimazione di Born per gli sfasamenti

Per potenziali non troppo intensi, possiamo fare uno sviluppo della funzione $y_l(r)$ che appare nell'equazione integrale eq.(64)

$$y_l(r) \approx r j_l(kr) + O(V) \quad (96)$$

in cui il primo termine (ordine zero nel potenziale) è la soluzione per $V = 0$ ed i termini successivi dipendono dal potenziale. L'approssimazione di Born consiste nel sostituire nell'eq.(64) la funzione $y_l(r)$ con la sua funzione all'ordine zero, cioè $r j_l(kr)$

$$\sin \delta_l = -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) j_l^2(kr) r^2 dr \quad (97)$$

L'eq.(120) è un integrale in quanto nel lato destro non appare più la funzione $y_l(r) = f(\delta_l)$. Dall'eq.(120) si deduce che, per potenziali con segno definito per ogni valore di r , lo sfasamento δ_l , in approssimazione di Born, è negativo per potenziali repulsivi ($V(r) > 0 \quad \forall r$) e positivo per potenziali attrattivi ($V(r) < 0 \quad \forall r$).

Esempio - Come esempio calcoliamo in approssimazione di Born la sezione d'urto differenziale per l'onda $l = 0$ (onda S) per il potenziale

$$V(r) = V_0 e^{-\alpha r}, \quad V_0 \text{ costante} \quad (98)$$

L'eq.(120) si scrive

$$\begin{aligned} \sin \delta_0 &= -V_0 \frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^\infty e^{-\alpha r} j_0^2(kr) r^2 dr \\ &= -V_0 \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \sin^2(kr) dr \\ &= -V_0 \frac{m}{\hbar^2 k \alpha} \left(1 - \frac{1}{1 + 2(k/\alpha)^2} \right) \end{aligned} \quad (99)$$

Calcolo dell'integrale che appare nel lato destro dell'equazione precedente

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \sin^2(kr) dr &= -1/4 \int_0^\infty [e^{-\alpha r} e^{i2kr} + e^{-\alpha r} e^{-i2kr} - 2] dr \\ &= -\frac{1}{4} \left[\frac{1}{\alpha - 2ik} + \frac{1}{\alpha + 2ik} - \frac{2}{\alpha} \right] = \frac{1}{2\alpha} - \frac{1}{2\alpha + 8k^2/\alpha} \end{aligned} \quad (100)$$

Studiamo l'espressione eq.(100) nei limiti di bassa ed alta energia

$$\frac{1}{2\alpha} - \frac{1}{2\alpha + 4k^2/\alpha} \Big|_{k/\alpha \rightarrow 0} \sim \frac{1}{2\alpha} \left[1 - \left(1 - \frac{2k^2}{\alpha^2} \right) \right] = \frac{1}{\alpha} \frac{2k^2}{\alpha^2} \quad (101)$$

$$\frac{1}{2\alpha} - \frac{1}{2\alpha + 4k^2/\alpha} \underset{k/\alpha \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2\alpha} \left(1 - \frac{\alpha^2}{2k^2}\right) \sim \frac{1}{2\alpha} \quad (102)$$

Inserendo l'espressione di δ_0 nell'eq.(38) per $l = 0$ si trova per $k \gg \alpha$

$$|f_0|^2 = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0 = V_0^2 \left(\frac{m}{\hbar^2 k^2 \alpha}\right)^2 \quad (103)$$

Quindi la sezione d'urto totale, nell'ipotesi che il contributo in onda S sia il solo rilevante alla diffusione, è dall'eqs.(42)-(43)

$$\sigma_{tot} = \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^4} V_0^2 \left(\frac{2m}{\hbar^2 \alpha}\right)^2 \quad (104)$$

Esempio - Come esempio calcoliamo in approssimazione di Born la sezione d'urto differenziale per l'onda $l = 0$ (onda S) per la buca di potenziale

$$V(r) = -V_0 \quad r \leq a \quad V = 0 \quad r > a \quad (105)$$

L'eq.(120) si scrive

$$\begin{aligned} \sin \delta_0 &= -V_0 \frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^a j_0^2(kr) r^2 dr \\ &= -V_0 \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^a \sin^2(kr) dr \\ &= -V_0 \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^a \frac{1}{2} (1 - \cos 2kr) dr \\ &= -V_0 \frac{2m}{\hbar^2 k} \left[\frac{a}{2} - \frac{\sin 2ka}{4k} \right] \end{aligned} \quad (106)$$

Studiamo l'espressione eq.(106) nei limiti di bassa energia $ka \rightarrow 0$

$$\sin \delta_0 \underset{ka \rightarrow 0}{\approx} -V_0 \frac{2m}{\hbar^2 k} \left[\frac{a}{2} - \frac{a}{2} + \frac{(2ka)^3}{4k3!} \right] = -V_0 \frac{2mka^3}{3\hbar^2} \quad (107)$$

quindi

$$|f_0(\theta)| = \frac{1}{k} |\sin \delta_0| = V_0 \frac{2ma^3}{3\hbar^2} \quad (108)$$

7 Teorema Ottico

Prendendo la parte immaginaria (Im) dell'eq.(40) per $\theta = 0$, essendo $P_l(\cos \theta = 1) = 1$, si ha

$$Im f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{k}{4\pi} \sigma_{tot} \quad (109)$$

dove abbiamo usato l'eq.(42). Tale espressione è chiamata **teorema ottico** e collega la sezione d'urto totale elastica alla parte immaginaria dell'ampiezza di diffusione nella direzione ($\theta = 0$). Si noti che in questa relazione la sezione d'urto fisicamente misurabile è collegata alla parte immaginaria di $f(\theta \rightarrow 0)$, anche se nella direzione avanti l'ampiezza di diffusione non è misurabile in quanto in tale direzione troviamo la maggior parte di particelle non diffuse. Il teorema ottico è una conseguenza della conservazione della densità di probabilità e nella sua dimostrazione dobbiamo prendere in conto, nel calcolo della corrente di densità di probabilità, l'interferenza tra corrente incidente e la corrente diffusa, termine che abbiamo trascurato nel calcolo in Sezione 2.

8 Equazione integrale per l'ampiezza di diffusione

L'equazione stazionaria di Schrödinger eq.(9) può essere trasformata in un'equazione integrale con l'uso della funzione di Green e la funzione d'onda di diffusione, cioè il secondo termine dell'eq.(10) soddisfa l'equazione integrale

$$\psi_S(\vec{r}) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r' V(r') \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi(\vec{r}') \quad (110)$$

dove abbiamo usato l'espressione della funzione di Green ricavata in Appendice B.

Ricordiamo che ($\alpha \equiv$ angolo tra \vec{r} e \vec{r}')

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - rr' \cos \alpha} = r \left(1 + \frac{r'^2}{r^2} - \frac{2r' \cos \alpha}{r} \right)^{1/2} \approx_{r \gg r'} r - \vec{e}_r \cdot \vec{r}' \quad (111)$$

$$|\vec{r}-\vec{r}'|^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r'^l}{r^{l+1}} P_l(\cos \alpha) \quad (r > r') \quad (112)$$

Se $\vec{r} = r \vec{n}(\beta, \gamma)$ e $\vec{r}' = r' \vec{n}'(\beta', \gamma')$ si ha

$$\cos \alpha = \cos \beta \cos \beta' + \sin \beta \sin \beta' \cos(\gamma - \gamma') \quad (113)$$

e, usando il cosiddetto teorema di somma delle armoniche sferiche,

$$P_l(\cos \alpha) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\beta, \gamma) Y_{lm}^*(\beta', \gamma') \quad (114)$$

Considerando $r \gg r'$, prendendo il termine $l = 0$ dell'eq.(112), possiamo sostituire nell'eq.(110)

$$|\vec{r}-\vec{r}'|^{-1} \approx r^{-1} \quad e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx e^{ikr} e^{-ikr' \cos \theta} \quad (115)$$

dove θ è l'angolo tra $\vec{r} \parallel \vec{k}$ e \vec{r}' .

$$\psi_S(\vec{r}) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' V(r') e^{-ikr' \cos \theta} \psi(\vec{r}') \quad (116)$$

9 Approssimazione di Born per l'ampiezza di diffusione

Nell'approssimazione di Born sostituiamo nell'eq.(116) la funzione d'onda con la funzione d'onda libera cioè con l'onda piana. Sia

$$\psi_S(\vec{r}) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r' V(r') \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}'} \quad (117)$$

Per calcolare l'eq.(117) consideriamo che r , posizione del rivelatore, è molto più grande dei valori di r' che danno un contributo non trascurabile all'integrale (a causa della presenza di $V(r')$ che all'infinito va a zero rapidamente) quindi possiamo usare l'eq.(115) e troviamo

$$\psi_S(\vec{r}) = \frac{e^{ikr}}{r} \left(-\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r' V(r') e^{-ik\vec{e}_r \cdot \vec{r}'} e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}'} \right) = \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \quad (118)$$

dove

$$f(\theta) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r' V(r') e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}) \cdot \vec{r}'} \quad (119)$$

con $\vec{k} = k\vec{e}_r$. Integrando sull'angolo solido l'eq.(119) si ottiene

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty V(r) \sin qr r dr \quad (120)$$

$$\vec{q} = \vec{k}_0 - \vec{k} \quad |\vec{k}_0| = |\vec{k}| \quad q = 2k \sin \theta/2 \quad (121)$$

Si noti che $f(\theta)$ calcolata con l'eq.(120) è reale, mentre, per il teorema ottico sappiamo che $f(\theta)$ deve essere complessa.

Esempio - Calcoliamo l'ampiezza di diffusione in approssimazione di Born per la buca di potenziale eq.(66). L'eq.(120) diventa

$$f(\theta) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{q} \int_0^a \sin qr r dr \quad (122)$$

Calcolo l'integrale

$$\int_0^a \sin qr r dr = -\left. \frac{\cos qr r}{q} \right]_0^a + \frac{1}{q} \int_0^a \cos qr dr = -\frac{\cos qa a}{q} + \frac{\sin qa}{q^2} \quad (123)$$

Quindi

$$f(\theta) = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^2} \left(\frac{\sin qa}{q} - a \cos qa \right) \quad (124)$$

Per $k \rightarrow 0$ si ha

$$f(\theta)_{k \rightarrow 0} \approx \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^2} \left(a - \frac{q^2 a^3}{3!} - a + a \frac{q^2 a^2}{2!} \dots O(q^4) \right) = \frac{2mV_0 a^3}{3\hbar^2} \quad (125)$$

Confrontare l'equazione precedente con l'eq.(108).

Esempio - Calcoliamo l'ampiezza di diffusione in approssimazione di Born per il potenziale

$$V(r) = C \frac{e^{-\lambda r}}{r} \quad \lambda > 0 \quad (126)$$

L'eq.(120) diventa

$$f(\theta) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{C}{q} \int_0^\infty e^{-\lambda r} \sin qr dr \quad (127)$$

Calcolo l'integrale

$$\frac{1}{2i} \int_0^\infty e^{-\lambda r} (e^{iqr} - e^{-iqr}) dr = \frac{1}{2i} \left. \frac{e^{(-\lambda+iq)r}}{-\lambda+iq} \right]_0^\infty - \frac{1}{2i} \left. \frac{e^{-(\lambda+iq)r}}{-\lambda-iq} \right]_0^\infty = \frac{q}{\lambda^2 + q^2} \quad (128)$$

Quindi

$$f(\theta) = \frac{2mC}{\hbar^2(\lambda^2 + q^2)} \quad (129)$$

Se $C = -Z_1 e Z_2 e$ e considero il limite $\lambda \rightarrow 0$ troviamo l'ampiezza di diffusione per scattering coulombiano

$$f(\theta) = -\frac{2mZ_1 Z_2 e^2}{\hbar^2 q^2} \implies \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{16} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta/2} \quad (130)$$

10 Approssimazione di Born per la diffusione da potenziale elettrostatico

Nel calcolo, in approssimazione di Born, dell'ampiezza di diffusione prodotta da un potenziale generato da una distribuzione di carica conviene usare la seguente identità.

Proposizione: Sia $V(r)$ il potenziale elettrostatico generato dalla densità di carica finita $\rho(r)$, cioè soluzione dell'equazione di Poisson

$$\nabla^2 V(r) = -4\pi\rho(r) \quad (131)$$

si ha

$$\int_0^\infty r V(r) \sin qr \, dr = -\frac{1}{q^2} \int_0^\infty \left(\frac{d^2 r V(r)}{dr^2} \right) \sin qr \, dr \quad (132)$$

Prova: Per l'eq.(119) l'ampiezza di diffusione per un potenziale elettrostatico, schermato con un termine alla Yukawa, può essere scritta:

$$f(\theta) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3 r V(r) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \longrightarrow -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3 r V(r) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{-\lambda r} \equiv -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \mathcal{I} \quad (133)$$

Nell'integrale \mathcal{I} introduco le trasformate di Fourier

$$e^{-\lambda r} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 t F_\lambda(\vec{t}) e^{-i\vec{t}\cdot\vec{r}} \quad (134)$$

$$V(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 z V(\vec{z}) e^{-i\vec{z}\cdot\vec{r}} \quad (135)$$

L'integrale \mathcal{I} del lato destro dell'eq.(132) diventa

$$\mathcal{I} = \int d^3 r e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 t F_\lambda(\vec{t}) e^{-i\vec{t}\cdot\vec{r}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 z V(\vec{z}) e^{-i\vec{z}\cdot\vec{r}} \quad (136)$$

Inserendo l'eq.(135) nell'eq.(131) si ottiene

$$\nabla^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 z V(\vec{z}) e^{-i\vec{z}\cdot\vec{r}} = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 z z^2 V(\vec{z}) e^{-i\vec{z}\cdot\vec{r}} = -4\pi\rho(r) \quad (137)$$

Moltiplicando l'equazione precedente per $e^{i\vec{z}'\cdot\vec{r}}$ ed integrando in $d^3 r$ si ottiene

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 r \int d^3 z z^2 V(\vec{z}) e^{i(\vec{z}'-\vec{z})\cdot\vec{r}} = -\int d^3 z z^2 V(\vec{z}) \delta(\vec{z}'-\vec{z}) = -z'^2 V(\vec{z}') \\ & = -4\pi \int d^3 r \rho(r) e^{i\vec{z}'\cdot\vec{r}} \longrightarrow V(\vec{z}') = \frac{4\pi}{z'^2} \int d^3 r \rho(r) e^{i\vec{z}'\cdot\vec{r}} \end{aligned} \quad (138)$$

Inserendo la precedente espressione nell'eq.(136) si ottiene

$$\mathcal{I} = \int d^3 r e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 t F_\lambda(\vec{t}) e^{-i\vec{t}\cdot\vec{r}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 z \frac{4\pi}{z^2} \int d^3 r' \rho(r') e^{i\vec{z}\cdot\vec{r}'} e^{-i\vec{z}\cdot\vec{r}} \quad (139)$$

Integrando in $d^3 r$ si ottiene

$$\mathcal{I} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 t F_\lambda(\vec{t}) \int d^3 z \frac{4\pi}{z^2} \int d^3 r' \rho(r') e^{i\vec{z}\cdot\vec{r}'} \delta(\vec{q}-\vec{t}-\vec{z}) \quad (140)$$

integrando in d^3z si ottiene

$$\mathcal{I} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3t F_\lambda(\vec{t}) \frac{4\pi}{|\vec{q}-\vec{t}|^2} \int d^3r' \rho(r') e^{i(\vec{q}-\vec{t})\cdot\vec{r}'} \quad (141)$$

L'integrale in d^3r' è ben definito qualunque sia il valore di \vec{q} e \vec{t} , quindi posso fare il limite $\lambda \rightarrow 0 \rightarrow F_\lambda(\vec{t}) \rightarrow (2\pi)^3 \delta(\vec{t})$ e otteniamo

$$\mathcal{I} = \frac{4\pi}{q^2} \int d^3r' \rho(r') e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}'} \quad (142)$$

Inserendo l'eq.(142) nell'eq.(133), nel limite $\lambda \rightarrow 0$, si ottiene:

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q^2} \int d^3r \rho(r) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{4\pi}{q^3} \int \rho(r) \sin qr r dr \quad (143)$$

che è l'eq.(132), osservando che, per una distribuzione di carica $\rho(r)$ a simmetria sferica, scrivendo il laplaciano in coordinate sferiche si ha

$$\frac{d^2rV(r)}{dr^2} = -4\pi r \rho(r) \quad (144)$$

11 Lunghezza di diffusione

Per una larga classe di potenziali, a bassa energia, la diffusione in onda S, $l = 0$, da il contributo dominante alla sezione d'urto che quindi sarà isotropa. Definiamo la **lunghezza di diffusione (scattering length)**⁴

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0(k)}{k} \approx -\lim_{k \rightarrow 0} f_0(k) \approx -\lim_{k \rightarrow 0} f(k) \quad (145)$$

dove abbiamo usato l'eq.(38) e l'eq.(40) e lo sviluppo in serie al primo ordine in δ_0 di $e^{i\delta_0} \sin \delta_0$. La scelta del segno $-$ è convenzionale. Possiamo calcolare la lunghezza di diffusione usando l'approssimazione di Born per l'ampiezza eq.(120), e sostituendo $\sin_{q \rightarrow 0} qr \approx qr$, otteniamo

$$a \approx \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) r^2 dr = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r V(r) \quad (146)$$

A bassa energia la sezione d'urto totale elastica è determinata dalla lunghezza di diffusione

$$\sigma_{Tot \ k \rightarrow 0} \approx 4\pi a^2 \quad (147)$$

12 Diffusione di particelle identiche

Se consideriamo un processo di diffusione di due particelle non identiche nel sistema del centro di massa (CM) ed i rivelatori non sono in grado di distinguere le particelle la probabilità che un rivelatore posto nella direzione θ riveli una particella nell'unità di tempo è dato da $I(\theta) = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2$.

⁴In alcuni testi la lunghezza di diffusione è definita come $a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k}$ o $a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\sin \delta_0(k)}{k}$. Questa definizioni sono equivalenti tra di loro ed equivalente a quella data sopra per $\delta_0 \ll 1$.

Se le particelle sono identiche la funzione d'onda del sistema deve essere simmetrica per particelle di spin intero (bosoni) o anti-simmetrica per particelle di spin semi-intero (fermioni). Nel CM la funzione d'onda Ψ per la diffusione di due particelle di spin S si scrive, asintoticamente

$$\Psi = \left\{ e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \pm e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{e^{ik}}{r} [f(\theta) \pm f(\pi - \theta)] \right\} \cdot \chi_{spin} \quad (148)$$

dove il segno \pm nella prima espressione deve essere scelto in modo che tenendo conto della simmetria della funzione di spin χ_{spin} la funzione d'onda Ψ abbia la corretta proprietà di simmetria. La sezione d'urto differenziale sarà data da

$$\sigma(\theta) = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \quad (149)$$

Lo spin totale S_t del sistema è compreso tra 0 e $2S$. Dalla composizione dei momenti angolari sappiamo che gli stati di $S_t = 2S, 2S - 2, 2S - 4, \dots$ sono simmetrici mentre gli stati con $S_t = 2S - 1, 2S - 3, 2S - 5, \dots$ sono anti-simmetrici. Si ha La somma degli stati da il corretto numero di stati totale $(2S + 1)^2$. Per bosoni quando χ_{spin} è simmetrica (anti-simmetrica) la prima espressione nell'eq.(148) deve essere simmetrica (rispettivamente anti-simmetrica), mentre per i fermioni avviene il contrario. Se quindi consideriamo la rivelazione di particelle bosoniche non polarizzate dobbiamo sommare l'espressione data dall'eq.(149) con il segno "+" moltiplicata per la frazione di stati di χ_{spin} simmetrici e con il segno "-" per la frazione di stati di χ_{spin} anti-simmetrici ed il contrario per particelle fermioniche

$$\begin{aligned} I(\theta) &= \frac{S+1}{2S+1} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{S}{2S+1} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + \frac{2}{2S+1} \text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \quad \mathbf{Bosoni} \end{aligned} \quad (150)$$

$$\begin{aligned} I(\theta) &= \frac{S+1}{2S+1} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + \frac{S}{2S+1} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \frac{2}{2S+1} \text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \quad \mathbf{Fermioni} \end{aligned} \quad (151)$$

A Sviluppo di onde piana

Ricaviamo l'eq.(26). L'equazione libera di Schrödinger in 3 dimensioni ammette come autofunzioni (non normalizzabili) corrispondenti all'energia $E = (\hbar k)^2/2m$, scrivendo il laplaciano in coordinate cartesiane, le onde piane $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ o, scrivendo il laplaciano in coordinate sferiche, il prodotto delle funzioni di Bessel di primo tipo per le armoniche sferiche $j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Di conseguenza, per la completezza delle autofunzioni, è possibile espandere le onde piane in termini delle soluzioni in ccordinate sferiche

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{lm} c_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (152)$$

Nel caso in cui \vec{k} è diretto lungo l'asse z si ha $\vec{k} \cdot \vec{r} = kr \cos \theta$, non c'è dipendenza dall'angolo φ e l'eq.(152) diventa

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_l c_l j_l(kr) Y_{l0}(\theta) = \sum_l c_l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (153)$$

Determiniamo i coefficienti numerici c_l . Moltiplicando l'eq.(153) a sinistra per $P_{l'}(\cos \theta)$ ed integrando su $\cos \theta$, utilizzando la ortogonalità dei polinomi di Legendre

$$\int_{-1}^{+1} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d \cos \theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (154)$$

si ottiene

$$c_l \sqrt{\frac{1}{\pi(2l+1)}} j_l(kr) = \int_{-1}^{+1} P_l(\cos \theta) e^{ikr \cos \theta} d \cos \theta \quad (155)$$

Il coefficiente numerico c_l non dipende da r , quindi per calcolarlo possiamo considerare il limite $r \rightarrow 0$ e prendere il termine dominante nello sviluppo asintotico. Ricordiamo che

1.

$$j_l(kr)_{kr \rightarrow 0} \approx \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} = \frac{(kr)^l}{(2l+1)!} 2^l l! \quad (156)$$

dove abbiamo usato l'identità

$$(2l+1)! = (2l+1)!!(2l)!! = (2l+1)!! l! 2^l \quad (157)$$

2.

$$(\cos \theta)^k = \sum_{l \leq k} A_l P_l(\cos \theta) \quad (158)$$

Usando l'espressione dei polinomi di Legendre

$$P_l(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l \sin^{2l} \theta}{d \cos \theta^l} = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l (1 - \cos^2 \theta)^l}{d \cos \theta^l} \quad (159)$$

si ricava facilmente il coefficiente della potenza più alta in $\cos \theta$

$$P_l(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{(-1)^l 2l!}{l!} \cos^l \theta + \dots \quad \left(\text{si ricordi } \frac{d^l x^{2l}}{dx^l} = \frac{2l!}{l!} \right) \quad (160)$$

quindi

$$A_k = 2^k k! \frac{k!}{2k!} \quad (161)$$

Sviluppando l'esponenziale del lato destro dell'eq.(155) in serie di potenze, usando l'eq.(158) e lo sviluppo asintotico eq.(156) si ha

$$c_l \sqrt{\frac{1}{\pi(2l+1)}} \frac{(kr)^l}{(2l+1)!} 2^l l! = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-1}^{+1} P_l(\cos \theta) \frac{(ikr \cos \theta)^n}{n!} d \cos \theta \quad (162)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m \leq n} \int_{-1}^{+1} P_l(\cos \theta) \frac{(ikr)^n}{n!} A_m P_m(\cos \theta) d \cos \theta \quad (163)$$

Per l'ortogonalità dei polinomi di Legendre solo il termine con $m = n = l$ contribuisce al lato destro dell'eq.(163) e, usando l'eq.(154) e l'eq.(161) si ha

$$c_l \sqrt{\frac{1}{\pi(2l+1)}} \frac{(kr)^l}{(2l+1)!} 2^l l! = \frac{(ikr)^l}{l!} 2^l l! \frac{l!}{2l!} \frac{2}{2l+1} \implies c_l = (i)^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \quad (164)$$

e sostituendo nell'eq.(153) si ottiene l'eq.(26).

B Funzione di Green per l'equazione di Schrödinger

Si consideri l'equazione differenziale inomogena per la funzione $\psi(x)$, D operatore differenziale,

$$D \psi(x) = \Phi(x) \quad (165)$$

La **funzione di Green** $G(x, x')$ associata a D è definita dall'equazione

$$D G(x, x') = \delta(x - x') \quad (166)$$

Utilizzando la funzione di Green $G(x, x')$ si può trovare la soluzione generale dell'eq.(165) per qualunque termine inomogeneo $\Phi(x)$

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int dx' G(x, x') \Phi(x') \quad (167)$$

dove $\psi_0(x)$ è la soluzione dell'equazione differenziale omogenea

$$D \psi(x) = \Phi(x) \quad (168)$$

che soddisfa le condizioni iniziali.

Nei processi di diffusione dobbiamo risolvere l'equazione di Schrödinger, vedi eq.(9)

$$[\Delta + k^2] \psi(\vec{r}) = U(r) \psi(\vec{r}) \quad (169)$$

Cerchiamo la la funzione di Green $G(\vec{r} - \vec{r}')$ dell'operatore differenziale $[\Delta + k^2]$, dove abbiamo usato l'invarianza per traslazione nello scrivere l'argomento di G . Per definizione dobbiamo risolvere l'equazione

$$[\Delta + k^2] G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (170)$$

Scriviamo la funzione G come trasformata di Fourier

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} G(\vec{q}) \quad (171)$$

Sostituendo l'eq.(171) nell'eq.(170) otteniamo

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q (-q^2 + k^2) e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} G(\vec{q}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (172)$$

Moltiplicando l'eq.(172) per $e^{i\vec{q}'\cdot\vec{r}'}$ ed integrando in d^3r' , utilizzando la rappresentazione integrale della funzione di Dirac

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r' e^{i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot\vec{r}'} = \delta(\vec{q}' - \vec{q}) \quad (173)$$

l'eq.(172) diventa

$$\int d^3q' (-q'^2 + k^2) e^{i\vec{q}'\cdot\vec{r}'} \delta(\vec{q}' - \vec{q}) G(\vec{q}') = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} (-q^2 + k^2) G(\vec{q}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \implies G(\vec{q}) = (-q^2 + k^2)^{-1} \quad (174)$$

Per calcolare esplicitamente $G(\vec{r} - \vec{r}')$ inseriamo l'eq.(174) nell'eq.(171) e effettuiamo l'integrazione su $d\Omega$

$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^2 dq \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \frac{1}{-q^2 + k^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q^2 dq \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'| \cos \theta} \frac{1}{-q^2 + k^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q dq \frac{e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|} - e^{-iq|\vec{r}-\vec{r}'|}}{i|\vec{r} - \vec{r}'|} \frac{1}{-q^2 + k^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^\infty q dq \frac{e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}}{i|\vec{r} - \vec{r}'|} \frac{1}{-q^2 + k^2} \end{aligned} \quad (175)$$

L'integrale eq.(175) non è definito in quanto il denominatore dell'integrando si annulla per $q = \pm k$. Per evitare le singolarità introduciamo un parametro reale ε e sostituiamo

$$\frac{1}{-q^2 + k^2} \longrightarrow \frac{1}{-q^2 + k^2 \pm i\varepsilon} \quad (176)$$

Secondo la scelta del segno i poli si troveranno nei punti $q = \pm(k \pm i\varepsilon)$. Possiamo usare l'arbitrarietà della scelta del segno di ε per fare in modo che la funzione di Green riproduca le condizioni iniziali. Una volta effettuato il calcolo mandiamo ε a zero. Introdotto il fattore ε possiamo calcolare l'integrale eq.(175) estendendo la variabile q dall'asse reale al piano complesso e chiudendo l'integrale con un semicerchio nel semipiano superiore o nel semipiano inferiore. Questo procedimento è equivalente a deformare il percorso di integrazione sull'asse reale in due modi diversi: lungo il cammino Γ_+ (Γ_-) che include la singolarità nel punto $q = +k$ ($q = -k$) ed esclude la singolarità a $q = -k$ ($q = +k$) e chiudendo l'integrale con un semicerchio nel semipiano superiore (inferiore, scrivendo nell'eq.(175) l'esponenziale con $-q$). In questo modo si ottengono due funzioni di Green, $G_\pm(\vec{r} - \vec{r}')$, denotate rispettivamente funzione di Green ritardata ed avanzata. Noi consideriamo solo la funzione di Green

G_+ e nel seguito ometteremo il pedice $+$. Applicando il teorema dei residui, annullandosi il contributo all'integrale del semicerchio nel piano superiore per $|q| \rightarrow \infty$, si ha

$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\Gamma_+} q dq \frac{e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}}{i|\vec{r}-\vec{r}'|} \frac{1}{(-q+k)(q+k)} = -\frac{1}{i(2\pi)^2|\vec{r}-\vec{r}'|} 2\pi i_{q \rightarrow k} [q(q+k)^{-1} e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}] \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|} \end{aligned} \quad (177)$$

La funzione di Green si può scrivere ($H_0 \equiv$ hamiltoniana libera di Schrödinger)

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{r}' | \frac{1}{E - H_0} | \vec{r} \rangle \quad (178)$$

In effetti si ha

$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3p \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3p' \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \frac{1}{E - H_0} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \vec{r}' \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3p \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3p' \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \frac{1}{E - E'_0} \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \vec{r}' \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3p \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3p' e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \frac{1}{k^2 - p'^2} (2\pi)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}') e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}'} \end{aligned} \quad (179)$$

Integrando in d^3p' otteniamo, tenendo conto dell'eq.(174), l'eq.(171).

C Normalizzazione di ket posizione e momento

Normalizzando i ket posizione nel modo seguente

$$\langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (180)$$

e definendo

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} \quad (181)$$

si ha

$$\mathbf{1} = \int d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \quad \longrightarrow \quad \mathbf{1} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| \quad (182)$$

In effetti

$$\langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}') = \int d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3p e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} \quad (183)$$

e analogamente

$$\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \int d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{p}' \rangle = \int d^3x e^{i\vec{x}\cdot(\vec{p}-\vec{p}')} = (2\pi)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad (184)$$

D Equazione di Schrödinger in potenziale centrale

Studiamo l'equazione di Schrödinger per un potenziale centrale $V(\vec{r}) = V(r)$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \quad (185)$$

Si verifica facilmente che la hamiltoniana commuta con il momento angolare \vec{l}

$$[\vec{l}, H] = 0 \quad (186)$$

cioè la hamiltoniana è a simmetria sferica. Infatti si ha

$$\begin{aligned} [l_i, r^2] &= \sum_{j=1}^3 [l_i, r_j^2] = \sum_{j=1}^3 ([l_i, r_j] r_j + r_j [l_i, r_j]) \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} (r_k r_j + r_j r_k) = 0 \end{aligned} \quad (187)$$

in quanto l'espressione in parentesi è simmetrica in j e k mentre il tensore di Levi-Civita è antisimmetrico. In maniera analoga si dimostra $[l_i, p^2] = 0$. Quindi esiste una base di autostati comune a H, \vec{l}^2 e $l_z = l_3$. Dalla definizione dell'operatore momento angolare ($\hbar = 1$)

$$\vec{l} = \vec{r} \wedge \vec{p} \implies \vec{l}^2 = \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p} \quad (188)$$

Nella precedente equazione abbiamo tenuto conto della non commutatività degli operatori \vec{r} e \vec{p} , l_i e l_j . Il calcolo esplicito è (in seguito useremo la convenzione che gli indici ripetuti vanno sommati da 1 a 3)

$$\begin{aligned} \vec{l}^2 &= \sum_i^3 l_i^2 = \varepsilon_{ijk} r_j p_k \varepsilon_{imn} r_m p_n \\ &= r_j p_k r_j p_k - r_j p_k r_k p_j \\ &= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - i\hbar (\vec{r} \cdot \vec{p}) - r_j r_k p_k p_j + 3i\hbar r_j p_j \\ &= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - i\hbar (\vec{r} \cdot \vec{p}) - r_j p_j r_k p_k - i\hbar r_j p_j + 3i\hbar r_j p_j \end{aligned} \quad (189)$$

Dove abbiamo usato:

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn} = \delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km} \quad (190)$$

$$r_j p_j = p_j r_j + 3i\hbar \quad (191)$$

$$r_k p_k p_j = p_j r_k p_k + i\hbar \delta_{jk} p_k \quad (192)$$

Dall'eq.(188) dividendo per r^2 ed usando

$$\vec{r} \cdot \vec{p} = -i\hbar \vec{r} \cdot \vec{\nabla} = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \quad (193)$$

si trova

$$\vec{p}^2 = \frac{\vec{l}^2}{r^2} - \hbar^2 \frac{1}{r^2} \left(\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + r \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (194)$$

Il lato destro dell'eq.(194) è, a parte il fattore moltiplicativo $-\hbar^2$, il laplaciano in coordinate sferiche. Il secondo termine dell'eq.(194) si può scrivere:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} r \quad (195)$$

Definiamo il *momento radiale* p_r

$$p_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (196)$$

che soddisfa

$$[r, p_r] = i\hbar \quad (197)$$

Dimostriamo che la forma dell'operatore *momento radiale* p_r è quella che ci aspetta applicando le relazioni di quantizzazione al momento radiale classico, che è definito come la proiezione sulla direzione \vec{r} del momento classico

$$p_r = \vec{p} \cdot \vec{e}_r = \vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \quad (198)$$

Per quantizzare p_r dobbiamo riscrivere l'eq.(198) in forma simmetrica e quindi sostituire alle variabili classiche gli operatori corrispondenti

$$p_r = \frac{1}{2} \left(\vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} + \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} \right) \quad (199)$$

Dimostriamo che la relazione di commutazione dell'operatore eq.(199) con la variabile r soddisfa l'eq.(197) e quindi p_r è l'operatore momento coniugato a r :

$$\begin{aligned} [r, p_r] &= \frac{1}{2} \left\{ r\vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} + \vec{r} \cdot \vec{p} - \vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p}r \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ 3i\hbar + r\vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} - \frac{1}{r} \vec{p} \cdot \vec{r}r - 3i\hbar \right\} \\ &= \frac{1}{2r} \left\{ r^2 \vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r^2} - \vec{p} \cdot \vec{r} \right\} r \\ &= -\frac{1}{2r} \left\{ \vec{p} \cdot \vec{r} - (2i\hbar r^2 + \vec{p} \cdot \vec{r}r^2) \frac{1}{r^2} \right\} r = i\hbar \end{aligned} \quad (200)$$

Nell'eq.(200), il secondo rigo è stato ricavata dal primo usando l'eq.(191) e l'ultimo rigo usando l'identità

$$r_i^2 p_j = i\hbar \delta_{ij} 2r_i + p_j r_i^2 \quad (201)$$

Una dimostrazione alternativa dell'eq.(200) è la seguente

$$\begin{aligned} [r, p_r] &= \frac{1}{2} \{ r\vec{p} \cdot \vec{e}_r - \vec{p} \cdot \vec{e}_r r + r\vec{e}_r \cdot \vec{p} - \vec{e}_r \cdot \vec{p}r \} \\ &= \frac{1}{2} \{ r(\vec{p} \cdot \vec{e}_r) + r\vec{e}_r \cdot \vec{p} - (\vec{p} \cdot \vec{e}_r)r - \vec{e}_r \cdot (\vec{p}r) - \vec{e}_r r \cdot \vec{p} + r\vec{e}_r \cdot \vec{p} - \vec{e}_r \cdot (\vec{p}r) - \vec{e}_r r \cdot \vec{p} \} \\ &= \frac{1}{2} \{ -2\vec{e}_r \cdot (\vec{p}r) \} \\ &= \left\{ i\hbar \sum_j \frac{x_j}{r} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} r \right) \right\} = i\hbar \sum_j \frac{x_j}{r} \frac{x_j}{r} = i\hbar \end{aligned} \quad (202)$$

Mostriamo adesso che l'eq.(199) è equivalente all'eq.(196).

$$\frac{1}{2} \left(p_j \frac{x_j}{r} + \frac{x_j}{r} p_j \right) = -i\hbar \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{x_j}{r} \right) + \frac{x_j}{r} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \quad (203)$$

Sommando su j si ha

$$\frac{1}{2} \left(\frac{3}{r} - \frac{1}{r} + 2 \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (204)$$

L'operatore p_r è hermitiano se $r\psi(r)_{r \rightarrow 0} \rightarrow 0$. Infatti si ha

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \psi^*(r) \left[-i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi(r) \right] r^2 dr \\ &= \psi^*(r)\psi(r)r^2 \Big|_0^\infty + \int_0^\infty \left[-i \left(\frac{\partial}{\partial r} \right) \psi(r) \right]^* \psi(r) r^2 dr + i \int_0^\infty \psi^*(r)\psi(r) r dr \\ &= \int_0^\infty \left[-i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi(r) \right]^* \psi(r) r^2 dr \end{aligned} \quad (205)$$

Dove abbiamo usato le condizioni $r\psi(r)_{r \rightarrow 0} \rightarrow 0$ e $\psi(r)_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ per annullare il primo termine del lato destro dell'equazione precedente. L'operatore $-i \frac{\partial}{\partial r}$ non è hermitiano. Infatti si ha

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \psi^*(r) \left(-i \frac{d}{dr} \psi(r) \right) r^2 dr \\ &= \psi^*(r)\psi(r)r^2 \Big|_0^\infty + \int_0^\infty \left(-i \frac{d}{dr} \psi(r) \right)^* \psi(r) r^2 dr + i2 \int_0^\infty \psi^*(r)\psi(r) r dr \\ &= \int_0^\infty \left(-i \frac{d}{dr} \psi(r) \right)^* \psi(r) r^2 dr + i2 \int_0^\infty \psi^*(r)\psi(r) r dr \end{aligned} \quad (206)$$

L'eq.(194) può essere riscritta

$$\vec{p}^2 = \frac{\vec{l}^2}{r^2} + p_r^2 \quad (207)$$

Sostituendo l'eq.(207) nell'eq.(185) l'equazione di Schrödinger stazionaria si scrive

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{l}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = E_{nl} \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \quad (208)$$

dove abbiamo usato la proprietà dell'esistenza di una base comune per gli operatori H , \vec{l}^2 e l_z , conseguenza dell'eq.(186), e abbiamo scritto un indice n discreto perché in seguito siamo interessati agli stati legati, descritti da uno spettro discreto. Inoltre abbiamo usato l'invarianza eq.(186) per dedurre che gli autovalori E_{nl} non possono dipendere da m , degenerazione dei livelli di ordine $2l + 1$. Infatti si ha

$$\begin{aligned} H l_\pm \psi_{nlm} &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} H \psi_{nl, m \pm 1} \\ &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} E_{nl, m \pm 1} \psi_{nl, m \pm 1} = l_\pm H \psi_{nlm} \\ &= E_{nl, m} l_\pm \psi_{nl, m} = E_{nl, m} \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \psi_{nl, m \pm 1} \\ &\implies E_{nl, m} = E_{nl, m \pm 1} = E_{nl} \end{aligned} \quad (209)$$

La soluzione ψ_{nlm} deve soddisfare la condizione di essere a quadrato integrabile

$$\int |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega < \infty \quad (210)$$

Per risolvere l'eq.(208) procediamo per separazione di variabile e, esplicitando le autofunzioni di \vec{l}^2 , scriviamo

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \chi_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (211)$$

L'eq.(208) diventa quindi un'equazione differenziale nella variabile r , detta equazione di Schrödinger radiale:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] \chi_{nl}(r) = E_{nl} \chi_{nl}(r) \quad (212)$$

Introducendo la funzione

$$u_{nl}(r) = r \chi_{nl}(r) \quad (213)$$

ed facendo uso della normalizzazione delle armoniche sferiche l'eq.(210) diventa

$$\int_0^\infty |u_{nl}(r)|^2 dr < \infty \quad (214)$$

L'eq.(212) per la funzione $u_{nl}(r)$ diventa

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r) \quad (215)$$

Quindi l'equazione di Schrödinger in tre dimensioni con un potenziale centrale è stata ridotta ad un'equazione in una sola variabile con un potenziale effettivo dato da

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (216)$$

Il secondo termine viene usualmente chiamato il termine di *potenziale centrifugo* o di *barriera centrifuga* perchè è diverso da zero per $l \neq 0$ e cresce con il crescere di l , quindi con l'aumentare del valore del momento angolare. La differenza tra l'eq.(215) e l'equazione di Schrödinger in una dimensione sta nella normalizzazione. In una dimensione richiediamo

$$\int dx |\psi(x)|^2 < \infty \quad (217)$$

in tre dimensioni

$$\int dV |\psi(r)|^2 = \int r^2 dr \frac{|u(r)|^2}{r^2} < \infty \quad (218)$$

Ne segue che, per gli stati legati, si ha

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |u(r)| \leq \frac{M}{r^{1/2+\varepsilon}} \quad M = \text{cost} \quad \varepsilon > 0 \quad (219)$$

Inoltre dobbiamo richiedere che, per $V(r) \neq \delta(\vec{r})$, $u(r)_{r \rightarrow 0} \rightarrow 0$. In effetti si ha all'origine

$$\Delta \psi = \Delta \frac{u(r)}{r} = \delta(\vec{r}) u(r \rightarrow 0) \quad (220)$$

L'eq.(215) è esattamente risolubile in pochi casi, tra cui l'oscillatore armonico tridimensionale e il potenziale coulombiano che sono di fondamentale importanza in fisica. Possiamo fare delle osservazioni generali sul tipo di soluzioni dell'eq.(215), studiandone i limiti $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$. Nel limite $r \rightarrow \infty$ il termine centrifugo $l(l+1)/r^2 \rightarrow 0$ e può essere trascurato. Se $rV(r)_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$, possiamo trascurare anche il termine di potenziale e l'eq.(215) diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r) \quad (221)$$

Le cui soluzioni sono

- $E > 0$ - La soluzione è una funzione esponenziale immaginaria, con comportamento oscillatorio all'infinito, non a quadrato integrabile. Lo spettro di energia è continuo.
- $E < 0$ - La soluzione accettabile è una funzione esponenziale reale

$$u_{nl}(r)_{r \rightarrow \infty} \longrightarrow e^{-kr} \quad k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \quad (222)$$

In questo caso si dimostra che lo spettro è discreto.

Nel limite $r \rightarrow 0$, se $rV(r)_{r \rightarrow 0} \rightarrow \text{cost.}$, possiamo trascurare il termine di potenziale ed il termine in $1/r$ rispetto al termine centrifugo e l'eq.(215) si scrive

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_{nl}(r) = 0 \quad (223)$$

ed ammette due soluzioni

$$u_{nl}(r) \propto r^{l+1} \quad u_{nl}(r) \propto r^{-l} \quad (224)$$

La seconda soluzione non è accettabile perchè la funzione $u_{nl}(r)$ all'origine può al più andare come una costante. Nel caso di $E < 0$ la funzione $u_{nl}(r)$, si annulla all'origine ed all'infinito, quindi deve ammettere almeno un punto di massimo, essendo $u_{nl}(r)$ continua con derivata prima continua (si suppone che $V(r)$ abbia al più discontinuità finite). In conclusione la forma della funzione $u_{nl}(r)$, per $E < 0$, è del tipo

$$u_{nl}(r) = r^{l+1} e^{-kr} f(r) \quad (225)$$

dove la funzione $f(I)$ è determinata dalla natura dettagliata del potenziale $V(r)$.

Introducendo la funzione

$$f_l(\rho) = \frac{u_l(\rho)}{\rho} \quad (226)$$

L'eq.(212) assume la forma

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] f_l(\rho) = 0 \quad (227)$$

L'eq(227) è nota nella letteratura matematica come equazione di Bessel (vedi Messiah - Vol. 1 - App. B). La soluzione generale dell'eq(227) si esprime come combinazione lineare di due soluzioni particolari:

1. $j_l(\rho)$, detta funzione di Bessel di prima specie
2. $n_l(\rho)$, detta funzione di Bessel di seconda specie o funzione di Neumann.

Esplicitamente si ha per le funzioni di Bessel di ordine 0 ⁵

$$j_0(\rho) = \frac{\sin(\rho)}{\rho} \quad n_0(\rho) = \frac{\cos(\rho)}{\rho} \quad (228)$$

Le espressioni esplicite delle funzioni di ordine successive si calcolano dalle formule ⁶

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l j_0(\rho) \quad n_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l n_0(\rho) \quad (229)$$

Ci interessano i comportamenti di queste funzioni all'origine ed all'infinito:

$$j_l(\rho)_{\rho \rightarrow 0} \sim \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \quad n_l(\rho)_{\rho \rightarrow 0} \sim \rho^{-l-1} \frac{(2l+1)!!}{(2l+1)} \quad (230)$$

$$j_l(\rho)_{\rho \rightarrow \infty} \sim \frac{\sin(\rho - l\pi/2)}{\rho} \quad n_l(\rho)_{\rho \rightarrow \infty} \sim \frac{\cos(\rho - l\pi/2)}{\rho} \quad (231)$$

Sono utili le funzioni di Hankel che sono combinazioni lineari delle funzioni di Bessel ⁷

$$h^{(\pm)}(\rho) = n_l(\rho) \pm i j_l(\rho) \quad (232)$$

$$h^{(\pm)}(\rho)_{\rho \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{\rho} e^{\pm i(\rho - l\pi/2)} \quad (233)$$

La richiesta di un comportamento regolare della funzione d'onda all'origine, $u_l(0) = 0 \implies f_l(0)$ *finita*, ci va scartare le funzioni n_l come soluzioni accettabili. Quindi si ha

$$f_l(\rho) = A_l j_l(\rho) \quad A_l = \text{cost.} \quad (234)$$

e la soluzione dell'eq.(208) è

$$\psi_{(k)lm}(r, \theta, \phi) = A_l j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (235)$$

E Buca di potenziale sferica

Nel seguito, assumendo che il potenziale $V(r)$ assume un valore costante in una regione limitata, studiamo varie situazioni.

⁵In alcuni testi la funzione di Bessel di secondo tipo $n_0(\rho)$ è definita con un segno negativo.

⁶Il fattore $(-1)^l$ è convenzionale.

⁷In alcuni testi il fattore moltiplicativo i è posto dinanzi la funzione n_l .

1. Consideriamo il caso di una particella confinata in una sfera, cioè il potenziale costante dato da

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r > a \\ 0 & r < a \end{cases}$$

Studiamo gli autovalori e le autofunzioni dell'hamiltoniana eq.(208) per valori dell'energia $E > 0$.

L'eq.(208) diventa l'equazione di Schrödinger in coordinate polari per una particella libera con le condizioni al contorno:

$$\psi(r \geq a, \theta, \phi) = 0 \quad (236)$$

Definiamo

$$k = \sqrt{2mE} \quad \rho = kr \quad (237)$$

Quindi la soluzione dell'eq.(208) è (per $r < a$)

$$\psi_{(k)lm}(r, \theta, \phi) = A_l j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (238)$$

dove i valori di k sono tali da soddisfare l'eq.(236) che implica

$$j_l(ka) = 0 \quad (239)$$

Siccome la funzione di Bessel per ogni valore di l ha un numero infinito di zeri, per ogni valore di l esistono un numero infinito (numerabile) di valori di k e quindi dell'energia che soddisfano l'eq.(239). Discutiamo più in dettaglio il caso $l = 0$ usando la funzione di Bessel di ordine 0 data dall' eq.(228). Quindi l'eq.(239) ha soluzione per

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n \in \mathbf{Z}_+ \implies E_n = \frac{(n\pi)^2}{2ma^2} \quad (240)$$

La costante di normalizzazione A_0 si calcola da

$$\int r^2 dr d\Omega |\psi_{n00}(r, \theta; \phi)|^2 = \int_0^a dr |A_0|^2 \frac{(\sin(k_n r))^2}{k_n^2} = 1 \quad (241)$$

dove abbiamo usato l'ortonormalizzazione delle armoniche sferiche, in particolare $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. Effettuando l'integrale si trova, scegliendo la fase in modo che A_0 sia reale

$$A_0 = \frac{\sqrt{2n\pi}}{a} \quad (242)$$

2. Studiamo gli stati legati prodotti da una buca sferica

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > a \\ -V_0 & r < a \end{cases}$$

Dobbiamo risolvere l'eq(208) per valori dell'energia $-V_0 < E < 0$ Definiamo:

$$\kappa = \sqrt{2m|E|} \quad k_0 = \sqrt{2mV_0} \quad k = \sqrt{2m(V_0 - |E|)} \quad (243)$$

L'equazione radiale di Schrödinger, eq.(215) , assume la forma:

$$a > r \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{2mr^2} + k^2 \right] u_l(r) = 0 \quad (244)$$

$$r > a \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{2mr^2} - \kappa^2 \right] u_l(r) = 0 \quad (245)$$

Trasformando l'equazione radiale in equazione di Bessel come nel caso precedente, si trova che le soluzioni dell'eq.(244) e dell'eq.(245), che sono rispettivamente regolari nell'origine e vanno a zero all'infinito, sono:

$$u_l(r) = A_l k r j_l(kr) \quad a > r \quad u_l(r) = B_l k r h_l^{(1)}(i\kappa r) \quad r > a \quad (246)$$

dove $h_l^{(1)}$ è la funzione di Hankel di primo tipo (vedi Messiah, Vol. I - App. B)

$$h_l^{(1)}(z) = n_l(z) + i j_l(z) \quad (247)$$

Le costanti A_l e B_l sono determinate dalle condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata (o dalla continuità della derivata logaritmica) al punto $r = a$ e dalla normalizzazione. Studiamo il caso $l = 0$. Le derivate logaritmiche della funzione sul punto $r = a$ dall'interno e dall'esterno sono rispettivamente (denotiamo con $f'(a)$ la derivata della funzione $f(r)$ rispetto alla variabile r calcolata nel punto $r = a$)

$$\frac{j_0'(ka)}{j_0(ka)} = k \cot ka - \frac{1}{a} \quad (248)$$

$$\frac{h_0^{(1)}(i\kappa a)}{h_0^{(1)}(i\kappa a)} = -\frac{1 + \kappa a}{a} \quad (249)$$

dove abbiamo usato l'eq.(228) e

$$\begin{aligned} h_0^{(1)}(i\kappa r) &= n_0(z) + i j_0(z) \\ &= \frac{\cos(i\kappa r)}{i\kappa r} + i \frac{\sin(i\kappa r)}{i\kappa r} = \frac{e^{-\kappa r}}{i\kappa r} \end{aligned} \quad (250)$$

Uguagliando le due espressioni si ottiene l'equazione trascendente

$$\cot ka = -\frac{\kappa}{k} \quad \longrightarrow \quad \kappa = -\frac{k}{\tan ka} \quad (251)$$

la cui soluzione grafica o numerica determina i valori dell'energia degli stati legati con $l = 0$ (onda s). La costante di normalizzazione si determina dall'integrale

$$\int^a r^2 dr |A_0|^2 (j_0(kr))^2 + \int_0^\infty r^2 dr |B_0|^2 |h_0^{(1)}(i\kappa r)|^2 = 1 \quad (252)$$

usando

$$A_0 j_0(ka) = B_0 h_0^{(1)}(i\kappa a) \quad (253)$$

dove i valori di k e κ soddisfano l'eq.(251) Esiste una formula che determina il numero di stati legati in onda s . Da questa formula, che non calcoliamo qui, si deduce che, contrariamente al caso unidimensionale in cui esiste sempre almeno uno stato legato, in 3 dimensioni esistono casi in cui non ci sono stati legati. Possiamo renderci conto di questo fatto da uno studio dell'eq.(251). Dall'eq.(243) si ha

$$k = (2mV_0 - \kappa^2)^{1/2} \longrightarrow \kappa^2 + k^2 = 2mV_0 \quad (254)$$

Nel piano k (ascissa), κ (ordinata) l'eq.(254) rappresenta il primo quadrante di una circonferenza ($k, \kappa \geq 0$). L'eq.(251) ammette soluzione se la curva $-\frac{k}{\tan ka}$, che ha un numero infinito di discontinuità nei punti $ka = n\pi$, ha uno o più punti di intersezione con il quadrante della circonferenza, per $ka \geq \pi/2$, modulo π . La circonferenza interseca l'asse k delle ascisse nel punto $k = \sqrt{2mV_0}$ (per $\kappa = 0$). La curva $\frac{k}{\tan ka}$ interseca l'asse delle ascisse per $\tan ka = \infty \rightarrow ka = \pi/2$ (scegliendo il valore più piccolo di k). Quindi se

$$V_0 < \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 \quad (255)$$

la curva $\frac{k}{\tan ka}$ interseca l'asse delle ascisse in un punto $k > \sqrt{2mV_0}$ e quindi l'eq.(251) non ha soluzione e non ci sono stati legati in onda s .

Referenze

- A. Messiah - *Quantum Mechanics - Vol.I*
- J. Sakurai - *Modern Quantum Mechanics*
- K. Gottfried - *Quantum Mechanics - Vol.I: Fundamentals*